Exemplo 16: A reação elementar A + B → C + D, ocorre isotermicamente em um reator em semibatelada. B é alimentado a uma vazão de 0,05 L/s (C_{B0} = 0,025 mol/L). O volume da solução de A (C_{A0}=0,05 mol/L) contida no reator é de 5 L. A velocidade específica da reação é de 2,2 L/mol s. Qual o tempo necessário para que a concentração de A e B sejam iguais? Qual a conversão e o volume neste ponto?

Exemplo 19: A reação catalítica:

$$A \overset{k_1}{\rightarrow} B \overset{k_2}{\rightarrow} C$$

As reações 1 e 2 são irreversíveis e de primeira ordem. Determine a concentração de B em função do tempo espacial para um reator PBR.

Exemplo 22: A pressão de vapor na saída de um reator adiabático, em que a temperatura é de 360 K, é de 1,5 MPa para o isobuteno. Esta pressão é maior que a pressão de ruptura do reator de vidro utilizado. Há um estoque de 10 reatores tubulares parcialmente isolados (Ua=5000 kJ/h m^3 K), cada um com 6 m^3, disponívies para uso. A temperatura de entrada é baixada para 310 K, anteriormente esta temperatura era de 330 K. Os reatores são resfriados por convecção natural, em que a temperatura ambiente é de 37 °C. A temperatura em qualquer um dos reatores não pode subir acima de 325 K. Faça um gráfico de X, X_e, T e $-r_A$ ao longo do reator. A temperatura sobe acima de 325 K?

Dado: $F_0 = 163\ kmol/h;\ k_{360\ k} = 31{,}1\ h^{-1};\ C_{A0} = 9{,}3\,\frac{mol}{L};\ K_{e,333\ K} = 3{,}03;\ \Delta H° = -6900\,\frac{J}{mol}; E = 65{,}7\,\frac{kJ}{mol}; Cp_{i-pentano} = 161\,\frac{J}{mol\ K};\ Cp_{i-butano} = 141\,\frac{J}{mol\ K}; Cp_{n-butano} = 141\,\frac{J}{mol\ K}; 10\%\ em\ mol\ de\ inerte\ na\ alimentação; A \leftrightarrow B\ (elementar)$

Obs: os reatores devem ser utilizados em paralelo e a vazão dividida de modo que a máxima eficiência seja atingida.

Exemplo 23: Uma das etapas chave na fabricação do anidrido acético é o craqueamento da acetona a ceteno e metano.

$$CH_3COCH_3 \rightarrow CH_2CO + CH_4$$

Esta reação é de primeira ordem e sua velocidade específica é:

$$lnk = 34{,}34 - \frac{34222}{T}$$

Sendo k dado em s^{-1} e T em K.

Deseja-se alimentar 7850 kg de acetona por hora em um reator tubular. O reator consiste em 1000 tubos de 0,0254 m de diâmetro e 10 m de comprimento cada. Estes tubos estão arranjados em paralelo.

Considerando três casos:

<u>*Caso 1*</u>**:** reator operando adiabaticamente

<u>*Caso 2*</u>**:** reator com trocador de calor, em que o coeficiente de TC é 110 J/m^2 s K e a temperatura do meio de aquecimento é constante e igual a 1150 K.

<u>Caso 3</u>: o trocador de calor do caso 2 tem agora um meio de aquecimento variável. Ar entra cocorrente numa temperatura de 1250 K e com vazão molar de 0,11 mol/s. O calor específico do ar é de 34,5 J/mol K.

Faça um gráfico da conversão e da temperatura ao longo do reator.

Dado: $T_0 = 1035K; P_0 = 1{,}6\ atm;\ H°_{acetona} = -216{,}67\frac{KJ}{mol}; H°_{ceteno} = -61{,}09\frac{KJ}{mol}; H°_{metano} = -74{,}81\frac{KJ}{mol}\ Cp_{acetona} = 163\frac{J}{mol\ K};\ Cp_{ceteno} = 83\frac{J}{mol\ K}; Cp_{metano} = 71\frac{J}{mol\ K};$

Exemplo 25: As seguintes reações elementares em fase gasosa ocorrem em um PFR.

$$A \xrightarrow{k_1} B$$

$$2A \xrightarrow{k_2} C$$

A puro é alimentado a uma vazão de 100 mol/s a uma temperatura de 150 °C e uma concentração de 0,1 mol/dm^3. Determine os perfis de temperaturas e de vazões ao longo do reator.

Dado: $\Delta H_{1A} = -20\,\frac{KJ}{mol}$; $\Delta H_{2A} = -60\,\frac{Kcal}{mol}$; $Cp_A = 90\,\frac{J}{mol\ K}$; $Cp_B = 90\,\frac{J}{mol\ K}$; $Cp_c = 180\,\frac{J}{mol\ K}$; $T_a = 100°C$; $V = 5\,m^3$; $K_e = 100000$; $Ua = 4000\,\frac{J}{s\,m^3\,K}$; $k_{1A} = 10e^{4000\left(\frac{1}{300}-\frac{1}{T}\right)}\,(s^{-1})$; $k_{2A} = 0{,}09e^{9000\left(\frac{1}{300}-\frac{1}{T}\right)}\,\frac{L}{mol\ s}$

Exemplo 28: um reator batelada, usado para produzir nitroanilina a partir de amônia com o-nitroclorobenzeno, era operado com 1/3 da capacidade.

A reação era conduzida a 175ºC e 500 psi. A temperatura da água de refrigeração do trocador de calor é de 25ºC, mantida ao longo do trocador.

Sempre que o trocador falhava os técnicos conseguiam restaurar a operação em cerca de 10 min.

As seguintes alterações foram feitas:

- O reator foi carregado com 9,044 kmol de A, 33 kmol de B e 103,7 kmol de água. Normalmente o reator era carregado com 3,17 kmol de A, 43 kmol de B e 103,6 kmol de água.
- Após 45 min do início da reação, a refrigeração falhou por cerca de 10 min. O mesmo já havia acontecido com 1/3 de carga, mas nada havia acontecido.

- O reator tem uma válvula de segurança na qual a ruptura do disco ocorre a 700 psi e 265ºC. A pressão do reator diminuiria com a ruptura do disco, causando a vaporização da água, sendo a mistura resfriada pela liberação do calor latente de vaporização (água absorve calor para vaporizar).

Plote a trajetória temperatura-tempo por um período de 120 min após a mistura dos reagentes. Mostre que as três condições teriam que ter acontecido para a explosão.

1. Aumento da carga de A
2. Interrupção da refrigeração
3. Falha do sistema de alívio de pressão

Dados: $-r_A = k_A C_A C_B;\ k_A = 0{,}00017 \frac{m^3}{kmol\ \ min}\ a\ 188°C;\ V_T = 5{,}119\ m^3;\ V_{1/3} = 3{,}26\ m^3;\ \Delta H = -5{,}9 \times 10^5 \frac{cal}{mol}; E = 11273 \frac{cal}{mol};\ \Delta C_P = 0; UA = 35{,}83\ \frac{kcal}{\text{min}\ °C};\ T_a = 298\ K;\ \dot{m}_{vap} = 830 \frac{kg}{min};\ \Delta H_{vap} = 540 \frac{kcal}{g}; Cp_A = 40 \frac{cal}{mol\ \ K};\ Cp_{água} = 18 \frac{cal}{mol\ \ K}; Cp_B = 8{,}38 \frac{cal}{mol\ \ K};\ A + 2B \rightarrow C + D$