

Aula 4

Reatores

REATORES

	Utilidade	Módulo	BM	BE	Conservação de átomos	Serve para projeto do reator?
Conversão	Permitem fazer balanços em fluxogramas completos sem ter um conhecimento preciso da cinética	RYield	sim	sim	não	não
		RStoic	sim	sim	sim	não
Equilíbrio	Resolvem as equações de tal forma que os produtos estão em equilíbrio. Na prática permitem verificar até onde pode ir a reação de acordo com a termodinâmica	RGibbs	sim	sim	sim	não
		REquil	sim	sim	sim	não
Cinética	É necessário uma descrição cinética completa das reações envolvidas. Permite fazer estudo das condições operacionais dos reatores no seu comportamento e dimensionamento	RCSTR	sim	sim	sim	sim
		RPlug	sim	sim	sim	sim

Característica Comum

- Balanço de energia não precisa de calor de reação. Ele está contido nas propriedades das substâncias puras, no calor padrão de formação
- Os quatro primeiros tem dois graus de liberdade (como em um flash, em um heater) além de algumas informações sobre as reações que precisam ser fornecidas.

RYield

- Usado para reagentes complexos
- Por exemplo: petróleo, biomassa
- Reagentes que não tem uma composição componente por componente conhecida
- Define-se um rendimento para cada produto

RStoic

- Tem que ser definidas as estequiometrias das reações e a conversão de cada uma ou a seletividade em determinados componentes

RGibbs

- Não é necessário introduzir nenhuma hipótese, pois os cálculos são feitos baseados na termodinâmica
- Pode haver equilíbrio de fases também
- Pode ser atribuída uma corrente de saída para cada fase
- Podem se especificar inertes e produtos
- Pode ser especificada uma distância do equilíbrio

REquil

- Para cada reação deve ser especificada uma estequiometria e uma constante de equilíbrio (e a sua dependência da temperatura)

RCSTR e RPlug

- Modelos de Mistura Perfeita ou de fluxo pistonado
- Precisam de uma descrição da reação que inclui:
 - Homogênea ou heterogênea
 - Lei cinética
 - Fases

CINÉTICA

- As leis cinéticas para o CSTR e Rplug deve ser especificada no tab “Reactions” .
- Elas podem ser agrupadas em conjuntos
- Existe diferentes tipos
 - Lei de potência
 - LHHW
 - Equilíbrio

RCSTR e RPlug

- Além disso tem que ser introduzidas informação com respeito aos equipamentos:
 - Dimensões
 - Transferência de calor (adiabático ou isotérmico) e detalhes da troca com um fluido para o RPlug
 - Catalisador ou não. Informações do leito.
 - Os modelos não levam em conta transferência de calor ou massa entre fases dentro do reator nem outros efeitos de FT.

CUIDADOS

- Com unidades: verificar em que unidades estão as constantes cinéticas
- Com as fases: verificar a que fase se refere a cinética
- Qual a unidade das contribuições dos componentes (molaridade, pressão, fração molar ...)