Fundamentos sobre balanço de massa e cálculo de reatores

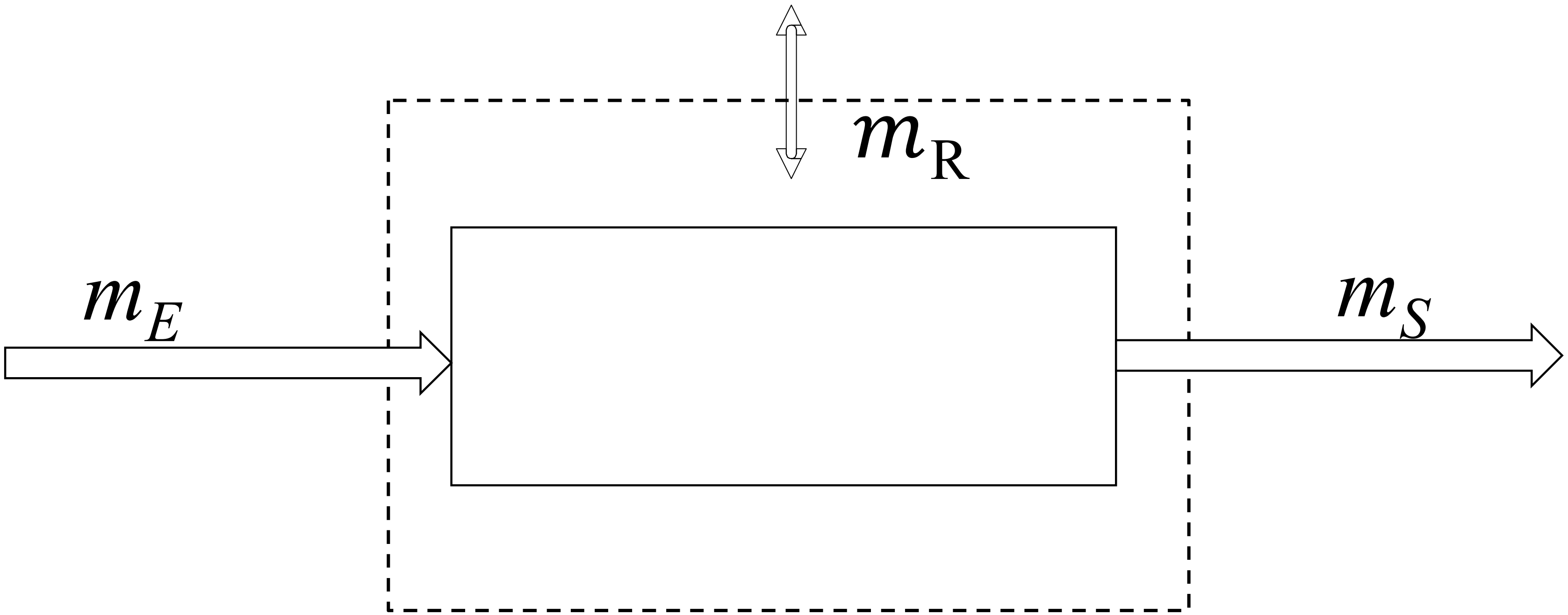
PHA 3523 – Tecnologias de Remediação de Áreas Contaminadas

Equação Fundamental com a ocorrência de reações químicas:

$$\frac{dm}{dt} = m_E - m_S \pm m_R$$

"O acúmulo de massa no sistema em função do tempo é igual à quantidade de massa que entra, menos a quantidade que sai, mais a quantidade que reage dentro do sistema"

Quem é esse m_R?



$m_R = r.V$

m_R é a massa que reage dentro do volume de controle.

Quem é esse m_R?

$$m_R = r.V$$

r = equação que descreve a reação que acontece no volume de controle

r pode ser, de forma geral:

$r = \pm k$ (reação de ordem zero)

$r = \pm kC$ (reação de primeira ordem)

$r = \pm kC^2$ (reação de segunda ordem)

k = coeficiente de decaimento, ou de acréscimo;
C = concentração

A parte reativa pode significar uma perda <u>OU</u> um acréscimo de massa no sistema.

Balanço de massa com reações químicas

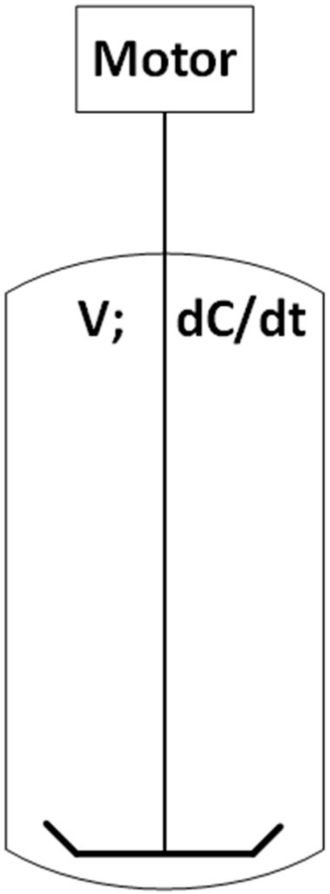
 Tipos de reatores:

 Batelada, no qual o processo ocorre de forma intermitente e as condições no interior do reator variam com o tempo;

 Mistura completa, no qual o processo ocorre de forma contínua e as condições no interior do reator não variam com o tempo;

 Reator de fluxo pistonado, no qual o processo ocorre de forma contínua e as condições no interior do reator variam.

Reatores em batelada



Balanço de massa:

- No sistema não ocorre entrada ou saída de massa.

$$V.\frac{dC}{dt} = r_C.V$$

- r_C é a cinética da reação, conforme indicado no slide 4;

- Considerando-se uma cinética de primeira ordem para um composto que é consumido na reação, tem-se;

$$\frac{dC}{dt} = -k.C$$

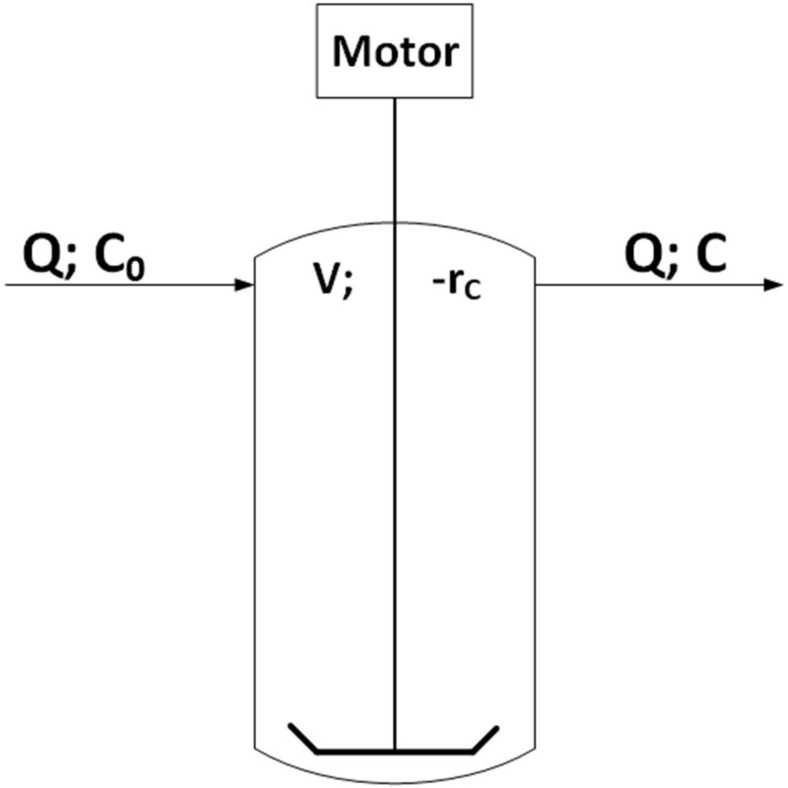
Reatores em batelada

$$\frac{dC}{dt} = -k.C \quad \Rightarrow \quad \frac{dC}{C} = -k\,.dt$$

$$\int_{C_0}^{C} \frac{dC}{C} = -k\int_{0}^{t} dt \quad \Rightarrow \quad \ln\frac{C}{C_0} = -k.t$$

$$\boxed{C = C_0.e^{-k.t}}$$

Reatores de mistura completa



Balanço de massa em regime permanente:

$$Q.C_0 = Q.C + (-r_C).V$$

Para uma cinética de ordem 1, $-r_C = kC$:

$$Q.C_0 = Q.C + k.C.V$$

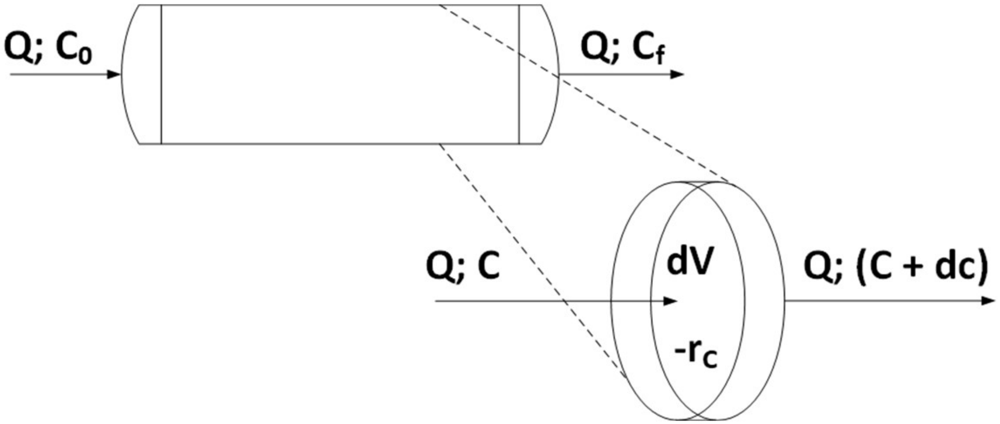
Dividindo-se os dois lados por Q:

$$C_0 = C.(1 + k\frac{V}{Q})$$

Mas V/Q é o tempo espacial no reator (τ):

$$\boxed{C = \frac{C_0}{1 + k\tau}}$$

Reatores de fluxo pistonado



Balanço no elemento de volume dV:

$$Q.C = Q\,.(C + dC) + (-r_C)\,.dV$$

$$Q.\cancel{C} = Q.\cancel{C} + Q.dC + (-r_C)\,.dV$$

$$Q.dC = -(-r_C)\,.dV$$

Considerando-se uma cinética de ordem 1, $-r_C = k.C$:

$$\mathrm{Q.\,dC} = -\mathrm{k.\,C.\,dV} \Rightarrow \frac{dC}{C} = -\frac{k}{Q}.dV \Rightarrow \int_{C_0}^{C}\frac{dC}{C} = -\frac{k}{Q}\,.\int_0^V dV$$

$$ln\frac{C}{C_0} = -k.\frac{V}{Q}$$ Mas V/Q = τ, assim : $$\boxed{C = C_0.e^{-k.\tau}}$$