

Unidade Curricular	Complementos em Engenharia das Reações		Área Científica	Engenharia dos Processos Químicos	
Mestrado em	Engenharia Química		Escola	Escola Superior de Tecnologia e de Gestão de Bragança	
Ano Letivo	2023/2024	Ano Curricular	1	Nível	2-1
Créditos ECTS	6.0				
Tipo	Semestral	Semestre	1	Código	6362-756-1102-00-23
Horas totais de trabalho	162	Horas de Contacto	T 30	TP -	PL 30
			TC -	S -	E -
			OT -	O -	

T - Ensino Teórico; TP - Teórico Prático; PL - Prático e Laboratorial; TC - Trabalho de Campo; S - Seminário; E - Estágio; OT - Orientação Tutoria; O - Outra

Nome(s) do(s) docente(s) Maria Olga de Amorim Sá Ferreira

### Resultados da aprendizagem e competências

No fim da unidade curricular o aluno deve ser capaz de:

1. Caracterizar o escoamento em reatores reais: Aplicar a teoria da distribuição de tempos de residência. Compreender os conceitos de rapidez de mistura, segregação e fluido micro/macrocópio.
2. Modelar o escoamento e projetar o funcionamento de reatores reais aplicando modelos baseados em associação de reatores ideais e os modelos pistão difusional, tanques-em-série e fluxo laminar.
3. Analisar e projetar reações e reatores catalíticos: Avaliar situações de difusão nos poros, difusão no filme e reação em catalisadores e os seus efeitos na performance do reator catalítico.
4. Analisar e projetar reações heterogêneas não-catalíticas: Identificar modelos shell-progressive e shrinking-core. Projetar reatores em regime químico, difusão externa e difusão interna.

### Pré-requisitos

Antes da unidade curricular o aluno deve ser capaz de:

1. Dominar os fundamentos das ciências de base de engenharia química e das ciências de engenharia.
2. Estabelecer balanços de massa e energia e projeto de reatores ideais.
3. Utilizar meios informáticos de cálculo para engenharia (MSEXcel, MATLAB).

### Conteúdo da unidade curricular

Caracterização e modelação do escoamento e projeto do funcionamento de reatores reais. Teoria da distribuição de tempos de residência (DTR). Previsão da conversão em reatores reais. Fundamentos em catálise heterogênea e caracterização de catalisadores. Análise e projeto de reações e reatores catalíticos. Análise e projeto de reações e reatores heterogêneos não-catalíticos.

### Conteúdo da unidade curricular (versão detalhada)

1. Reatores reais: Distribuição de tempos de residência.
  - Introdução ao estudo dos reatores reais. Fluxo não ideal. Distribuição de tempos de residência.
  - Experiências impulso e degrau de tracer: curvas  $E(t)$  e  $F(t)$ . Relação entre as curvas  $E(t)$  e  $F(t)$ .
  - Noção de função de transferência,  $G(s)$ . Funções de transferência de reatores de fluxo ideais.
  - Relação entre  $G(s)$ ,  $E(t)$  e  $F(t)$ . Função geradora de momentos: Teorema de van der Laan.
  - Conversão em reatores reais. Rapidez da mistura: mistura a montante e mistura a jusante.
  - Grau de segregação: fluido microscópico e macroscópico. Modelo de escoamento em segregação total.
2. Reatores reais: Modelos de Escoamento.
  - Representação de reatores reais através de modelos de escoamento.
  - Volume ativo e volume morto. Caudais ativo, de curto-circuito e de reciclo.
  - Representação de vários modelos de escoamento e respetivas curvas  $E(t)$  e  $F(t)$ .
  - Diagnóstico do funcionamento de reatores reais.
3. Reatores reais: Modelo Pistão Difusional
  - Convecção versus dispersão axial. Número de Peclet.
  - Equação de balanço material de um reator pistão difusional.
  - Função de transferência, DTR e momentos de um reator pistão difusional.
  - Dispersão axial e reação química. Solução analítica para reação irreversível de 1ª ordem.
  - Correlações de dispersão axial em tubos e leitos de enchimento.
4. Reatores reais: Modelo Tanques-em-Série.
  - Equação de balanço material. Função de transferência, DTR e momentos do modelo de tanques-em-série.
  - Comparação dos modelos pistão difusional e tanques-em-série.
  - Reação química numa cascata de RPA's.
5. Reatores reais: Modelo Fluxo Laminar.
  - Modelo de fluxo laminar com perfil de velocidade parabólico. DTR de um modelo de fluxo laminar.
  - Reação química em reatores de fluxo laminar.
6. Reações catalíticas: Reações catalisadas por sólidos.
  - Introdução às reações catalisadas por sólidos.
  - Reação química versus resistência à difusão nos poros. Módulo de Thiele.
  - Eficiência de um catalisador. Partículas de catalisador: placa plana, cilindro e esfera.
  - Reação exotérmica com difusão nos poros e condução de calor.
  - Reação química com difusão nos poros e difusão externa (no filme).
7. Reações não-catalíticas: Reações fluido-sólido não-catalíticas.
  - Cinética das reações fluido-sólido.
  - Modelos shell-progressive e shrinking-core.
  - Regimes químico, de difusão externa e de difusão interna nas cinzas.
  - Projeto de reatores heterogêneos não-catalíticos.

### Bibliografia recomendada

1. Scott Fogler, Elements of Chemical Reaction Engineering, 6th Edition, Pearson, 2021.
2. Gilbert Froment and Kenneth Bischoff, Chemical Reactor Analysis and Design, 3rd Edition, John Wiley&Sons, 2010.
3. Octave Levenspiel, Chemical Reaction Engineering, 3rd Edition, John Wiley&Sons, 1999.
4. Online Resources developed by H. Scott Fogler associated to "Elements of Chemical Reaction Engineering (2020)": <http://websites.umich.edu/~elements/5e/index.html>
5. J. L. Figueiredo e F. Ramôa Ribeiro, Catálise Heterogênea, 2ª edição Fundação Calouste Gulbenkian, 2007.

### Métodos de ensino e de aprendizagem

Exposição teórica de conceitos e técnicas de análise e projeto de reatores reais e reações heterogêneas: análise e discussão de exemplos de aplicação. Estudo da

**Métodos de ensino e de aprendizagem**

matéria dada e resolução de trabalhos para casa, utilizando MS Excel ou MATLAB. Trabalho de aplicação, na área de engenharia das reações, realizado e avaliado em conjunto com a unidade curricular de Matemática Aplicada.

**Alternativas de avaliação**

1. Alternativa 1 - (Ordinário, Trabalhador) (Final)
  - Prova Intercalar Escrita - 36% (Capítulos 1 a 5.)
  - Prova Intercalar Escrita - 54% (Capítulos 6 e 7.)
  - Projetos - 10% (Apresentações e estudo de casos sobre os Capítulos 6 e 7.)
2. Alternativa 2 - (Ordinário, Trabalhador) (Final, Recurso, Especial)
  - Exame Final Escrito - 100%

**Língua em que é ministrada**

Inglês

**Validação Eletrónica**

Maria Olga de Amorim Sá Ferreira	Hélder Teixeira Gomes	Simão Pedro de Almeida Pinho	José Carlos Rufino Amaro
04-10-2023	25-10-2023	25-10-2023	31-10-2023