



PQI 3221:
CINÉTICA QUÍMICA E PROCESSOS AMBIENTAIS

AULA 22

1

REATORES IDEAIS:
HIPÓTESE PARA REALIZAÇÃO DE BALANÇO DE MASSA

2

Balanços Macroscópicos em Reatores Ideais Contínuos: CSTR

Problema

Quando realizada em um reator *CSTR*, sob Estado Estacionário e a 20°C, uma reação em fase líquida do tipo $A + B \rightarrow C$ alcança 40% de conversão para *A*. Sabe-se também que a transformação é de pseudo 1ª. Ordem com respeito àquele reagente, e que a constante $k_A = 0,0257 \text{ h}^{-1}$ para tais condições de processo. A vazão de alimentação do sistema é $1,80 \text{ m}^3/\text{h}$, e as vazões molares iniciais de A e B (expressas em *mol/L*) são, respectivamente F_{A_0} e F_{B_0} .
Pede-se que seja determinado o volume do reator (*V*) para o caso em que este esteja preenchido em apenas 75% de sua capacidade, por conta de questões de segurança operacional.

3

Solução

Tal como vimos há pouco, a Equação Geral de Balanço de Matéria

$$A = E - S + G - C$$

Como regra geral, não há acúmulo de matéria no reator *CSTR* durante a reação: $A = 0$. Além disso, no âmbito do balanço componente para (*A*), que é reagente, a parcela de geração também é nula ($G_A = 0$)

Logo, a equação de balanço componente neste caso será

$$E_A = S_A + C_A$$

Vejamos agora cada termo da expressão em separado

$[E_A]$: a corrente de entrada de *A* no sistema pode ser expressa na forma de vazão molar. Ou seja

$$[E_A] = F_{A_0}$$

$[S_A]$: o mesmo ocorre com a corrente de saída de *A* do reator (F_A). No entanto, para diminuir o número de variáveis envolvidas no processo é desejável que esta seja expressa também em termos da taxa de conversão desse reagente. Assim,

$$[S_A] = F_A = F_{A_0}(1 - X_A)$$

4

Solução

$[C_A]$: termo de consumo de A dentro do reator por conta da reação química $[\int_V (-r_A)V]$ que pode, quanto à cinética, ser descrito pela expressão geral

$$(-r_A) = k_A \cdot C_A^m \cdot C_B^n$$

No entanto, e de acordo com o enunciado, a velocidade de reação esta pode ser considerada como de pseudo 1ª. Ordem com relação (apenas) ao reagente A . Isso quer dizer que

$$(-r_A) = k_A \cdot C_A^m \cdot C_B^n \approx k_A \cdot C_A$$

Ou seja; ainda que B seja um reagente ativo, sua influência sobre a velocidade com que o processo ocorre é muito pequena (ou, ao menos, muito menor do que a exercida por A), a ponto deste ser tratada como sendo de Ordem Zero na expressão de velocidade

Outra coisa: o fato de ser uma reação em fase líquida faz com que efeitos de variação de densidade no interior do reator, e a partir dessa, de expansão (ou compressão) de volume são pequenos a ponto de poderem ser desconsiderados. Portanto,

$$\xi_A = 0 \rightarrow \rho = \rho_0 = CTE$$

5

Solução

Dessa condição tiramos duas conclusões intrinsecamente dependentes:

Conclusão n. 1:
$$V = V_0$$

E, por causa dela,

Conclusão n. 2:
$$X_A = \left(\frac{N_{A_0} - N_A}{N_{A_0}} \right) = \left(\frac{F_{A_0} - F_A}{F_{A_0}} \right) = \left(\frac{C_{A_0} - C_A}{C_{A_0}} \right)$$

Logo,

$$C_A = C_{A_0} - C_{A_0} \cdot X_A = C_{A_0}(1 - X_A)$$

Substituindo essa expressão naquela que descreve o termo de consumo de A , teremos

$$(-r_A) = k_A \cdot C_{A_0}(1 - X_A)$$

Distribuindo agora todas essas parcelas na equação do balanço componente para (A), chegaremos à seguinte composição

$$F_{A_0} = F_{A_0}(1 - X_A) + [k_A \cdot C_{A_0}(1 - X_A)] \cdot V$$

6

Solução

A partir disso,

$$C_{A_0} \cdot q = \frac{F_{A_0} X_A}{[k_A \cdot C_{A_0} (1 - X_A)]} = \frac{C_{A_0} q \cdot X_A}{[k_A \cdot C_{A_0} (1 - X_A)]} = \frac{q \cdot X_A}{[k_A \cdot (1 - X_A)]}$$

Substituindo agora os valores indicados no enunciado do problema

$$V = \frac{1,8 \times \left(\frac{40}{100}\right)}{\left[0,0257 \cdot \left(1 - \frac{40}{100}\right)\right]}$$

$$V = 46,7 \text{ m}^3$$

Dada a circunstância de que o reator foi preenchido apenas em 75% de seu volume pleno para que o processo atendesse requisitos de segurança

$$V_{ef} = \frac{V}{\left(\frac{75}{100}\right)} = \frac{46,7}{0,75} = 62,3 \text{ m}^3$$

7

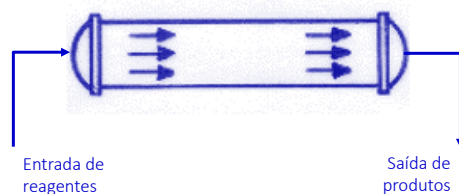
Balancos Macroscópicos em Reatores Ideais Contínuos: PFR

Compreende um tubo não agitado no interior do qual as partículas de reagentes (e com o passar do tempo e o avanço da reação, também as de produtos) escoam na mesma direção, e com velocidade constante

Em termos de operação os *PFR* recebem reagentes de forma contínua. A reação ocorre ao longo do escoamento de fluxos

Por causa disso, as concentrações envolvidas nesse processo (de reagentes e produtos) **variam** tanto com o tempo, como com a **posição** das espécies químicas no interior do vaso

Os reagentes que circulam por um reator tubular podem receber intervenções externas de calor (contato indireto). A fim de ativar a reação. Para isso, costuma-se acoplar ao vaso reacional uma camisa no interior da qual circula um fluido aquecido (p.e. vapor de água). Outra forma seria incluir no sistema um catalizador, por exemplo aderido a parede do vaso



(τ) compreende o tempo dispendido por uma molécula admitida à entrada do reator percorra toda sua extensão e a saída, na outra extremidade do sistema já na forma do produto que se originou da transformação, ou mesmo, ainda com sua estrutura original caso não haja reação

Este parâmetro consiste da razão entre o volume do *PFR* e a vazão de escoamento do fluxo

$$\tau (\text{min}) = \frac{V (\text{m}^3)}{v_0 \left(\frac{\text{m}^3}{\text{min}}\right)}$$

8

Balanços Macroscópicos em Reatores Ideais Contínuos: CSTR

Equação Geral de Balanço de Matéria

$$\mathbf{A} = \mathbf{E} - \mathbf{S} + \mathbf{G} - \mathbf{C}$$

Como também não há acúmulo de matéria no reator *PFR* durante a reação: $\mathbf{A} = \mathbf{0}$

Adaptando essa condição para (*A*) também uma espécie química reagente, teremos ainda que: $\mathbf{G}_A = \mathbf{0}$

Logo, tal como ocorre com o *CSTR*, a equação geral de balanço para esta espécie química será reduzida a

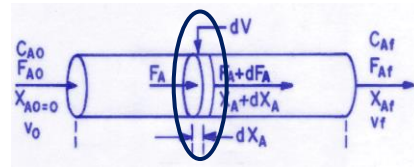
$$\mathbf{E}_A = \mathbf{S}_A + \mathbf{C}_A$$

Ou seja,

$$\left[\begin{array}{l} \text{Velocidade de Consumo} \\ \text{de A dentro do reator} \\ \text{devido a reação química} \end{array} \right] = (-r_A) \cdot dV$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{Entrada de A} \\ \text{no reator} \end{array} \right] = F_A$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{Saída de A} \\ \text{no reator} \end{array} \right] = F_A + dF_A$$



Reação: $A \rightarrow P$

Portanto,

$$F_A = F_A + dF_A + (-r_A) \cdot dV$$

$$(-)dF_A = (-r_A) \cdot dV$$

mas,

$$dF_A = d[F_{A0} \cdot (1 - X_A)] = (-)F_{A0} dX_A$$

então,

$$F_{A0} dX_A = (-r_A) \cdot dV$$

$$\int_0^V dV = F_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} \rightarrow V = F_{A0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)}$$

9

Balanços Macroscópicos em Reatores Ideais Contínuos: CSTR

Problema

Uma reação em fase líquida do tipo $(A + B \rightarrow C + D)$ ocorre em um *PFR* a 35°C e $1,0 \text{ bar}$. A reação é de 1ª Ordem com relação a cada qual dos reagentes, e a constante que rege a decomposição de *A* foi estimada em $k = 2,22 \text{ L mol}^{-1}\text{s}^{-1}$. Admitindo que o tempo de residência no interior do vaso seja de (no máximo) $4,0 \text{ s}$, e a concentração de entrada de cada reagente é $0,10 \text{ mol L}^{-1}$, determine a concentração de *A* na saída do reator.

10