- ***Exemplo:*** As Indústrias Químicas SA tem como um de seus produtos principais o 3-vinil-1,5-hexadieno que é processado em um tanque com agitação que funciona com cargas intermitentes. Você é convidado a analisar alguns parâmetros deste reator e as informações que você dispõe para a sua análise são as seguintes:

- I) A reação que ocorre no interior do reator é a isomerização monomolecular do 1, 2, 6-heptadrieno em 3-vinil-1,5-hexadieno.
- A→B
- II) Esta reação foi estudada em escala piloto e pode-se verificar que a sua cinética é de primeira ordem entre 170ºC e 220ºC.
- III) Experimentalmente determinou-se que a constante de velocidade varia com a temperatura de acordo com a tabela a seguir:

T (ºC)	172,2	187,7	202,6	218,1
k (s^{-1}) x 10^4	0,997	3,01	7,80	20,4

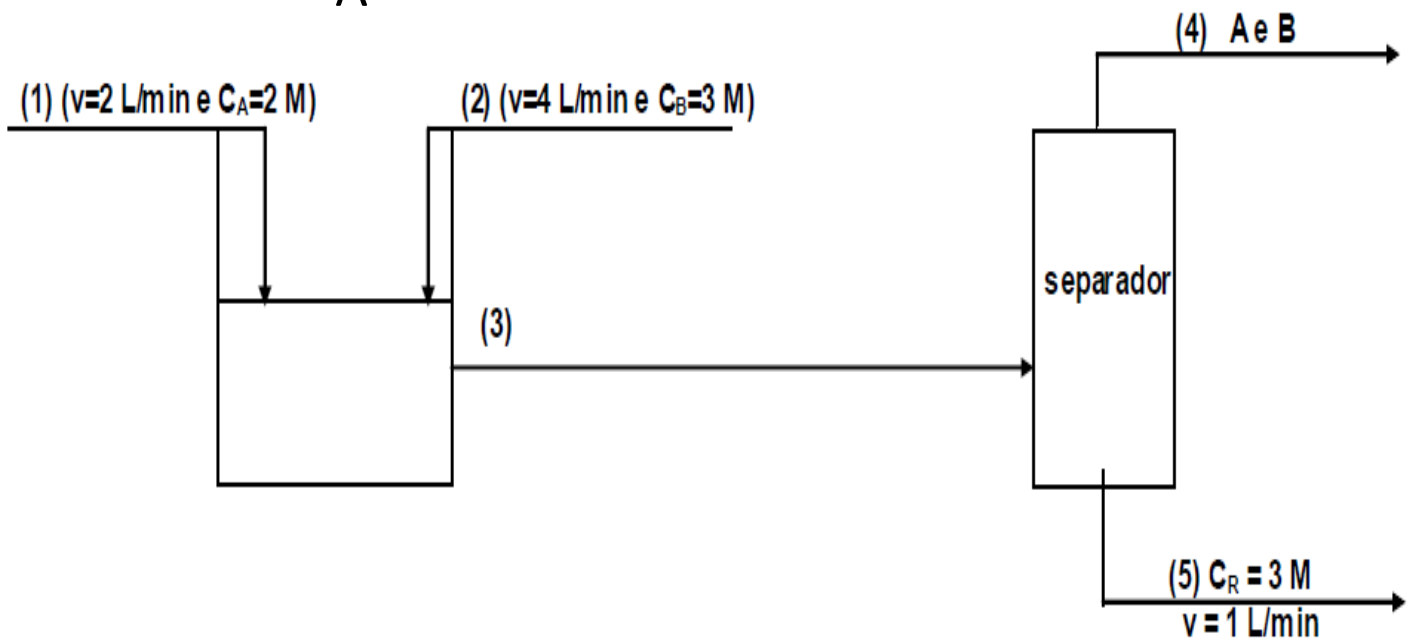
- IV) O reator utilizado tem um diâmetro de 2 metros e uma altura de 1,50 metros.
- V) O tempo entre o início da descarga de uma carga do reator e o término do carregamento de uma carga no reator é de 15 minutos.
- VI) O reagente utilizado (1,2,6-heptatrieno) é introduzido puro no reator e a sua concentração é de 2 mols/litro e a reação ocorre em fase líquida.

- VII) O reator está operando atualmente na temperatura de 180ºC.
- VIII) A conversão a ser obtida é de 70% do reagente em produto.
- IX) A empresa trabalha com 2 turnos de 8 horas continuamente.
- Calcular:
- a) a energia de ativação desta reação no intervalo de 170ºC a 220ºC.
- b) o tempo da reação para a conversão desejada a 180ºC.
- c) Quantas cargas são introduzidas diariamente no reator a 180ºC.
- d) Qual a produção em kg/dia de 3-vinil-l, 5-hexadieno?

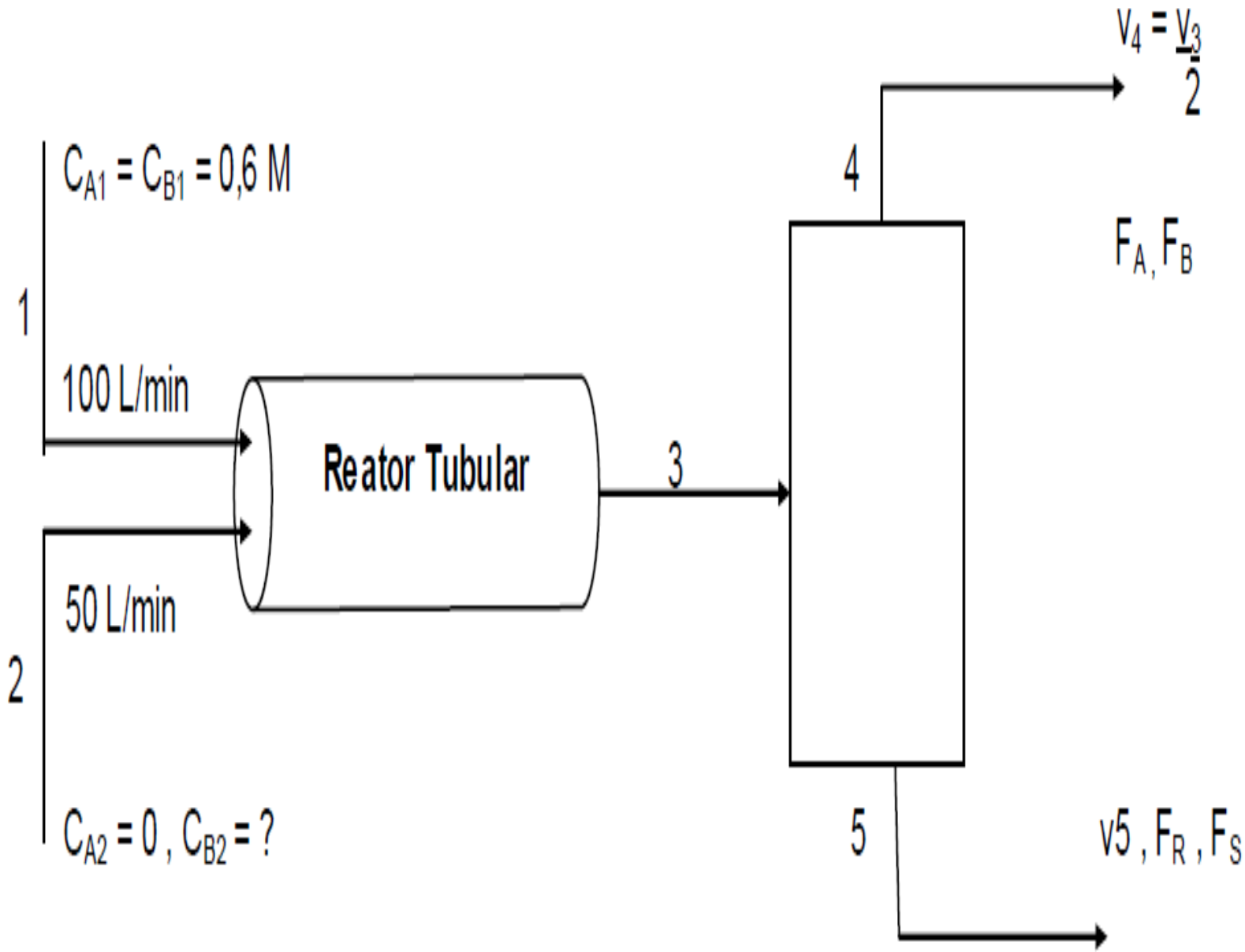
- **Exemplo:** Uma reação em fase gasosa, $A \rightarrow 2B$ ocorre a temperatura constante de 300K em um reator em batelada de volume variável equipado por um pistão mantido a pressão constante de 150 KPa. Inicialmente, 8 mols de A são introduzidos no reator. A reação que ocorre é de segunda ordem em relação a A, com a seguinte lei de velocidade:
- $-r_A = kC_A^2$; $k = 0{,}075\ Lmol^{-1}min^{-1}$
- Determine o tempo de reação para uma conversão final de 80%.

- ***Exemplo:*** Para a reação entre acido hidrocianidrico (HCN) e acetaldeído (CH_3CHO) em solução aquosa a lei de velocidade a 25°C e um certo pH é $-r_A = k_A C_A C_B$, onde $k_A = 0{,}210\ L mol^{-1} min^{-1}$. Se esta reação é realizada a 25°C em um reator CSTR, qual será o volume deste reator para que ocorra 75% de conversão de HCN, se a concentração da alimentação é 0,04 mol L^{-1} para cada reagente, e a velocidade de alimentação é de 2 L min^{-1}?
- Dado: HCN (A) + CH_3CHO (B) → $CH_3CH(OH)CN$

- **Exemplo:** A reação química elementar em fase líquida $2A + B \rightarrow 2R + 3S$ ocorre conforme o esquema abaixo. Determine a conversão do reagente crítico e o volume necessário de um CSTR para que esta conversão seja atingida.
- Dado: $k_A = 0{,}075\ L^2\ mol^{-2}\ min^{-1}$



- **Exemplo:**A reação em fase liquida $A + 2B \rightarrow R + 2S$ possui a seguinte equação de velocidade : $-r_A=10C_AC_B$ (mol/ L min).
- Esta reação será efetuada em um reator tubular, utilizando o esquema experimental mostrado na figura abaixo. As concentrações iniciais e A e B encontram-se em proporção estequiométrica na alimentação do reator. Determine o volume de reator tubular necessário para uma produção de 35 mols de S por minuto na corrente de saída 5 após o separador.
- Obs.: No separador, a eficiência de separação dos reagentes (corrente 4) e dos produtos (corrente 5) pode ser considerada como sendo 100%.


$V_4 = \frac{V_3}{2}$
$C_{A1} = C_{B1} = 0{,}6$ M
4
F_A, F_B
1
100 L/min
Reator Tubular
3
50 L/min
2
$C_{A2} = 0$, $C_{B2} = ?$
5
V5 , F_R , F_S

- **Exemplo:** Calcule o comprimento (em metros) de um reator tubular requerido para a produção de B a partir de A baseado nas seguintes considerações: A→B
- – o reator é alimentado com uma mistura de A (400 g/s) e N_2 (400g/s).
- – o reator opera a 1000 K e pressão atmosférica.
- - a reação é de primeira ordem irreversível.
- - a constante de velocidade da reação, na temperatura de 1000 K, é 0,254 s^{-1}
- - A conversão de A na saída do reator é de 25%
- - O diâmetro interno do reator é de 40 cm.
- -A massa molar de A é de 30 g/mol

- ***Exemplo:***A reação em fase gasosa: A + B → R + S é de segunda ordem e sua equação de velocidade é conhecida: $-r_A = 500 C_A C_B$ mol/ L min. Esta reação será realizada em um reator tubular de 100 mL que opera com os seguintes parâmetros de alimentação:
- (i) – vazão = 50 mL/min
- (ii) - $C_{A0} = C_{B0} = 0{,}01$ mol/L
- A - Qual a conversão obtida neste reator?
- Mantidas constantes as condições de alimentação:
- B) Qual o volume de um reator de mistura para se obter a mesma conversão?
- C – Qual a conversão a ser obtida em um reator de mistura de mesmo volume que o reator tubular?

- ***Exemplo:*** A reação elementar em fase gasosa A → 3R é efetuada em um reator
- contínuo operando a 100ºC e 10 atm com uma taxa de escoamento molar de 2,5 mol/min e uma conversão desejada de 80%.
- A– Calcule o volume de um reator tubular necessário para esta operação.
- B– Calcule o volume de um reator de mistura necessário para esta operação.
- Dados : k = 0,00456 $(min)^{-1}$ a 50ºC e Ea = 20.300 cal/mol

- ***Exemplo:*** Análises experimentais permitiram encontrar a velocidade da reação líquida (A → R) em função da concentração molar conforme mostrado na tabela abaixo onde ($-r_A$) é dado em mols/litro minutos e C_A em mols/litro.
- ($-r_A$) 0,05 0,1 0,2 0,33
- C_A 2 4 8 12
- Para vazão molar de 200 mol/min e concentração inicial de 20 mol/L:
- Qual o volume necessário de um CSTR para que a conversão atinja 60%?
- Qual o volume necessário de um PFR acoplado na saída do CSTR para que a conversão atinja 90%?
- Calcule a conversão em um reator tubular (300 L) ligado em série na saída de um CSTR (1600L)
- Calcule a conversão se um reator PFR (180 L) e um CSTR (300L) forem acoplados em paralelo, sendo a corrente dividida igualmente entre ambos?

- ***Exemplo:*** A reação em fase liquida A + 2B → 3R + S obedece a seguinte lei de velocidade:
- k = 1,05 L/mol h a 350K, ordem 2, 1 e -1 em relação a A, B e S, respectivamente
- Esta reação é testada em um reator CSTR a partir das seguintes condições de alimentação:
- (i) velocidade molar total da alimentação: 6 mol/h
- (ii) concentrações iniciais: C_{A0} = 1,0 mol/L, C_{B0} = 4,0 mol/L e C_{S0} = 1,0 mol/L
- A) Calcular o volume (V_1) deste reator quando a concentração de saída for de CA = 0,1 mol/L.
- B) Calcular a conversão em um reator CSTR com volume V_2 (50% do volume de V_1), mantidas inalteradas as condições de alimentação.
- C) Se um segundo reator CSTR com volume V_2 for colocado em série logo após o primeiro reator CSTR com volume V_2, explique qual deve ser a conversão deste segundo reator.
- D) Sabendo-se que a energia de ativação desta reação é de 13.500 cal/mol, em que temperatura o reator V_2 terá como concentração de saída: C_A = 0,1 mol/L.

- ***Exemplo:*** A reação elementar em fase líquida A → R ocorre a 25°C em uma combinação de dois reatores tubulares em série de 100 L cada e v = 50 L/h. A concentração de A na entrada do primeiro reator é 1,0 mol/L e a constante de velocidade desta reação a 25°C é 0,5 h^{-1}. Deseja-se saber a conversão de A no primeiro reator e no segundo reator.

- ***Exemplo:*** A reação elementar em fase líquida A → R ocorre a 25°C em uma combinação de dois reatores tubulares de 100 L cada em paralelo e v = 50 L/h. A concentração de A na entrada do primeiro reator é 1,0 mol/L e a constante de velocidade desta reação a 25°C é 0,5 h^{-1}. Deseja-se saber qual a máxima conversão de A. Qual a conversão se ao invés de dois PFRs fossem usados dois CSTRs de mesmo tamanho?

- ***Exemplo:***A reação líquida A → R ocorre em um reator tubular (C_0 = 0,294 mol/L). A alimentação possui 76,25% em peso de A e o restante em inertes.
- A alimentação global é de 420 mols/hora e sabe-se que a velocidade específica é de 0,999 min^{-1}.
- Determine:
- a) O volume do reator tubular para uma conversão de 80%.
- b) O volume de um reator mistura acoplado a saída deste reator tubular para uma conversão final de 94%.
- c) Qual a conversão obtida se ao invés de ser acoplado em série o CSTR fosse acoplado em paralelo ao PFR e a vazão fosse dividida igualmente entre os reatores?
- Dado: Peso molecular A = 44 g/mol e Peso molecular I = 28g/mol

- ***Exemplo:*** A reação na fase líquida, homogênea e de primeira ordem ($A \rightarrow P$), ocorre em um PFR ideal, isotérmico e com reciclo. A razão de reciclo é 1.
- Qual o volume do reator necessário para uma conversão de 90%?
- Qual a conversão em um PFR sem reciclo?
- Determine o volume necessário de um CSTR e de um PFR, ambos sem reciclo, para a mesma conversão.
- Dado: C_{A0} = 1,5 mol/L; F_{A0} = 100 mol/min e k_A = 0,15 min^{-1}

- ***Exemplo:*** Considere reação autocatalítica $A \rightarrow R$, com $-r_A = 5C_A C_R$ mol/l h. Desejamos processar 2,5 mol/L de A e 0,5 mol/L de R, sendo F_{A0}=60 mol/min. Qual o volume de necessário para uma conversão de 70 % em um PFR sem reciclo e um com reciclo (R=1)?

Exemplo 17: O reagente A se decompõe por meio de três reações simultâneas para formar três produtos: desejado (B) e indesejados (X e Y). Essas reações gasosas, são chamadas de Trambouze [AIChE J. 5, 384 (1959)]

$$A \overset{k_1}{\rightarrow} X \qquad -r_{1A} = 0{,}0001\ \frac{mol}{L\ s}$$

$$A \overset{k_2}{\rightarrow} B \qquad -r_{2A} = 0{,}0015 C_A\ \frac{mol}{L\ s}$$

$$A \overset{k_3}{\rightarrow} Y \qquad -r_{3A} = 0{,}008 C_A^2\ \frac{mol}{L\ s}$$

As velocidades específicas de reação são dadas a 300 K e as energias de ativação são E_1 = 10000 kcal/mol, E_2 = 15000 kcal/mol e E_3 = 20000 kcal/mol. Como e sob que condições a reação deve ocorrer para favorecer a produção de B em um CSTR. C_{A0} = 0,4 mol/L e v_0 = 2 L/s? Como seria a influência da temperatura se as energias de ativação fossem diferentes? Qual a conversão de A no CSTR? O que aconteceria com a seletividade se um PFR fosse acoplado em série ao CSTR, aumentando a conversão em 25%?

Exemplo 18: Para as reações:

$$A + B \overset{k_1}{\rightarrow} D \qquad r_D = k_1 C_A^{\alpha_1} C_B^{\beta_1}$$

$$A + B \overset{k_2}{\rightarrow} U \qquad r_U = k_2 C_A^{\alpha_2} C_B^{\beta_2}$$

Escolha o esquema que favorecerá a formação de D.

Exemplo 20: A reação de isomerização do n-butano (reação elementar) deve ocorrer adiabaticamente em fase líquida, sob alta pressão. Calcule os volumes de um CSTR e de um PFR necessários para processar 163 kmol/h a 70% de conversão de uma mistura de 90% de n-butano e 10% de i-pentano em mol.

Dado: $k_{360\ k} = 31{,}1\ h^{-1}$; $T_0 = 330\ K$; $C_{A0} = 9{,}3\frac{mol}{L}$; $K_{e,60\ °C} = 3{,}03$; $\Delta H° = -6900\frac{J}{mol}$; $E = 65{,}7\frac{kJ}{mol}$; $Cp_{i-pentano} = 161\frac{J}{mol\ K}$; $Cp_{i-butano} = 141\frac{J}{mol\ K}$; $Cp_{n-butan\ o} = 141\frac{J}{mol\ K}$

$$k = k_1 e^{E/R\left(\frac{1}{T_1}-\frac{1}{T}\right)} \qquad (27)$$

$$K_e = K_{e2} e^{\frac{\Delta H°}{R}\left(\frac{1}{T_2}-\frac{1}{T}\right)} \qquad (29)$$

Obs: Válida para reações nas quais $\Delta cp = 0$. Quanto maior o valor de Δcp, maior o erro na determinação da constante. Nestes casos a constante de equilíbrio deve ser calculada através da fórmula:

$$ln\left(\frac{K_{p(T)}}{K_{p(T1)}}\right) = \frac{\Delta H° - \Delta C_p T_R}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T}\right) + \frac{\Delta C_p}{R} ln\left(\frac{T}{T_1}\right) \qquad (30)$$

Exemplo 21: A reação $A + B \rightarrow C$ ocorre em um CSTR com capacidade de transbordamento de 1135,62 L, onde são alimentados 19522,62 mol/h de A. Existem duas correntes de alimentação.

i- uma mistura equivolumétrica de A (1320,13 L/h) e de metanol.

ii- B com vazão 2,5 vezes maior que a mistura de A-metanol.

As vazões molares de metanol e B são 32599,68 e 364143,96 mol/h, respectivamente.

A temperatura de ambas as correntes de entrada é 14,44 °C antes da mistura, ocorrendo um aumento de 9,45 ºC quando as correntes são misturadas para a alimentação do reator adiabático.

Nas condições de operação a reação é de primeira ordem global e em relação a A. Como o reagente possui baixo ponto de ebulição a temperatura de operação não pode exceder 41,67 ºC.

a- Verifique se o reator pode continuar sendo operado adiabaticamente.

b- Uma serpentina de resfriamento de 1500 dm^2 de superfície será usada. A vazão de água na mesma é suficientemente alta, mantendo a temperatura constante e igual a 24 ºC.

Dado: $H°_A = -154{,}91 \frac{KJ}{mol}$; $H°_B = -286{,}1 \frac{KJ}{mol}$; $H°_C = -525{,}8 \frac{KJ}{mol}$ $(todos\ a\ 20\ °C)$; $Cp_A = 146{,}54 \frac{J}{mol\ K}$; $Cp_B = 75{,}36 \frac{J}{mol\ K}$; $Cp_C = 192{,}59 \frac{J}{mol\ K}$; $Cp_{metanol} = 81{,}64 \frac{J}{mol\ K}$; $k = 16{,}96 \times 10^5 e^{-32400/RT}\ (h^{-1})$; $U = 18000 \frac{J}{min\ m^2\ K}$

Exemplo 24: Para uma reação elementar $A \leftrightarrow B$, faça um gráfico de equilíbrio em função da temperatura. Determine a temperatura e a conversão adiabática de equilíbrio, quando A puro é alimentado no reator a uma temperatura de 300 K. Que conversão poderia ser atingida se houvessem três reatores e dois trocadores interestágios com capacidade de resfriar a corrente de saída para 350 K? Determinar a carga térmica de cada trocador para uma vazão molar de A de 40 mol/s. Considere que uma conversão de 95% da conversão de equilíbrio seja atingida em cada reator. A temperatura de alimentação no primeiro reator continua sendo de 300 K. Calcule a vazão do fluido refrigerante, entrando a 270 K e não podendo exceder 400 K, e a área de transferência de calor. Considerar trocadores com escoamento contracorrente.

Dado: $H°_A = -40\frac{Kcal}{mol}$; $H°_B = -60\frac{Kcal}{mol}$; $Cp_A = 50\frac{cal}{mol\ K}$; $Cp_B = 50\frac{cal}{mol\ K}$; $K_e = 100000$, todos a 298 K; $U = 100\frac{cal}{s\ m^2\ K}$; $Cp_c = 18\frac{cal}{mol\ K}$

Exemplo 26: as reações elementares em fase líquida

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

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

Ocorrem em um CSTR de 100 dm^3. Quais são as concentrações do efluente para uma vazão volumétrica de 1000 dm^3/min com uma concentração de 0,3 mol/dm^3?

Dado: $\Delta H_{1A} = -55\,\frac{KJ}{mol}$; $\Delta H_{2B} = -71{,}5\,\frac{Kcal}{mol}$; $Cp_A = 200\,\frac{J}{mol\ K}$; $Cp_B = 200\,\frac{J}{mol\ K}$; $Cp_c = 200\,\frac{J}{mol\ K}$; $T_a = 57°C$; $T_0 = 283\ K$; $V = 5\ m^3$; $K_e = 100000$; $UA = 40000\,\frac{J}{\min\ K}$; $k_1 = 3{,}3\ min^{-1}\ a\ 300\ K$; $k_2 = 4{,}58\ min^{-1}\ a\ 500\ K$; $E_1 = 9900\,\frac{cal}{mol}$; $E_2 = 27000\,\frac{cal}{mol}$

Exemplo 27: Para determinação da cinética de uma reação utilizou-se um reator de 10 L isolado termicamente. Este reator é carregado com 1 L de metanol e 5 L B. A temperatura inicial de todos esses materiais é de 238 ºC. Quantos minutos seriam necessários para a mistura reacional atingir a conversão de 51,5%? Qual a temperatura no interior do reator neste instante? Qual o tempo espacial em um CSTR se a mesma conversão e temperatura fossem alcançadas?

Dado: $H°_A = -66{,}6\frac{Kcal}{mol}; H°_B = -123\frac{Kcal}{mol}; H°_C = -226\ \frac{Kcal}{mol}(todos\ a\ 25\ °C); Cp_A = 35\frac{cal}{mol\ K};\ Cp_B = 18\frac{cal}{mol\ K}; Cp_C = 46\frac{cal}{mol\ K}; Cp_{metanol} = 19{,}5\frac{cal}{mol\ K};\ k = 4{,}71 \times 10^9 e^{-32400/RT}\ (s^{-1}); \theta_A = 1;\ \theta_B = 18{,}65;\ \theta_C = 0;\ \theta_{metanol} = 1{,}67; A + B \rightarrow C$, ordem zero em relação a B, C_{A0} = 2,1 mol/L

Exemplo 30: Uma amostra de traçador, a 320 K, foi injetada como um pulso em um reator, sendo a concentração do efluente medida em função do tempo.

t (min)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	14
$C_{(t)}$ (g/m^3)	0	1	5	8	10	8	6	4	3	2,2	1,5	0,6	0

a) Determine a fração de material que sai do reator, que permaneceu no mesmo entre 3 e 6 min.

b) Determine a fração de material que sai do reator, que permaneceu 3 min.

c) Pela DTR obtida a partir de uma perturbação de pulso a 320K, calcule o tempo de residência médio e a variância.

Exemplo 31: A reação de primeira ordem

$$A \rightarrow B$$

Ocorre em um reator tubular de 10 cm de diâmetro e 6,36 m de comprimento. A velocidade específica é 0,25 min^{-1}. Calcule a conversão:

a- Em um PFR pelo modelo da dispersão do vaso fechado

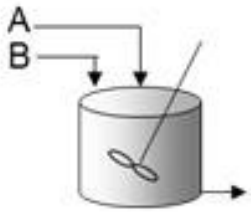
b- PFR ideal

c- Modelo de tanques em série

d- Um único CSTR ideal

Os resultados dos testes feitos com traçador foram:

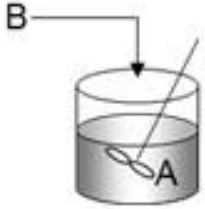
t(min)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	14
E(t)	0	0,02	0,1	0,16	0,2	0,16	0,12	0,08	0,06	0,044	0,03	0,012	0



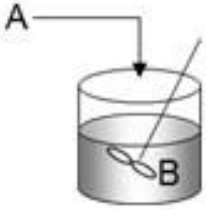
(a) CSTR
C_A e C_B baixas

(b) Reator tubular
C_A e C_B altas

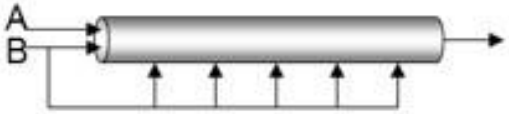
(c) batelada
C_A e C_B altas



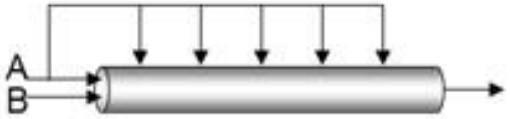
(d) semibatelada1
C_A alta e C_B baixa



(e) semibatelada 2
C_B alta e C_A baixa

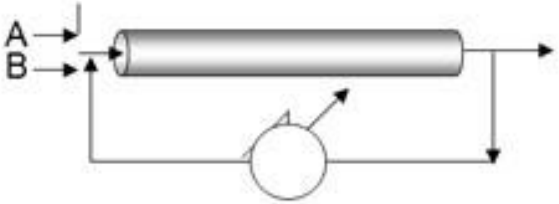


(f) PFR com entradas laterais
C_A alta e C_B baixa



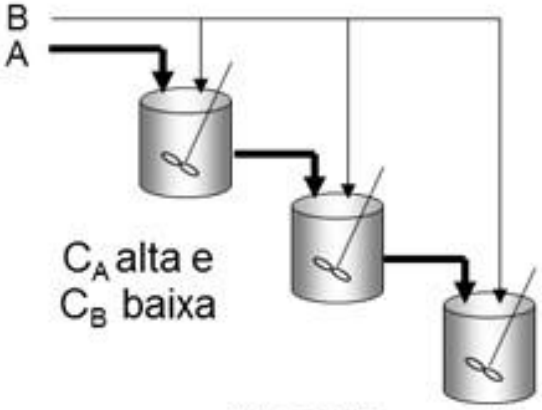
C_B alta e C_A baixa

(g) PFR com entradas laterais



Taxa de reciclo alta, atua como CSTR
Taxa de reciclo baixa, atua como PFR

(i) PFR com reciclo



C_A alta e C_B baixa

(h) CSTRs em série