

CONSIDERAÇÕES SOBRE BALANÇO DE MASSA EM REATORES QUÍMICOS

MOACYR JORGE ELIAS
Instituto Mauá de Tecnologia.
Escola de Engenharia Mauá
Engenharia Química – Bloco J, sala J 307
09580 900 – Praça Mauá nº1
São Caetano do Sul – SP
e-mail: moacyr@maua.br

ABSTRACT

Students can get confused when deal with some mass balance concepts. Ideal batch and steady state continuous mixing reactors are commented taking into account some mistakes commonly observed during laboratory or exercises classes.

A velocidade com que determinado reagente é consumido depende de sua concentração e da temperatura do meio reacional. De forma genérica, considerando a reação $A \rightarrow$ produtos, sem variação de volume, podemos expressar esta velocidade como sendo:

$$-r_A \left(\frac{\text{mol A}}{\text{tempo} \cdot \text{volume}} \right) = k \cdot C_A^n \quad (1)$$

onde k é a constante de velocidade (dependente da temperatura), C_A a concentração de A (mol / volume) e n a ordem da reação. O sinal negativo em r_A considera que o reagente A está sendo consumido. Há situações nas quais a expressão da velocidade é mais complexa; para o propósito deste artigo, vamos ficar com a equação (1). Vamos considerar também que o processo ocorre de forma isotérmica, assim k é constante.

Se a reação estiver ocorrendo em um reator batelada, isto é, carregamos o reator e a partir de dado instante a reação tem início, fazendo um balanço de massa para A no reator:

$$\begin{array}{c} \text{TAXA DE} \\ \text{ACÚMULO} \\ \text{DE A} \end{array} = \left(\begin{array}{c} \text{TAXA DE} \\ \text{ENTRADA} \\ \text{DE A} \end{array} + \begin{array}{c} \text{TAXA DE} \\ \text{FORMAÇÃO} \\ \text{DE A} \end{array} \right) - \left(\begin{array}{c} \text{TAXA DE} \\ \text{SAÍDA} \\ \text{DE A} \end{array} + \begin{array}{c} \text{TAXA DE} \\ \text{CONSUMO DE A} \\ \text{DEVIDO À REAÇÃO} \end{array} \right)$$

Sendo N_A o número de mols de A , V o volume útil do reator, e t o tempo:

$$\frac{dN_A}{dt} = 0 + 0 - 0 - k \cdot C_A^n \cdot V$$

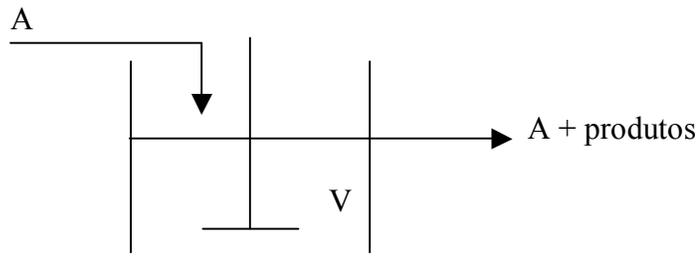
Ou ainda: $k \cdot C_A^n = -\frac{1}{V} \cdot \frac{dN_A}{dt}$

Como estamos considerando volume constante: $k \cdot C_A^n = -\frac{dC_A}{dt}$ (2)

Uma confusão que vemos acontecer, é o estabelecimento da relação entre as equações (1) e (2) de modo a expressar a velocidade da reação:

$$-r_A = k \cdot C_A^n = -\frac{dC_A}{dt} \quad (3)$$

A equação (3) é válida apenas quando o processo está ocorrendo em um reator batelada. Senão, vejamos o caso de um reator de mistura ideal operando continuamente em estado estacionário:



Nestas condições, a concentração de A no reator é constante com o tempo. Assim, aplicando a equação (3), chegaríamos a:

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = 0 \quad (?!)$$

No reator de mistura em consideração, a velocidade da reação se dá com a concentração de A no reator, que é igual à concentração de saída C_A (equação 1). Sendo F_{A0} a taxa de entrada de A (mol / tempo) no reator e F_A a taxa de saída de A (mol / tempo) do reator, o balanço de massa fornece:

$$\text{TAXA DE ACÚMULO DE A} = \left(\text{TAXA DE ENTRADA DE A} + \text{TAXA DE FORMAÇÃO DE A} \right) - \left(\text{TAXA DE SAÍDA DE A} + \text{TAXA DE CONSUMO DE A DEVIDO À REAÇÃO} \right)$$

Ou seja: $0 = F_{A0} + 0 - F_A - k \cdot C_A^n \cdot V$ (4)

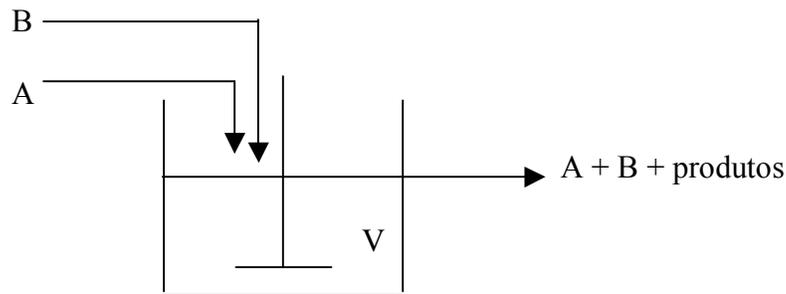
Como o volume é constante, $F_{A0} = u \cdot C_{A0}$, e $F_A = u \cdot C_A$, onde u é a vazão volumétrica (volume / tempo). Substituindo na equação (4), chegamos a:

$$\tau = \frac{C_{A0} - C_A}{k \cdot C_A^n} \quad \text{ou} \quad \tau = \frac{C_{A0} - C_A}{(-r_A)} \quad \text{com} \quad (-r_A) = k \cdot C_A^n \quad (5)$$

onde τ é o tempo espacial $\left(\tau = \frac{V}{u} \right)$.

A equação (5) é empregada para o cálculo do volume útil necessário para um reator contínuo de mistura ideal, operando no estado estacionário, converter A desde C_{A0} até C_A .

Uma abordagem simplista pode levar a “decorar” a “fórmula para o reator de mistura” (equação 5). No entanto, considere o caso em que a reação seja $A + B \rightarrow$ produtos, e que A e B sejam alimentados ao reator por linhas separadas:



O balanço de massa para o reagente A:

$$0 = F_{A0} + 0 - F_A - (-r_A) \cdot V$$

Neste caso, $F_{A0} = u_A \cdot C_{A0}$, e $F_A = (u_A + u_B) \cdot C_A$. Assim:

$$0 = u_A \cdot C_{A0} - (u_A + u_B) \cdot C_A - (-r_A) \cdot V$$

Desenvolvendo obtemos:

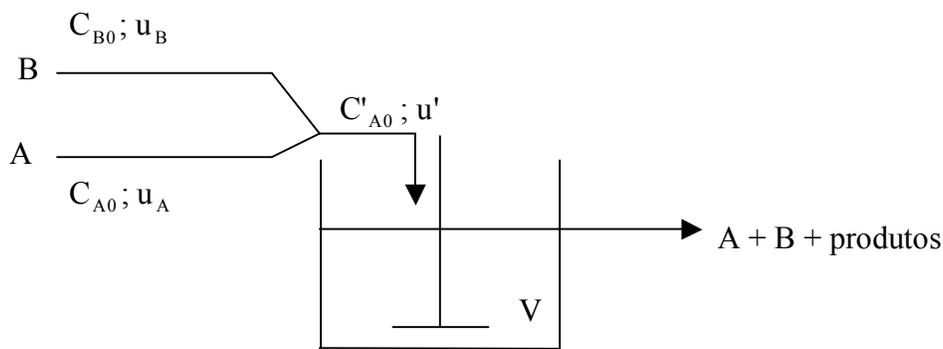
$$\frac{u_A \cdot C_{A0} - (u_A + u_B) \cdot C_A}{(-r_A)} = V \quad (6)$$

Se $u_A = u_B = u$:

$$\frac{u \cdot C_{A0} - 2u \cdot C_A}{(-r_A)} = V \quad \Rightarrow \quad \frac{\frac{C_{A0}}{2} - C_A}{(-r_A)} = \tau$$

onde o tempo espacial (tempo de residência) $\tau = \frac{V}{2u}$

Se A e B viessem com $u_A = u_B = u$, por linhas distintas e, antes de entrar no reator, se unissem em uma única linha, teríamos:



Para este caso: $C'_{A0} = \frac{C_{A0}}{2}$, e $u' = 2u$. A equação (5) seria de aplicação imediata:

$$\tau = \frac{C'_{A0} - C_A}{(-r_A)} \quad \text{com} \quad \tau = \frac{V}{u'}$$

O balanço de massa torna-se mais complexo quando temos processo transiente. É muito importante que os estudantes desenvolvam a percepção para cada situação, evitando o uso de fórmulas prontas.