

# LOQ4002 - Reatores Químicos

## Chemical Reactors

Créditos-aula: 4

Créditos-trabalho: 0

Carga horária: 60 h

Ativação: 01/01/2024

Departamento: Engenharia Química

Curso (semestre ideal): EQD (7), EQN (8)

## Objetivos

Capacitar os alunos a calcular os parâmetros de projeto de reatores ideais, a distinguir entre um reator ideal e um real, e a compreender a influência da temperatura e pressão no projeto de reatores químicos.

*Enable students to calculate the project parameters of ideal reactors, distinguish between an ideal and a real reactor, and understand the influence of temperature and pressure on the design of chemical reactors.*

## Docente(s) Responsável(eis)

5963230 - Leandro Gonçalves de Aguiar

6310316 - Liana Alvares Rodrigues

## Programa resumido

1. Introdução a Reatores.
2. Modelos Ideais de Reatores Químicos Isotérmicos Reações Simples.
3. Reações Múltiplas em Reatores Ideais.
4. Efeitos Térmicos em Reatores Ideais.
5. Reatores Catalíticos Heterogêneos.
6. Reatores Não-Ideais

*1. Introduction to Reactors, 2. Ideal Models of Isothermal Chemical Reactors - Simple Reactions, 3. Multiple Reactions in Ideal Reactors, 4. Thermal Effects in Ideal Reactors, 5. Heterogeneous Catalytic Reactors, 6. Non-Ideal Reactors.*

## Programa

1. Introdução a Reatores: Conceitos básicos
2. Modelos Ideais de Reatores Químicos Isotérmicos Reações Simples:
  - 2.1) Equações fundamentais de projeto de reatores
  - 2.2) Reator tanque descontínuo (BSTR)
  - 2.3) Reator tanque de mistura contínuo (CSTR)
  - 2.4) Reator tubular de fluxo pistonado (PFR)
  - 2.5) Comparação de desempenho de reatores CSTR e PFR
  - 2.6) Reatores CSTR em cascata
  - 2.7) Associação mista de reatores em série: CSTR e PFR
  - 2.8) Reatores com reciclo
  - 2.9) Reações auto-catalíticas
  - 2.10) Reatores semi-contínuos
3. Reações Múltiplas em Reatores Ideais:
  - 3.1) Noções gerais: otimização, rendimento e seletividade
  - 3.2) Reações paralelas e reações em série
  - 3.3) Sistemas com reações série-paralelo: reações de múltipla substituição e reações poliméricas
  - 3.4) Problemas simples de otimização
4. Efeitos Térmicos em Reatores Ideais:
  - 4.1) Equação do balanço de energia
  - 4.2) Balanço de energia aplicado ao BSTR
  - 4.3) Balanço de energia aplicado ao CSTR
  - 4.4) Balanço de energia aplicado ao PFR
  5. Reatores Catalíticos Heterogêneos:
    - 5.1) Introdução
    - 5.2) Efeito dos processos físicos sobre a taxa de reação
    - 5.2.1)

Fenômenos interfases5.2.2 Fenômenos intrapartícula5.2.3 Difusão e reação em catalisadores porosos5.3) Cálculo de reatores de leito fixo5.4) Reatores trifásicos6. Reatores Não-Ideais6.1) A distribuição dos tempos de residência6.2) Modelos dos tanques contínuos em série6.3) Modelo da dispersão axial

*1. Introduction to Reactors: Basic concepts.2.Ideal Models of Isothermal Chemical Reactors - Simple Reactions: 2.1) Fundamental equations for reactor design. 2.2) Batch reactor (BSTR). 2.3) Continuous stirred-tank reactor (CSTR). 2.4) Plug-flow reactor (PFR). 2.5) Performance comparison of CSTR and PFR. 2.6) Cascade CSTR reactors. 2.7) Mixed association of reactors in series: CSTR and PFR. 2.8) Reactors with recycle. 2.9) Auto-catalytic reactions. 2.10) Semi-continuous reactors.3.Multiple Reactions in Ideal Reactors: 3.1) General concepts: optimization, yield, and selectivity. 3.2) Parallel reactions and series reactions.3.3) Systems with series-parallel reactions: multiple substitution reactions and polymerization reactions.3.4) Simple optimization problems.4.Thermal Effects in Ideal Reactors: 4.1) Energy balance equation. 4.2) Energy balance applied to BSTR. 4.3) Energy balance applied to CSTR. 4.4) Energy balance applied to PFR. 5.Heterogeneous Catalytic Reactors: 5.1) Introduction. 5.2) Effect of physical processes on reaction rate:5.2.1 - Interfacial phenomena. 5.2.2 - Intraparticle phenomena. 5.2.3 - Diffusion and reaction in porous catalysts. 5.3) Calculation of fixed-bed reactors. 5.4) Three-phase reactors.6.Non-Ideal Reactors: 6.1) Residence time distribution. 6.2) Model for continuous stirred-tanks in series. 6.3) Axial dispersion model.*

## Avaliação

**Método:** Duas provas escritas e eventual apresentação de trabalho.

**Critério:** Nota(N) = 50% Prova P1 + 50% Prova P2. Os pesos poderão ser redefinidos caso seja incorporada nota de trabalho.

**Norma de recuperação:** Média Final = (N + Prova Recuperação)/2

## Bibliografia

Bibliografia Básica :FOGLER, H. S. Elementos de Engenharia das Reações Químicas. 3. ed. Rio de Janeiro: LTC Editora, 2002.LEVENSPIEL, O. Chemical Reaction Engineering. 3. ed. New York: John Wiley & Sons, 1998.HILL, C.G. An Introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design. New York: John Wiley&Sons, 1977.Bibliografia Complementar:SMITH, J.M. Chemical Engineering Kinetics. 3rd. ed. New York : McGraw-Hill, 1981.DENBIGH, K.; TURNER, R. Introduction to Chemical Reaction Design. Cambridge: Cambridge University Press, 1970.FROMENT, G.F.; BISCHOFF, K.B. Chemical Reactor Analysis And Design. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 1990.AGUIAR, L. G. Problemas de cinética e reatores químicos. Curitiba: Appris Editora, 2023.VAN SANTEN, R.A.; Niemantsverdriet, J.W. Chemical kinetics and catalysis. New York: Plenum Press, 1995.Missen, R.W.; Mims, C.A.; Saville, B.A. Introduction to chemical reaction engineering and kinetics. New York: J. Wiley, 1999.Rothenberg, G. Catalysis: concepts and green applications. Weinheim: Wiley-VCH, 2008 Chichester.Salmi, T.O.; Mikkola, J.; Warna, J.P. Chemical reaction engineering and reactor technology. Boca Raton: CRC Press/Taylor & Francis, 2011.

## Requisitos

LOQ4003 - Cinética Química Aplicada (Requisito fraco)