

Escola de Engenharia de Lorena - USP - Cinética Química

Capítulo 07 – Introdução a Reatores Químicos

1 - Introdução

“A cinética química e o projeto de reatores estão no coração de quase todos os produtos químicos industriais. É, principalmente, o conhecimento da cinética química e o projeto do reator que *distinguem o engenheiro químico dos outros engenheiros*”

(Fogler – Capítulo 1 – Introdução de seu livro)

2 – Tipos de Processos

Os três tipos de processos mais comuns são os seguintes:

- Descontínuo (ou Batelada) – Exemplo (a) da Figura 1
- Contínuo - Exemplo (b) da Figura 1
- Semi Batelada (ou semi contínuo) - Exemplos (c), (d) e (e) da Figura 1

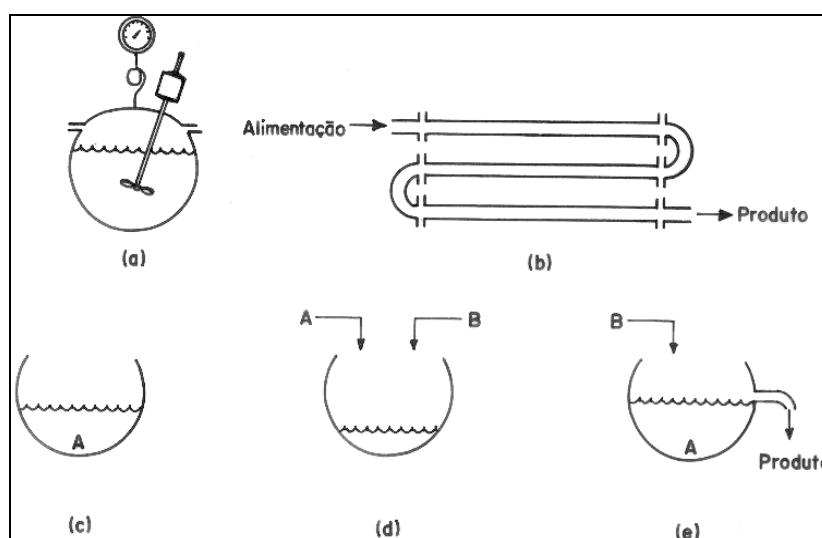


Figura 1 – Formas de alimentação de um sistema (Levenspiel)

Para cada uma das formas de alimentação apresentadas na Figura 4, a Tabela 1 apresenta um resumo da análise da variação do volume e da composição do meio reacional em função do tempo.

EXEMPLO	OPERAÇÃO	VOLUME	COMPOSIÇÃO
(a)	Batelada	Constante	Variável
(b)	Contínua	Constante	Constante (no mesmo ponto)
(c)	Semi Batelada	Variável	Variável
(d)	Semi Batelada	Variável	Constante
(e)	Semi Batelada	Constante	Variável

Tabela 1 - Análise da variação do volume e da composição do meio reacional em função do tempo para diferentes formas de operação de um reator.

3 – Os Reatores Ideais Básicos

3.1- Reator descontínuo (ou batelada) – é um tanque com agitação mecânica no qual todos os reagentes são introduzidos no reator em uma única vez. Em seguida são misturados e reagem entre si. Após um tempo, os produtos obtidos são descarregados de única vez deste reator.

Em inglês é conhecido como: *Batch Reactor* (vide figura 2a)

3.2 – Reator Tubular – é um tubo sem agitação no qual todas as partículas escoam com a mesma velocidade na direção do fluxo.

Em inglês é conhecido como: *Tubular Reactor* ou *Plug Flow Reactor* (PFR). (vide figura 2b)

3.3 – Reator de mistura – é um tanque agitado com escoamento contínuo e sem acúmulo de reagentes ou produtos e é operado de acordo com as seguintes características:

- composição uniforme dentro do reator
- a composição de saída é igual à composição do interior do reator
- a taxa da reação é a mesma em todo o reator, inclusive na saída.

Em inglês é conhecido como: *Continuous Stirred Tank Reactor* (CSTR). (vide figura 2c)



Figura 5 – Principais Tipos de Reatores Ideais

Para cada um destes três principais tipos de reatores ideais, uma pergunta básica que permite distinguir bem os três reatores entre si é a seguinte:

*O que ocorre com a composição no meio reacional do reator (_____)
 se forem coletadas alíquotas de seu interior:*

- (1) em tempos diferentes de um mesmo local?
- (2) em locais diferentes ao mesmo tempo?

Reator	(1) Variação de C_i com o tempo	(2) Variação de C_i no espaço
Batch	varia	não varia
CSTR	Não varia	não varia
PFR	não varia	varia

Tabela 2 - Análise da variação da concentração em função do tempo em uma posição fixa ou da variação da concentração em função da posição no reator num tempo fixo.

4 – Sistemas Contínuos: Conceitos Gerais

Velocidade molar (ou vazão molar): é a razão entre o número de moles pelo tempo. Seu símbolo é F .

Vazão: é a relação entre o volume por unidade de tempo. Seu símbolo é v_0 .

<u>Relação entre velocidade molar (F) e vazão (v_0)</u>	<u>Conversão para Operações Contínuas</u>
$F = \left[\frac{\text{mol}}{\text{tempo}} \right]$ $v = \left[\frac{\text{volume}}{\text{tempo}} \right]$ $\Rightarrow \frac{F}{v} = \frac{\left[\frac{\text{mol}}{\text{tempo}} \right]}{\left[\frac{\text{volume}}{\text{tempo}} \right]} = \left[\frac{\text{mol}}{\text{volume}} \right] = C$ <p style="text-align: center; margin-top: 20px;">Em resumo : $\frac{F_i}{v} = C_i$</p>	$X_A = \frac{N_{A_0} - N_A}{N_{A_0}} = \frac{\left[\frac{N_{A_0}}{t} \right] - \left[\frac{N_A}{t} \right]}{\left[\frac{N_{A_0}}{t} \right]}$ <p style="text-align: center; margin-top: 20px;">Em resumo : $X_A = \frac{F_{A_0} - F_A}{F_{A_0}}$</p>

5 – Equação Geral de Balanço de Massa

O ponto inicial para o estudo de reatores é o balanço de massa das espécies químicas (reagentes ou produtos) que participam de uma reação química.

Este balanço de massa é representado, de uma forma geral, pela equação 1.

$$\left[\begin{array}{c} \text{Taxa de escoamento de} \\ \text{reagente para dentro} \\ \text{do elemento de volume} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de escoamento de} \\ \text{reagente para fora do} \\ \text{elemento de volume} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de consumo de} \\ \text{reagente devido à} \\ \text{Reação Química no} \\ \text{elemento de volume} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de acúmulo} \\ \text{do reagente no} \\ \text{elemento de volume} \end{array} \right]$$

[Entra] = [Sai] + [Reage] + [Acumula]

Equação 1 – Balanço de Massa Genérico

Para um elemento de volume do reator, o balanço de massa é representado na Figura 3.

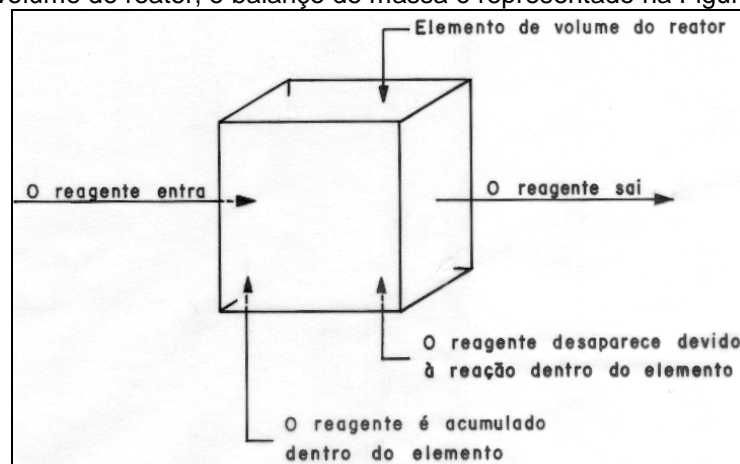
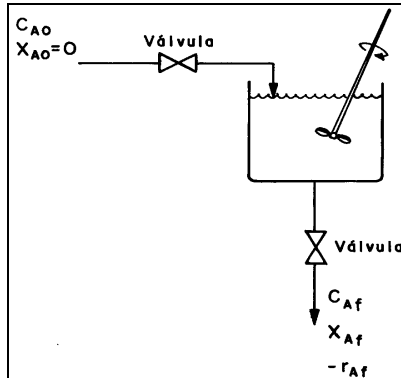


Figura 3 – Balanço de massa para um elemento de volume do reator (Levenspiel)

6 – Equações Gerais de Reatores Ideais

6.1 – Reator Descontínuo Ideal



$$\text{entra} = \text{sai} + \text{reage} + \text{acumula}$$

Como não existe entrada ou saída durante a reação, os termos entra e sai são portanto iguais a ZERO, e a equação geral de balanço de massa de um reator batelada se resume a :

$$\oplus (\text{Reage}) = (-) (\text{Acumula})$$

$$(+)\left(\begin{array}{l} \text{Velocidade de consumo} \\ \text{do reagente A dentro} \\ \text{do reator devido} \\ \text{à reação química} \end{array}\right) = (-)\left(\begin{array}{l} \text{Velocidade acúmulo} \\ \text{do reagente A dentro} \\ \text{do reator} \end{array}\right)$$

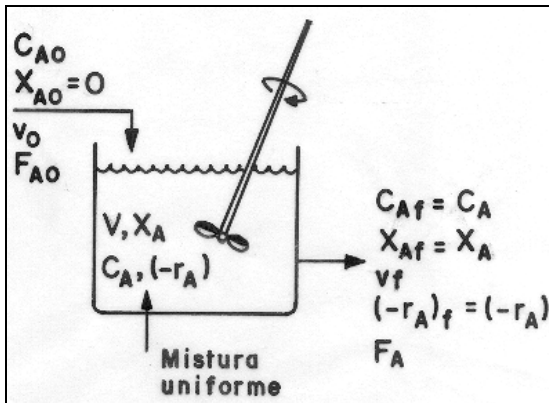
$$[\text{Reage}] = \left(\begin{array}{l} \text{consumo de A} \\ \text{pela reação} \\ \text{(moles/tempo)} \end{array}\right) = (-r_A)V = \left(\frac{\text{moles do reagente A}}{(\text{tempo})(\text{volume do fluido reagente})}\right) \left(\begin{array}{l} \text{volume do reator} \\ \text{ocupado pela} \\ \text{mistura reagente} \end{array}\right)$$

$$[\text{acúmulo}] = \left(\begin{array}{l} \text{acúmulo de A} \\ \text{(moles/tempo)} \end{array}\right) = \frac{dN_A}{dt} = \frac{d[N_{A_0}(1-X_A)]}{dt} = -N_{A_0} \frac{dX_A}{dt}$$

$$(-r_A)V = \frac{dN_A}{dt} \quad \Rightarrow \quad (-r_A)V = (-)\left[(-)N_{A_0} \frac{dX_A}{dt}\right]$$

$$dt = \frac{N_{A_0} dX_A}{(-r_A)V} \quad \Rightarrow \quad \boxed{t = N_{A_0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)V}}$$

6.2 – Reator de Mistura Ideal



$$\text{entrada} = \text{saída} + \text{consumo} + \text{acúmulo}$$

Como não existe acúmulo durante a reação, o termo acúmulo é portanto igual a ZERO, e a equação geral de balanço de massa de um reator de mistura se resume a :

$$\underline{\text{Entrada} = \text{Saída} + \text{Consumo}}$$

$$\text{entrada de A, mol/tempo} = F_{A_0} (1 - X_{A_0}) = F_{A_0};$$

$$\text{saída de A, mol/tempo} = F_A = F_{A_0} (1 - X_A);$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{consumo de A} \\ \text{pela reação,} \\ \text{mol/tempo} \end{array} \right) (-r_A) V = \left(\begin{array}{l} \text{moles de reagente A} \\ \text{(tempo)} \left(\begin{array}{l} \text{volume do fluido} \\ \text{reagente} \end{array} \right) \end{array} \right) \left(\begin{array}{l} \text{volume do reator} \\ \text{ocupado pelo fluido} \\ \text{reagente} \end{array} \right)$$

$$\text{entrada} = \text{saída} + \text{consumo}$$

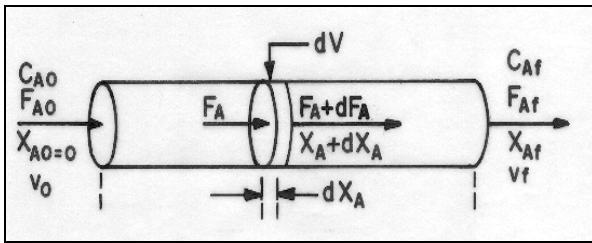
$$F_{A_0} = F_{A_0} - F_{A_0} X_A + (-r_A) V$$

$$F_{A_0} X_A = (-r_A) V$$

⇒

$$\boxed{V = \frac{F_{A_0} X_A}{(-r_A)}}$$

6.3 – Reator Tubular Ideal



entrada = saída + consumo + acúmulo

Como não existe acúmulo durante a reação, o termo acúmulo é portanto igual a ZERO, e a equação geral de balanço de massa de um reator de mistura se resume a :

Entrada = Saída + Consumo

entrada de A, moles/tempo = F_A ;

saída de A, moles/tempo = $F_A + dF_A$;

$$\left(\begin{array}{l} \text{consumo de A} \\ \text{pela reação} \\ \text{moles/tempo} \end{array} \right) = (-r_A)dV = \left(\frac{\text{moles de reagente A}}{(\text{tempo})(\text{volume do fluido reagente})} \right) * \left(\begin{array}{l} \text{volume do fluido na seção} \\ \text{do reator considerada} \end{array} \right)$$

(entrada) = (saída) + (consumo)

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

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

$$\rightarrow \text{mas } dF_A = d[F_{A_0}(1 - X_A)] = (-)F_{A_0} dX_A$$

$$\rightarrow \text{então : } (-r_A) dV = F_{A_0} dX_A$$

$$\int_0^V dV = F_{A_0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} \quad \Rightarrow \quad \boxed{V = F_{A_0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)}}$$

6.4 – Quadro Resumo das Equações Gerais de Reatores Ideais

Reator	Forma diferencial	Forma integral	Forma algébrica
Batch	$-\frac{dN_A}{dt} = (-r_A)V$	$t = -\int_{N_{A_0}}^{N_A} \frac{dN_A}{(-r_A)V}$	-
CSTR	-	-	$V = \frac{F_{A_0} - F_A}{(-r_A)}$
PFR	$\frac{dF_A}{dV} = (-r_A)$	$V = \int_{F_{A_0}}^{F_A} \frac{dF_A}{(-r_A)}$	-

Quadro 1 – Equações em função de N_A

Escola de Engenharia de Lorena - USP - Cinética Química
Capítulo 07 – Introdução a Reatores Químicos

Reator	Forma diferencial	Forma integral	Forma algébrica
Batch	$N_{A_0} \frac{dX_A}{dt} = (-r_A) V$	$t = N_{A_0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A) V}$	-
CSTR	-	-	$V = \frac{F_{A_0} X_A}{(-r_A)}$
PFR	$F_{A_0} \frac{dX_A}{dt} = (-r_A)$	$V = F_{A_0} \int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)}$	-

Quadro 2 – Equações em função de X_A

7 – Tabela Estequiométrica

Seja a reação química: $aA + bB \rightarrow rR + sS$

$$\frac{\Delta N_A}{a} = \frac{\Delta N_B}{b} = \frac{\Delta N_R}{r} = \frac{\Delta N_S}{s}$$

$$\Delta N_B = \frac{b}{a} \Delta N_A = \frac{b}{a} N_{A_0} X_A$$

$$\Delta N_R = \frac{r}{a} \Delta N_A = \frac{r}{a} N_{A_0} X_A$$

$$\Delta N_S = \frac{s}{a} \Delta N_A = \frac{s}{a} N_{A_0} X_A$$

7.1 - Operação Descontínua

$aA + bB \rightarrow rR + sS$

em $t = 0 \Rightarrow N_{A_0}, N_{B_0}, N_{R_0}, N_{S_0}, N_{I_0}$

em $t = t \Rightarrow N_A, N_B, N_R, N_S, N_I$

Espécie	Início da reação	Reage	Final da reação
A	N_{A_0}	$-N_{A_0} X_A$	$N_{A_0} - N_{A_0} X_A$
B	N_{B_0}	$-\frac{b}{a} N_{A_0} X_A$	$N_{B_0} - \frac{b}{a} N_{A_0} X_A$
R	N_{R_0}	$+\frac{r}{a} N_{A_0} X_A$	$N_{R_0} + \frac{r}{a} N_{A_0} X_A$
S	N_{S_0}	$+\frac{s}{a} N_{A_0} X_A$	$N_{S_0} + \frac{s}{a} N_{A_0} X_A$
I	N_{I_0}	-	N_{I_0}

Escola de Engenharia de Lorena - USP - Cinética Química

Capítulo 07 – Introdução a Reatores Químicos

É comum expressar os parâmetros reacionais da reação em função de concentração. Entretanto, como concentração é função do volume a tabela estequiométrica deve ser montada para N (número de moles) e em seguida aplicada às reações químicas com variação de volume (onde $\xi_A \neq 0$) ou sem variação de volume (onde $\xi_A = 0$).

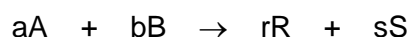
Para as reações químicas a volume variável [$V = V_0 (1 + \xi_A X_A)$], tem-se:

Espécie	Final da reação (N _i)	Final da reação (C _i)
A	$N_{A_0} - N_{A_0} X_A$	$\frac{C_{A_0} - C_{A_0} X_A}{(1 + \xi_A X_A)}$
B	$N_{B_0} - \frac{b}{a} N_{A_0} X_A$	$\frac{C_{B_0} - \frac{b}{a} C_{A_0} X_A}{(1 + \xi_A X_A)}$
R	$N_{R_0} + \frac{r}{a} N_{A_0} X_A$	$\frac{C_{R_0} + \frac{r}{a} C_{A_0} X_A}{(1 + \xi_A X_A)}$
S	$N_{S_0} + \frac{s}{a} N_{A_0} X_A$	$\frac{C_{S_0} + \frac{s}{a} C_{A_0} X_A}{(1 + \xi_A X_A)}$
I	N_{I_0}	$\frac{C_{I_0}}{(1 + \xi_A X_A)}$

Para as reações químicas a volume constante (onde $\xi_A = 0$), tem-se que:

Espécie	Final da reação (N _i)	Final da reação (C _i)
A	$N_{A_0} - N_{A_0} X_A$	$C_{A_0} - C_{A_0} X_A$
B	$N_{B_0} - \frac{b}{a} N_{A_0} X_A$	$C_{B_0} - \frac{b}{a} C_{A_0} X_A$
R	$N_{R_0} + \frac{r}{a} N_{A_0} X_A$	$C_{R_0} + \frac{r}{a} C_{A_0} X_A$
S	$N_{S_0} + \frac{s}{a} N_{A_0} X_A$	$C_{S_0} + \frac{s}{a} C_{A_0} X_A$
I	N_{I_0}	C_{I_0}

7.2 – Operação Contínua



$$\text{em } t = 0 \quad \Rightarrow \quad F_{A_0}, F_{B_0}, F_{R_0}, F_{S_0}, F_{I_0}$$

$$\text{em } t = t \quad \Rightarrow \quad F_A, F_B, F_R, F_S, F_I$$

Escola de Engenharia de Lorena - USP - Cinética Química
Capítulo 07 – Introdução a Reatores Químicos

Espécie	Início da reação	Reage	Final da reação
A	F_{A_0}	$-F_{A_0} X_A$	$F_{A_0} - F_{A_0} X_A$
B	F_{B_0}	$-\frac{b}{a} F_{A_0} X_A$	$F_{B_0} - \frac{b}{a} F_{A_0} X_A$
R	F_{R_0}	$+\frac{r}{a} F_{A_0} X_A$	$F_{R_0} + \frac{r}{a} F_{A_0} X_A$
S	F_{S_0}	$+\frac{s}{a} F_{A_0} X_A$	$F_{S_0} + \frac{s}{a} F_{A_0} X_A$
I	F_{I_0}	-	F_{I_0}

Como concentração é função do volume, e para operação contínua: $C_i = \frac{F_i}{v}$.

Para as reações químicas a volume variável [$V = V_0 (1 + \xi_A X_A)$], tem-se:

Espécie	Final da reação (F_i)	Final da reação (C_i)
A	$F_{A_0} - F_{A_0} X_A$	$\frac{C_{A_0} - C_{A_0} X_A}{(1 + \xi_A X_A)}$
B	$F_{B_0} - \frac{b}{a} F_{A_0} X_A$	$\frac{C_{B_0} - \frac{b}{a} C_{A_0} X_A}{(1 + \xi_A X_A)}$
R	$F_{R_0} + \frac{r}{a} F_{A_0} X_A$	$\frac{C_{R_0} + \frac{r}{a} C_{A_0} X_A}{(1 + \xi_A X_A)}$
S	$F_{S_0} + \frac{s}{a} F_{A_0} X_A$	$\frac{C_{S_0} + \frac{s}{a} C_{A_0} X_A}{(1 + \xi_A X_A)}$
I	F_{I_0}	$\frac{C_{I_0}}{(1 + \xi_A X_A)}$

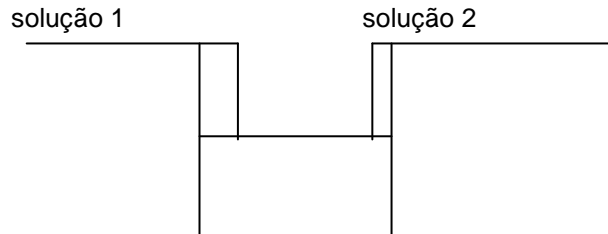
Para as reações químicas a volume constante (onde $\xi_A = 0$), tem-se que:

Espécie	Final da reação (F_i)	Final da reação (C_i)
A	$F_{A_0} - F_{A_0} X_A$	$C_{A_0} - C_{A_0} X_A$
B	$F_{B_0} - \frac{b}{a} F_{A_0} X_A$	$C_{B_0} - \frac{b}{a} C_{A_0} X_A$
R	$F_{R_0} + \frac{r}{a} F_{A_0} X_A$	$C_{R_0} + \frac{r}{a} C_{A_0} X_A$
S	$F_{S_0} + \frac{s}{a} F_{A_0} X_A$	$C_{S_0} + \frac{s}{a} C_{A_0} X_A$
I	F_{I_0}	C_{I_0}

8 – Revisão de Conceitos Gerais de Diluição

8.1 - Sistemas Descontínuos

Conforme já visto no curso de Cinética tem-se que:



Seja:

- C_{A1} concentração da substancia A na solução 1
- C_{A2} concentração da substancia A na solução 2
- C_{A0} concentração inicial da substancia A para a reação química (após a mistura de ambas as soluções)
- V_1 volume da solução 1
- V_2 volume da solução 2
- V_0 volume inicial da reação ($V_1 + V_2$)

A regra geral de uma diluição sempre será somar os números de moles de cada uma das soluções:

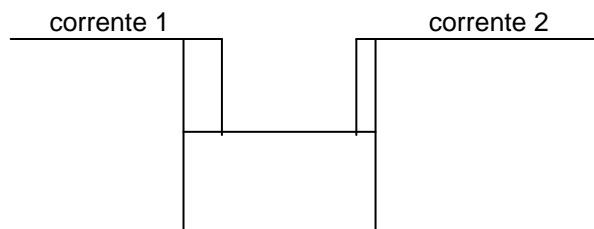
$$N_{A_0} = N_{A_1} + N_{A_2}$$

e que analisada sobre o conceito de concentração, conduz a : $C_{A_0} V = C_{A_1} V_1 + C_{A_2} V_2$

e que conduz a :
$$C_{A_0} = \frac{C_{A_1} V_1 + C_{A_2} V_2}{V}$$

8.2 - Sistemas Contínuos

Raciocínio idêntico ao anterior se aplica aos sistemas contínuos (que serão amplamente estudados na disciplina de Reatores).



Seja:

- F_{A1} velocidade molar da substancia A na corrente 1
- F_{A2} velocidade molar da substancia A na corrente 2
- F_{A0} velocidade molar da substancia A no inicio da reação química (após a mistura de ambas as soluções)
- v_1 vazão da solução 1
- v_2 vazão da solução 2
- v_0 vazão inicial da reação ($v_1 + v_2$)

A regra geral de uma diluição sempre será somar os números de moles de cada uma das soluções (expressos aqui em função do tempo): $F_{A_0} = F_{A_1} + F_{A_2}$ e que analisada sobre o conceito de

concentração, conduz a : $C_{A_0} v_0 = C_{A_1} v_1 + C_{A_2} v_2$ e que conduz a :
$$C_{A_0} = \frac{C_{A_1} v_1 + C_{A_2} v_2}{v_0}$$