PQI - 3408 – Simulação de Processos da Indústria Química

4ª Lista de Exercícios – Reatores

 O cumeno (C9H12) é matéria prima para a produção de fenol. Vamos analisar a viabilidade de produção de cumeno a partir de benzeno e propileno.

 Para a reação de síntese do cumeno, um novo catalisador deve ser usado; a cinética das reações a serem consideradas é apresentada na sequência. A corrente de alimentação de propileno contém 4,5 % (em base molar) de propano, está a 25 °C e 12,0 bar. A corrente de benzeno pode ser considerada como pura (100% benzeno) e está a 25 °C e 1,0 bar.

 A cinética para as reações a serem consideradas são as seguintes:

1. Reação de produção de cumeno





1. Reação de produção do para-di-isopropil benzeno (C12H18 - DIB)





 Nestas equações, a energia de ativação é dada em kcal/mol, as concentrações em mol/L, e a temperatura em K. Outras informações do catalisador: densidade da partícula de catalisador= 1600 kg/m3, porosidade do leito  = 0,50. O catalisador somente pode ser usado em temperaturas entre 340 e 450 °C.

Neste estudo vamos considerar apenas reatores PFR isotérmicos e não vamos levar em conta a perda de carga.

Primeira Parte: PROJETO

1. Pense em que variáveis deveriam ser consideradas em um estudo de projeto do reator.
2. Vamos fixar a pressão em 12 bar e a vazão total da corrente de alimentação de benzeno em 20 kmol/hr e a de propileno em 10 kmol/h em mol. Fixando a temperatura em 400 C, calcule qual o volume do reator para uma conversão de 99 % de propileno. Para tal sugerimos primeiramente fazer um análise de sensibilidade variando o volume (comprimento) do reator. Analise também qual a razão entre o cumeno produzido e o DIB. Vamos chamar esta relação de seletividade entre as vazões parciais de cumeno e de DIB na saída com comprimento. Utilize um *Design Spec* para que isto seja feito automaticamente.
3. Repetir esta análise para diferentes temperaturas (para uma conversão de 99% de propileno). Como varia o volume do reator e a seletividade em função da temperatura?
4. Qual o compromisso que existe entre menor volume de leito e maior seletividade? Como pode ser resolvido?

Segunda Parte: SIMULAÇÃO

Nesta parte o volume do reator será fixado naquele obtido para uma temperatura de 400 °C.

1. Como fica a conversão, a seletividade e a produção caso a vazão de benzeno seja variada em de -20% a +20%? Como seria possível manter uma produção de cumeno próxima da nominal (aquela obtida nas condições originais)?
2. Como fica a conversão, a seletividade e a produção caso a vazão de propileno seja variada em de -20% a +20%? Neste caso, seria possível manter a produção de cumeno?

Exercícios adicionais:

Repita o Projeto para uma conversão de 99.7% de propileno.

Repita o Projeto para uma conversão de 99% propileno mas com uma razão de 1.5:1 de benzeno para propileno e uma produção de 12.5 toneladas por hora de cumeno (fixa).