PQI - 3408 – Simulação de Processos da Indústria Química

3ª Lista de Exercícios – Reatores

**1)** Avalie os vários modelos de reator no AspenPlus para a hidrodealquilação do tolueno. Reação principal: H2 + Tolueno ↔ metano + benzeno

Reação indesejada: 2C6H6 ↔ C12 H10 + H2

Vazão = 5475.9 lbmol/hr   
Pressão no reator = 489 psia

Considere a seguinte alimentação a 494 psia e 1200 F.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Componentes | Fórmula | lbmol / hr |
| Hidrogênio | H2 | 2049.1 |
| Metano | CH4 | 3020.8 |
| Benzeno | C6H6 | 39.8 |
| Tolueno | C7H8 | 362.0 |
| Bifenilo | C12H10 | 4.2 |
| Total |  | 5475.9 |

Use o modelo termodinâmico e a equação de estado de Peng-Robinson.

1. Simule um módulo de reator estequiométrico adiabático (Q = 0) com uma conversão de tolueno de 0,75 e uma conversão de benzeno em bifenilo de 0,02. Determine a composição e a temperatura do fluxo de saída.
   * Como varia a temperatura de saída com a conversão de benzeno
   * A temperatura constante varie a conversão de tolueno e estude o comportamento do calor a ser trocado
2. Simule um reator adiabático de minimização de energia livre de Gibbs. Qual a conversão máxima de Benzeno? Em torno dessa temperatura adiabática, varie a temperatura em -100 e +100 F. Veja como ficariam as conversões e taxa de transferência de calor.

2) Neste exercício será estudada a reação de reforma, em uma corrente de 100 kmol/h, composta (em base volumétrica) de:

0.8 % de CO2

30.4 % de metano

O restante de água.

Sabe-se que as reações que ocorrem em um reator de reforma são as seguintes:

 (1)

 (2)

A equação (1) é a reação de reforma propriamente dita, e a equação (2) é conhecida por reação de *shift*.

a) Usando informações termodinâmicas apenas, estude (no equilíbrio) a variação da conversão do metano, da seletividade CO/CO2 e da produção de H2 com a pressão e com a temperatura.

b) Refaça o estudo supondo que a reação (2) não ocorre.