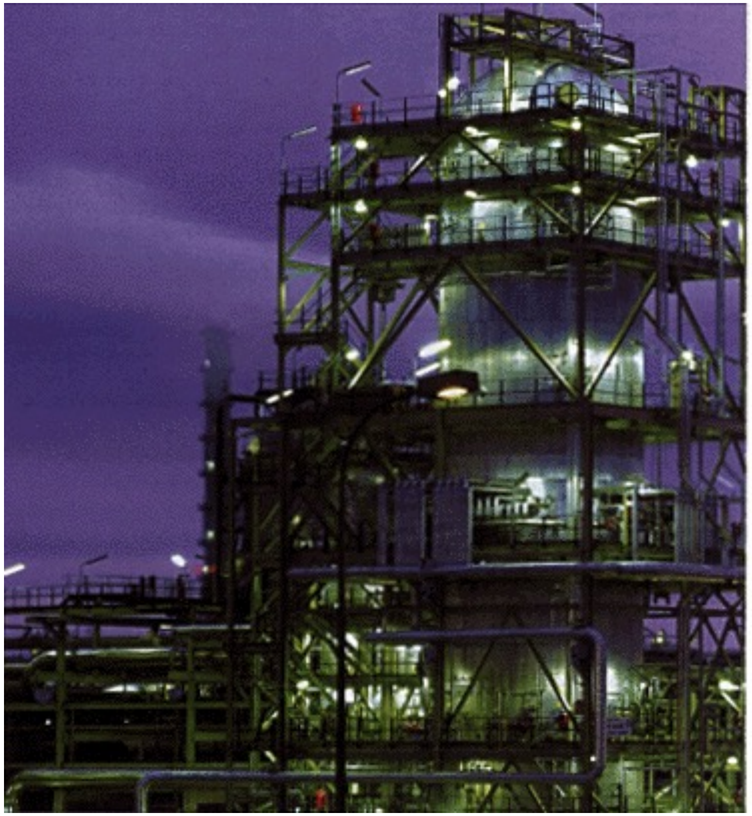
Reactores Químicos

Dimensionamento de reactores ideais

Operação isotérmica e não isotérmica

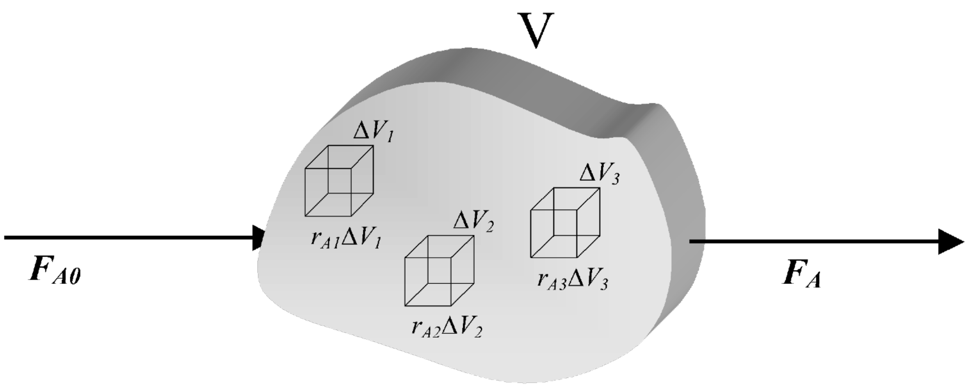
Preparação e Caracterização de Catalisadores




C2A
FOTOSEARCH.com

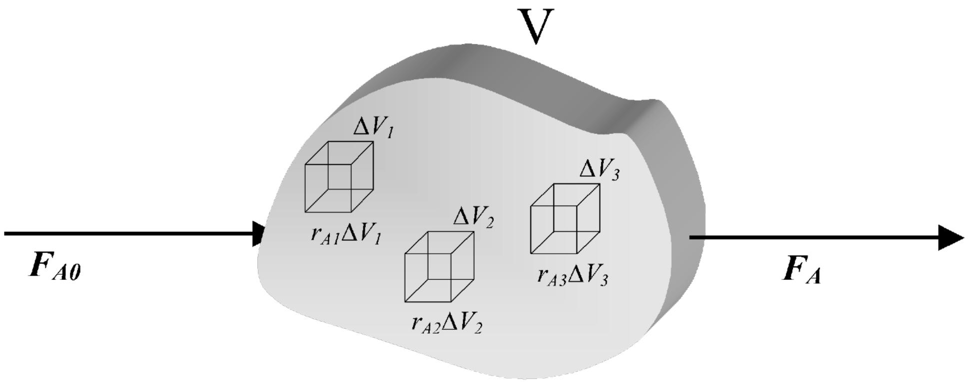
Equação geral de balanço molar

$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$



Equação geral de balanço molar

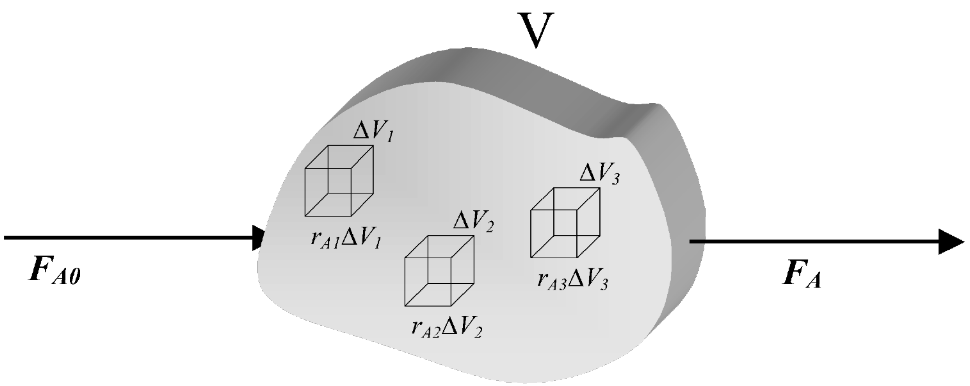
aA + bB +... $\longrightarrow$ dD + eE + ...



Balanço molar ao reagente limitante A

Equação geral de balanço molar

$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$



Balanço molar ao reagente limitante A

Moles de A que entram	-	Moles de A que saiem	+	Moles de A gerados	=	Moles de A acumulados

Definição de velocidade de reacção:

Moles de reagente A consumidos por unidade de tempo, relativamente a uma **grandeza extensiva do sistema** reaccional (ex.: o volume do reactor):

Definição de velocidade de reacção:

Moles de reagente A consumidos por unidade de tempo, relativamente a uma **grandeza extensiva do sistema** reaccional (ex.: o volume do reactor):

$$r_A = \frac{1}{V} \cdot \frac{dN_A}{dt}$$

Definição de velocidade de reacção:

Moles de reagente A consumidos por unidade de tempo, relativamente a uma **grandeza extensiva do sistema** reaccional (ex.: o volume do reactor):

$$r_A = \frac{1}{V} \cdot \frac{dN_A}{dt} \qquad r_A' = \frac{1}{W} \cdot \frac{dN_A}{dt}$$

Definição de velocidade de reacção:

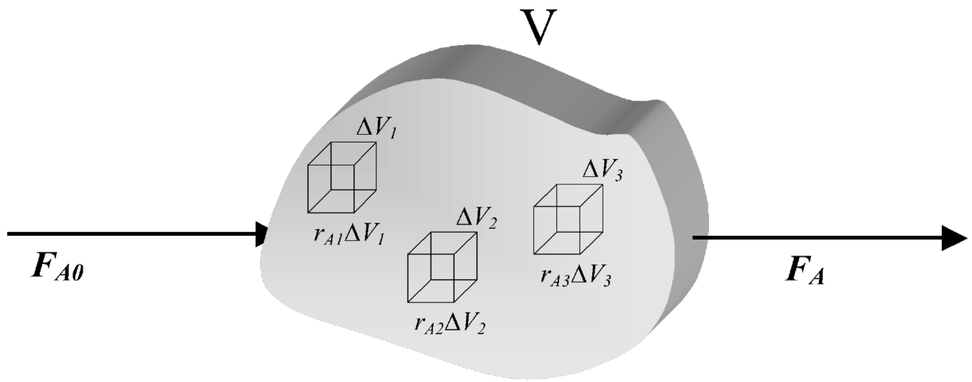
Moles de reagente A consumidos por unidade de tempo, relativamente a uma **grandeza extensiva do sistema** reaccional (ex.: o volume do reactor):

$$r_A = \frac{1}{V} \cdot \frac{dN_A}{dt} \qquad r_A' = \frac{1}{W} \cdot \frac{dN_A}{dt} \qquad r_A'' = \frac{1}{S} \cdot \frac{dN_A}{dt}$$

Definição de velocidade de reacção:

Moles de reagente A consumidos por unidade de tempo, relativamente a uma grandeza extensiva do sistema reaccional (ex.: o volume do reactor):

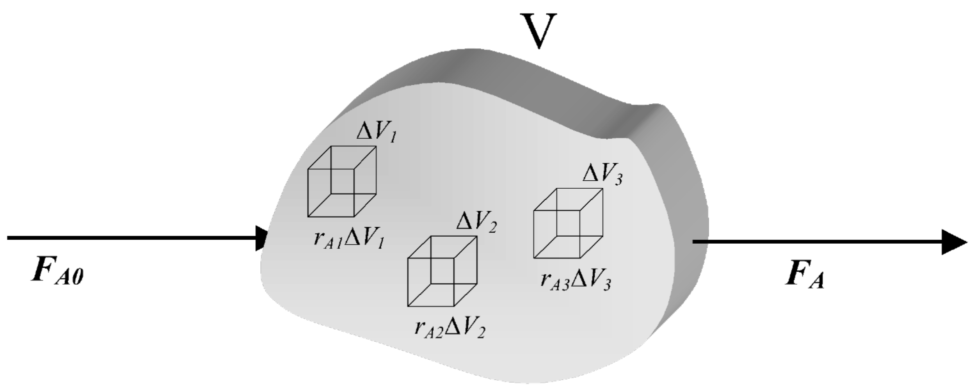
$$r_A = \frac{1}{V} \cdot \frac{dN_A}{dt} \qquad r_A' = \frac{1}{W} \cdot \frac{dN_A}{dt} \qquad r_A'' = \frac{1}{S} \cdot \frac{dN_A}{dt}$$



Definição de velocidade de reacção:

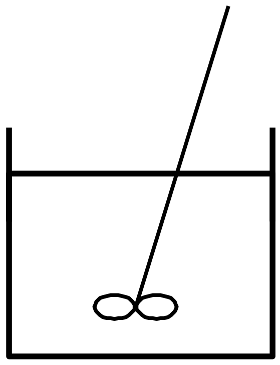
Moles de reagente A consumidos por unidade de tempo, relativamente a uma **grandeza extensiva do sistema** reaccional (ex.: o volume do reactor):

$$r_A = \frac{1}{V} \cdot \frac{dN_A}{dt} \qquad r_A' = \frac{1}{W} \cdot \frac{dN_A}{dt} \qquad r_A'' = \frac{1}{S} \cdot \frac{dN_A}{dt}$$



$$\boxed{\text{Moles de A gerados}} = \int_V r_A \, dV$$

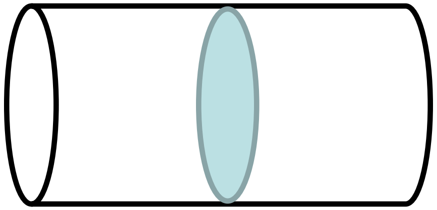
Reactores ideais



Reactores do tipo tanque agitado

Mistura perfeitamente homogénea em todos os pontos do reactor

Reactores Tubulares



Mistura perfeitamente homogénea numa secção recta

Moles de A que entram	-	Moles de A que saiem	+	Moles de A gerados	=	Moles de A acumulados

$$F_{A0} - F_A + \int_V r_A \, dV = \frac{dN_A}{dt}$$

Moles de A que entram - Moles de A que saiem + Moles de A gerados = Moles de A acumulados

$$F_{A0} - F_A + \int_V r_A \, dV = \frac{dN_A}{dt}$$

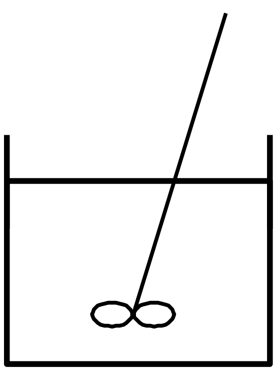
Reactores Ideais

Moles de A que entram - Moles de A que saiem + Moles de A gerados = Moles de A acumulados

$$F_{A0} - F_A + \int_V r_A \, dV = \frac{dN_A}{dt}$$

Reactores Ideais

Batch
ou descontínuo

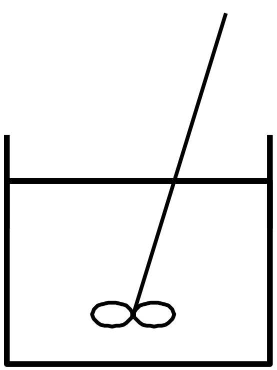


Moles de A que entram - Moles de A que saiem + Moles de A gerados = Moles de A acumulados

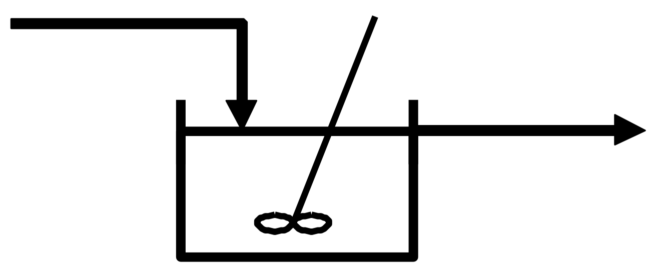
$$F_{A0} - F_A + \int_V r_A \, dV = \frac{dN_A}{dt}$$

Reactores Ideais

Batch
ou descontínuo



CSTR
Continuous Stirred Tank Reactor

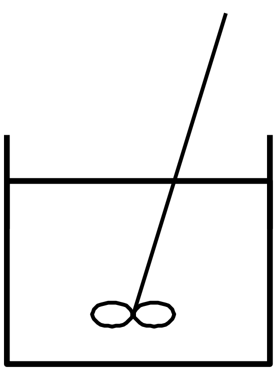


Moles de A que entram - Moles de A que saiem + Moles de A gerados = Moles de A acumulados

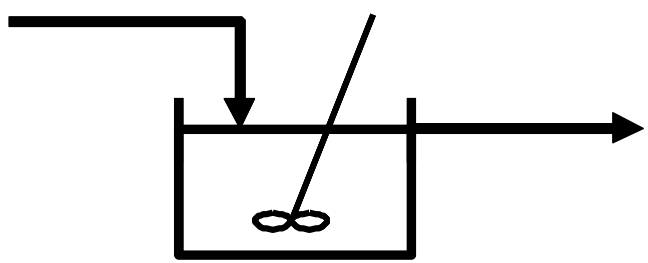
$$F_{A0} - F_A + \int_V r_A \, dV = \frac{dN_A}{dt}$$

Reactores Ideais

Batch
ou descontínuo

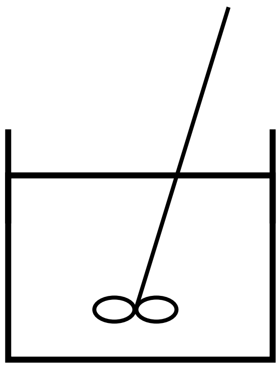


CSTR
Continuous Stirred Tank Reactor

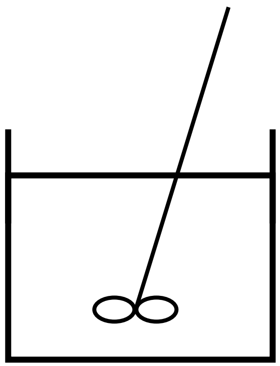


PFR
Plug Flow Reactor
ou tubular

<u>Balanço ao reactor *Batch*</u>



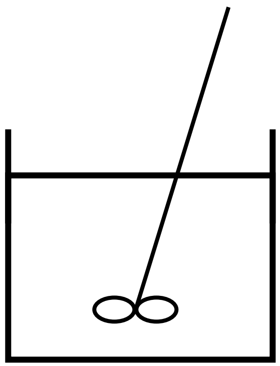
Balanço ao reactor *Batch*



Não há correntes de entrada nem de saída:

$$\cancel{F_{A0}} - \cancel{F_A} + \int_V r_A \, dV = \frac{dN_A}{dt}$$

Balanço ao reactor *Batch*



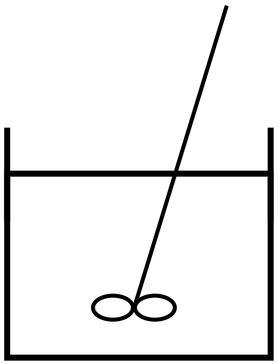
O reactor é **perfeitamente agitado**; portanto, a velocidade de reacção é **igual em todos os pontos**:

$$\int_V r_A \, dV = r_A V$$

Não há correntes de entrada nem de saída:

$$\boxed{\cancel{F_{A0}} - \cancel{F_A} + \int_V r_A \, dV = \frac{dN_A}{dt}}$$

Balanço ao reactor *Batch*



O reactor é **perfeitamente agitado**; portanto, a velocidade de reacção é **igual em todos os pontos**:

$$\int_V r_A \, dV = r_A V$$

Não há correntes de entrada nem de saída:

$$\boxed{\cancel{F_{A0}} - \cancel{F_A} + \int_V r_A \, dV = \frac{dN_A}{dt}}$$

$$\boxed{r_A V = \frac{dN_A}{dt}}$$

Conversão: fracção do consumido relativamente ao alimentado

$$\boxed{X = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}}}$$

Conversão: fracção do consumido relativamente ao alimentado

$$\boxed{X = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}}}$$

$$\therefore \quad N_A = N_{A0} \cdot (1 - X)$$

Conversão: fracção do consumido relativamente ao alimentado

$$\boxed{X = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}}}$$

$$\therefore \quad N_A = N_{A0} \cdot (1 - X)$$

$$dt = \frac{1}{V} \cdot \frac{dN_A}{r_A}$$

Conversão: fracção do consumido relativamente ao alimentado

$$\boxed{X = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}}}$$

$$\therefore \quad N_A = N_{A0} \cdot (1 - X)$$

$$\boxed{dN_A = -N_{A0}\, dX}$$

$$\boxed{dt = \frac{1}{V} \cdot \frac{dN_A}{r_A}}$$

Conversão: fracção do consumido relativamente ao alimentado

$$\boxed{X = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}}}$$

$$\therefore \quad N_A = N_{A0} \cdot (1 - X)$$

$$dN_A = -N_{A0}\, dX$$

$$dt = \frac{1}{V} \cdot \frac{dN_A}{r_A}$$

$$dt = \frac{N_{A0}}{V} \cdot \frac{dX}{(-r_A)} = C_{A0} \cdot \frac{dX}{(-r_A)}$$

Conversão: fracção do consumido relativamente ao alimentado

$$\boxed{X = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}}}$$

$$\therefore \quad N_A = N_{A0} \cdot (1 - X)$$

$$dN_A = -N_{A0}\, dX$$

$$dt = \frac{1}{V} \cdot \frac{dN_A}{r_A}$$

$$dt = \frac{N_{A0}}{V} \cdot \frac{dX}{(-r_A)} = C_{A0} \cdot \frac{dX}{(-r_A)}$$

$$\boxed{t = \int_0^t dt = C_{A0} \cdot \int_0^X \frac{dX}{(-r_A)}}$$

Reactores contínuos

Mantendo-se **constantes** todas as condições de funcionamento (correntes de alimentação, temperatura, pressão, etc.), ao fim de um período inicial todos os parâmetros da corrente de saída (caudal, concentrações, temperatura, etc.) tendem para valores constantes no tempo.

Reactores contínuos

Mantendo-se **constantes** todas as condições de funcionamento (correntes de alimentação, temperatura, pressão, etc.), ao fim de um período inicial todos os parâmetros da corrente de saída (caudal, concentrações, temperatura, etc.) tendem para valores constantes no tempo.

Nesta altura, dizemos que o reactor se encontra em **estado estacionário**.

Reactores contínuos

Mantendo-se **constantes** todas as condições de funcionamento (correntes de alimentação, temperatura, pressão, etc.), ao fim de um período inicial todos os parâmetros da corrente de saída (caudal, concentrações, temperatura, etc.) tendem para valores constantes no tempo.

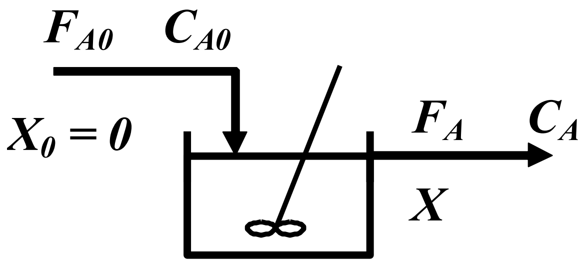
Nesta altura, dizemos que o reactor se encontra em **estado estacionário**.

Tempo espacial $$\tau = \frac{V}{v}$$

V – volume do reactor

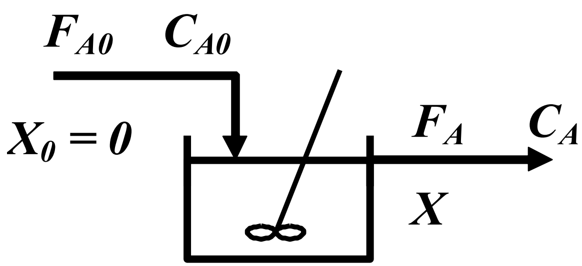
v – caudal volumétrico

Balanço ao reactor *CSTR*



$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$

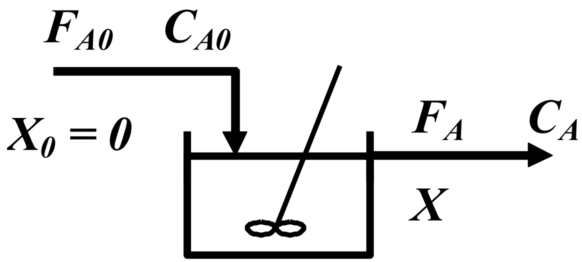
Balanço ao reactor *CSTR*



$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$

$$F_{A0} - F_A + \int^{V} r_A \, dV = \frac{dN_A}{dt}$$

Balanço ao reactor *CSTR*



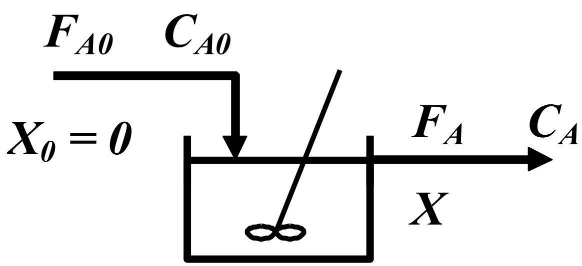
$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$

$$F_{A0} - F_A + \int^{V} r_A\, dV = \frac{dN_A}{dt}$$

$r_A V$

(reactor perfeitamente agitado)

Balanço ao reactor *CSTR*



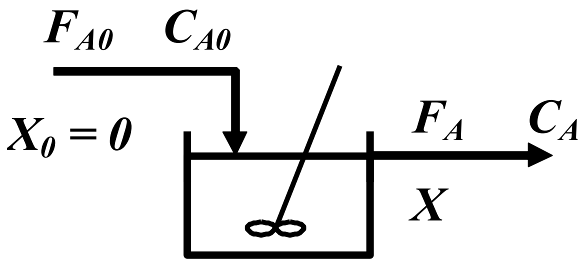
$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$

$$F_{A0} - F_A + \int^{V} r_A \, dV = \frac{dN_A}{dt}$$

$r_A V$
(reactor perfeitamente agitado)

0
(estado estacionário)

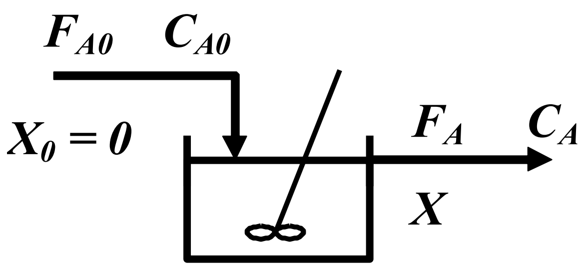
Balanço ao reactor *CSTR*



$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$

$$F_{A0} - F_A + r_A V = 0$$

Balanço ao reactor *CSTR*

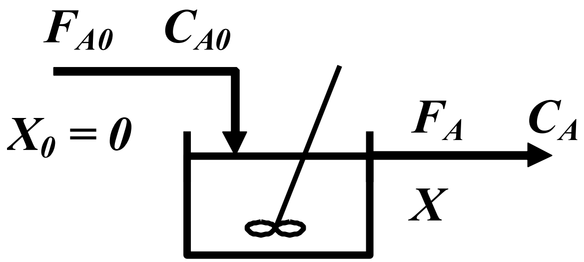


$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$

$$F_{A0} - F_A + r_A V = 0$$

$$F_A = F_{A0} - F_{A0} \cdot X$$

Balanço ao reactor *CSTR*



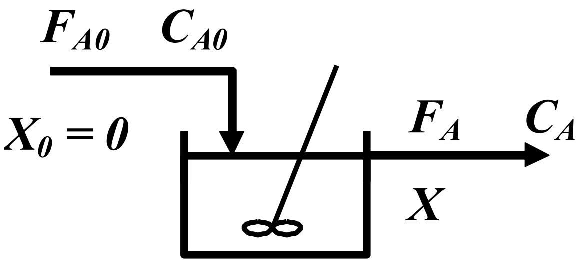
$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$

$$F_{A0} - F_A + r_A V = 0$$

$$F_A = F_{A0} - F_{A0} \cdot X$$

$$\therefore \quad F_{A0} - \left(F_{A0} - F_{A0} \cdot X\right) + r_A \cdot V = 0$$

Balanço ao reactor *CSTR*



$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$

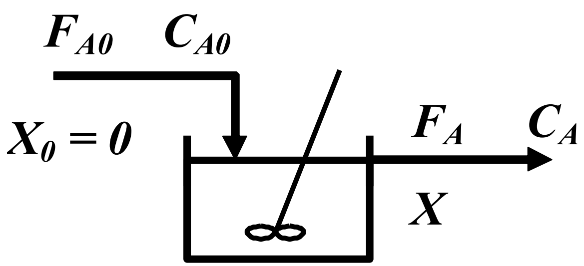
$$F_{A0} - F_A + r_A V = 0$$

$$F_A = F_{A0} - F_{A0} \cdot X$$

$$\therefore \quad F_{A0} - \left(F_{A0} - F_{A0} \cdot X\right) + r_A \cdot V = 0$$

$$\therefore \quad F_{A0} \cdot X + r_A \cdot V = 0$$

Balanço ao reactor *CSTR*



$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$

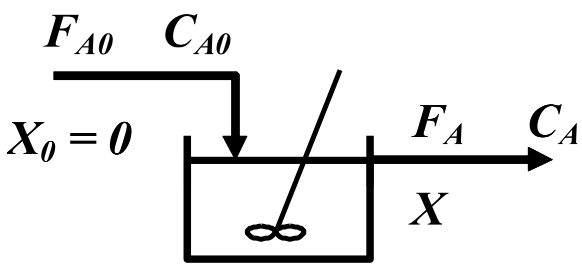
$$F_{A0} - F_A + r_A V = 0$$

$$F_A = F_{A0} - F_{A0} \cdot X$$

$$\therefore \quad F_{A0} - \left(F_{A0} - F_{A0} \cdot X\right) + r_A \cdot V = 0$$

$$\therefore \quad F_{A0} \cdot X + r_A \cdot V = 0 \quad \therefore \quad V = \frac{F_{A0} \cdot X}{\left(-r_A\right)}$$

Balanço ao reactor *CSTR*



$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$

$$F_{A0} - F_A + r_A V = 0$$

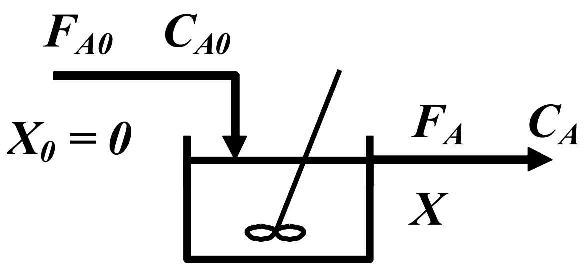
$$F_A = F_{A0} - F_{A0} \cdot X$$

$$\therefore \quad F_{A0} - \left(F_{A0} - F_{A0} \cdot X\right) + r_A \cdot V = 0$$

$$\therefore \quad F_{A0} \cdot X + r_A \cdot V = 0 \qquad \therefore \quad V = \frac{F_{A0} \cdot X}{\left(-r_A\right)}$$

$$\boxed{C_{A0} = \frac{F_{A0}}{v_0}}$$

Balanço ao reactor *CSTR*



$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$

$$F_{A0} - F_A + r_A V = 0$$

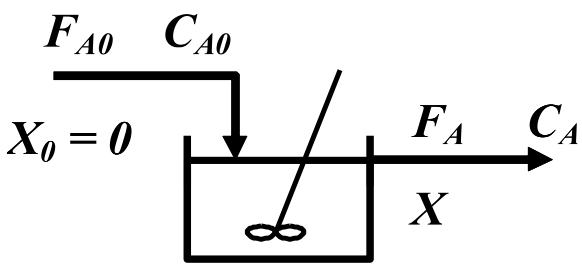
$$F_A = F_{A0} - F_{A0} \cdot X$$

$$\therefore \quad F_{A0} - \left(F_{A0} - F_{A0} \cdot X\right) + r_A \cdot V = 0 \qquad \therefore \quad V = C_{A0} \cdot v_0 \cdot \frac{X}{\left(-r_A\right)}$$

$$\boxed{C_{A0} = \frac{F_{A0}}{v_0}}$$

$$\therefore \quad F_{A0} \cdot X + r_A \cdot V = 0 \qquad \therefore \quad V = \frac{F_{A0} \cdot X}{\left(-r_A\right)}$$

Balanço ao reactor *CSTR*



$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$

$$F_{A0} - F_A + r_A V = 0$$

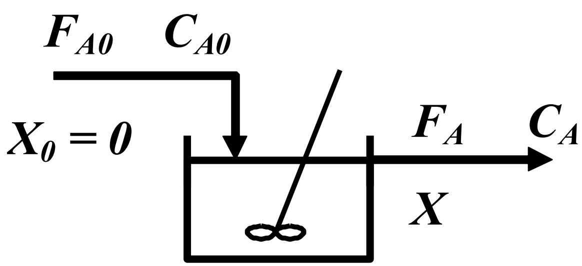
$$F_A = F_{A0} - F_{A0} \cdot X$$

$$\therefore \quad F_{A0} - \left(F_{A0} - F_{A0} \cdot X\right) + r_A \cdot V = 0 \qquad \therefore \quad V = C_{A0} \cdot v_0 \cdot \frac{X}{(-r_A)}$$

$$\boxed{C_{A0} = \frac{F_{A0}}{v_0}}$$

$$\therefore \quad F_{A0} \cdot X + r_A \cdot V = 0 \qquad \therefore \quad V = \frac{F_{A0} \cdot X}{(-r_A)} \qquad \therefore \quad \frac{V}{v_0} = C_{A0} \frac{X}{(-r_A)}$$

Balanço ao reactor *CSTR*



$$aA + bB + \ldots \longrightarrow dD + eE + \ldots$$

$$F_{A0} - F_A + r_A V = 0$$

$$F_A = F_{A0} - F_{A0} \cdot X$$

$$\therefore \quad F_{A0} - \left(F_{A0} - F_{A0} \cdot X\right) + r_A \cdot V = 0 \qquad \therefore \quad V = C_{A0} \cdot v_0 \cdot \frac{X}{(-r_A)}$$

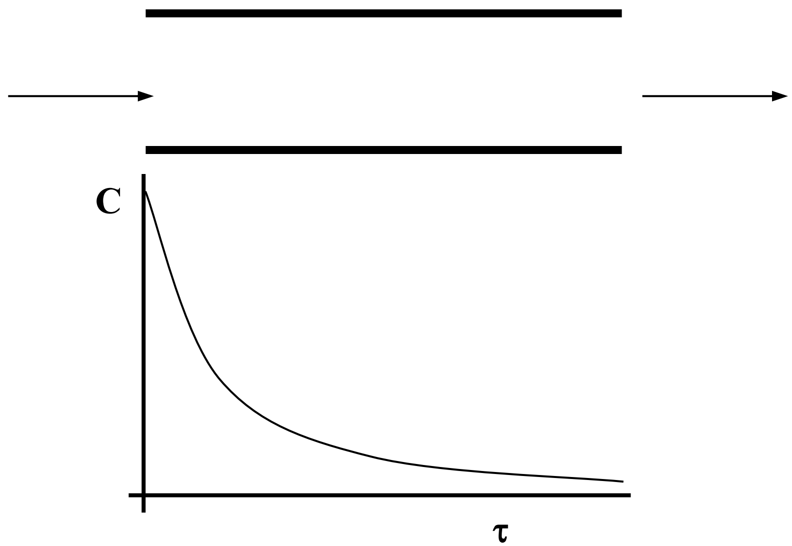
$$\boxed{C_{A0} = \frac{F_{A0}}{v_0}}$$

$$\therefore \quad F_{A0} \cdot X + r_A \cdot V = 0 \qquad \therefore \quad V = \frac{F_{A0} \cdot X}{(-r_A)} \qquad \therefore \quad \frac{V}{v_0} = C_{A0} \frac{X}{(-r_A)}$$

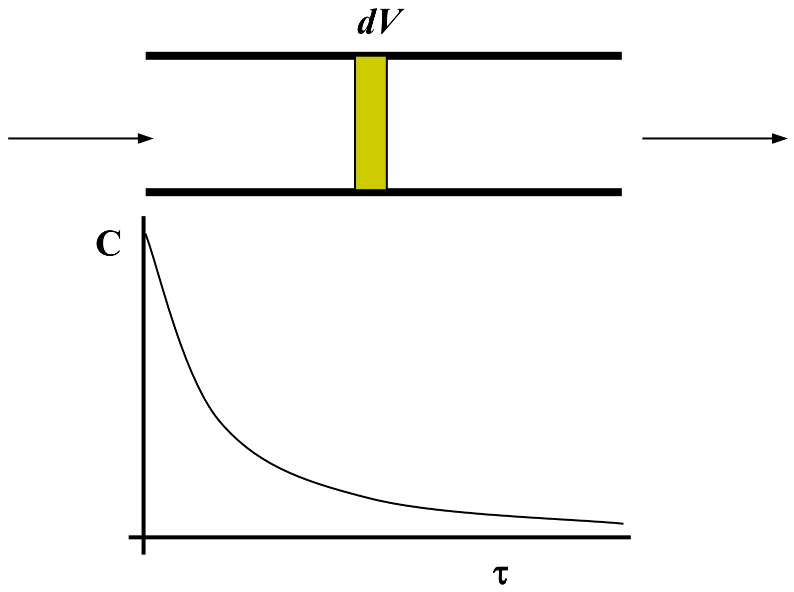
$$\boxed{\therefore \quad \tau = C_{A0} \frac{X}{(-r_A)}}$$

Balanço ao reactor *PFR*:

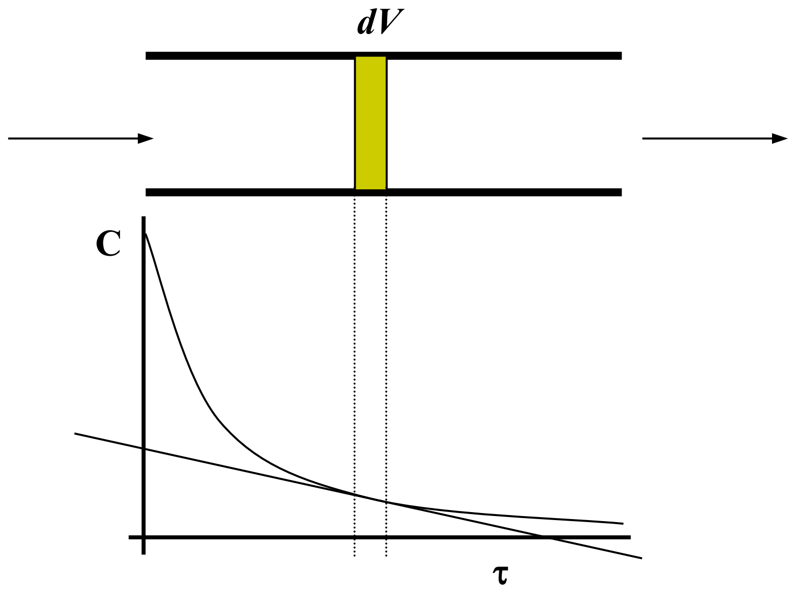
Balanço ao reactor *PFR*:



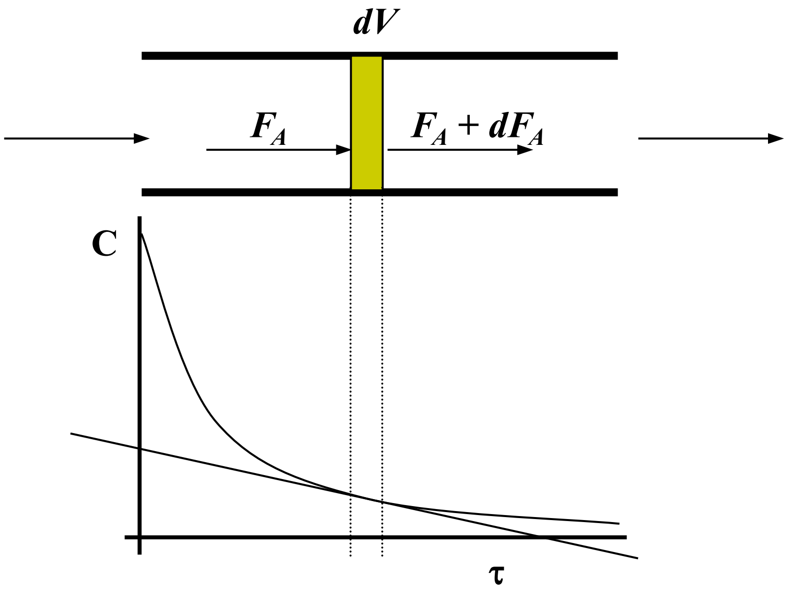
<u>Balanço ao reactor *PFR*:</u>



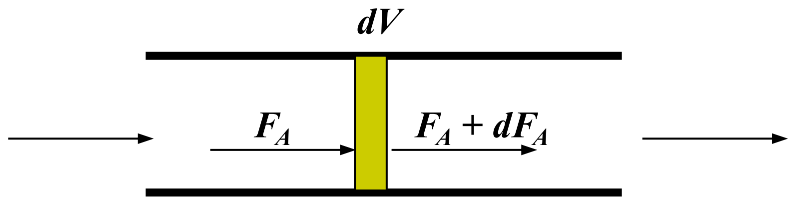
Balanço ao reactor *PFR*:



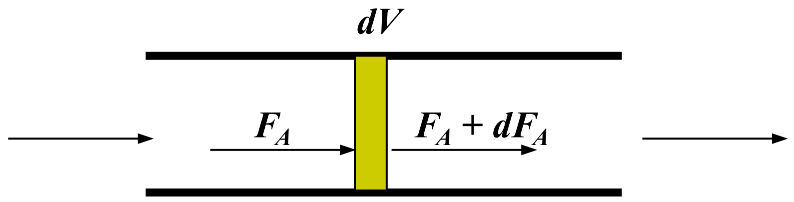
Balanço ao reactor *PFR*:



Balanço ao reactor *PFR*:



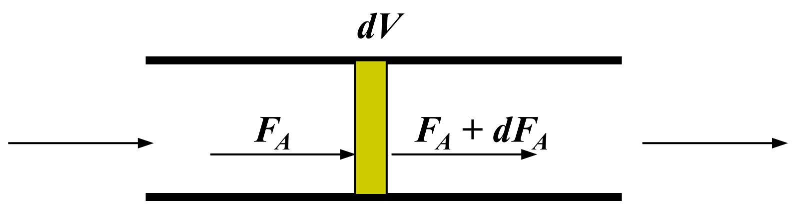
Balanço ao reactor *PFR*:



F_A

Moles de A que entram na "fatia" elementar

Balanço ao reactor *PFR*:

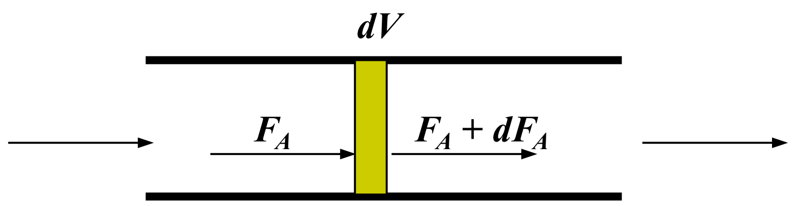


Moles de A que saiem da "fatia" elementar

$$F_A - \left(F_A + dF_A\right)$$

Moles de A que entram na "fatia" elementar

Balanço ao reactor *PFR*:



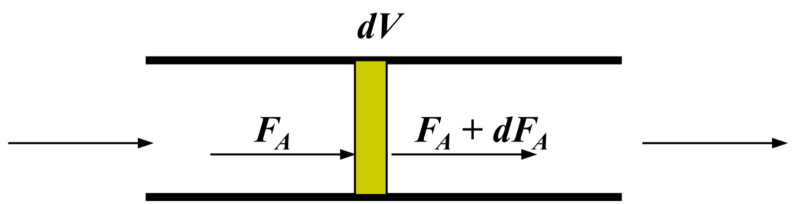
Moles de A que saiem da "fatia" elementar

$$F_A - \left(F_A + dF_A\right) + r_A\, dV$$

Moles de A que entram na "fatia" elementar

Moles de A gerados na "fatia" elementar

Balanço ao reactor *PFR*:



Moles de A que saiem da "fatia" elementar

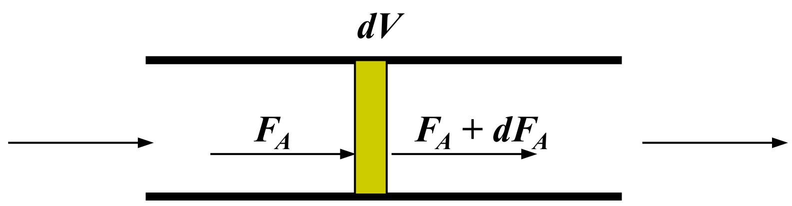
Estado estacionário

$$F_A - \left(F_A + dF_A\right) + r_A\,dV = 0$$

Moles de A que entram na "fatia" elementar

Moles de A gerados na "fatia" elementar

Balanço ao reactor *PFR*:



Moles de A que saiem da "fatia" elementar

Estado estacionário

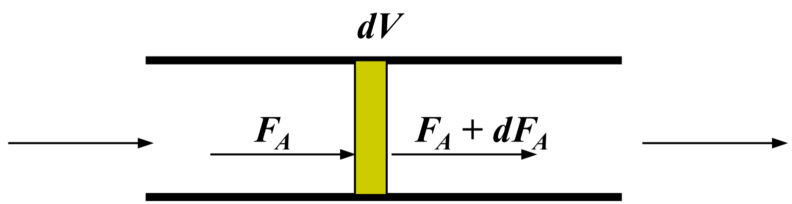
$$F_A - (F_A + dF_A) + r_A\, dV = 0$$

Moles de A que entram na "fatia" elementar

Moles de A gerados na "fatia" elementar

$$\therefore \qquad -dF_A + r_A\, dV = 0$$

Balanço ao reactor *PFR*:



Moles de A que saiem da "fatia" elementar

$$F_A - (F_A + dF_A) + r_A \, dV = 0$$

Estado estacionário

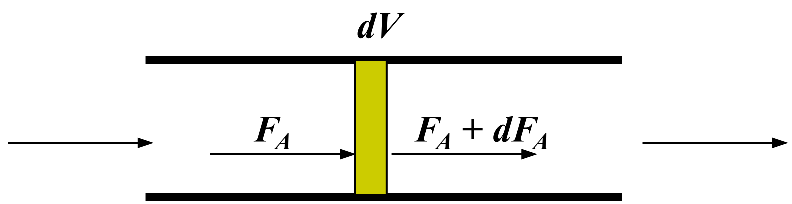
$$F_A = F_{A0} \cdot (1 - X)$$

Moles de A que entram na "fatia" elementar

Moles de A gerados na "fatia" elementar

$$\therefore \qquad - dF_A + r_A \, dV = 0$$

Balanço ao reactor *PFR*:



Moles de A que saiem da "fatia" elementar

$$F_A - \left(F_A + dF_A\right) + r_A\, dV = 0$$

Estado estacionário

Moles de A que entram na "fatia" elementar

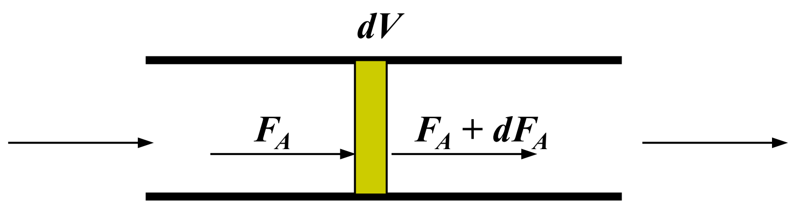
Moles de A gerados na "fatia" elementar

$$F_A = F_{A0} \cdot (1 - X)$$

$$\therefore \qquad dF_A = -F_{A0}\, dX$$

$$\therefore \qquad -dF_A + r_A\, dV = 0$$

Balanço ao reactor *PFR*:



Moles de A que saiem da "fatia" elementar

Estado estacionário

$$F_A - \left(F_A + dF_A\right) + r_A\,dV = 0$$

Moles de A que entram na "fatia" elementar

Moles de A gerados na "fatia" elementar

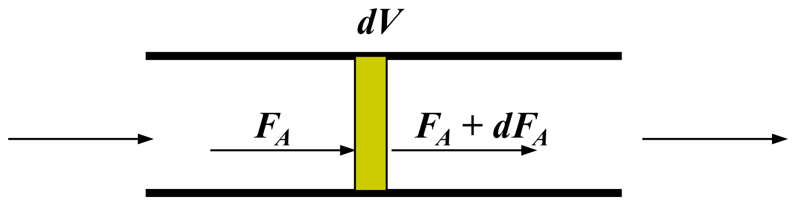
$$F_A = F_{A0} \cdot (1 - X)$$

$$\therefore \qquad dF_A = -F_{A0}\,dX$$

$$\therefore \qquad -dF_A + r_A\,dV = 0$$

$$\therefore \qquad F_{A0}\,dX + r_A\,dV = 0$$

Balanço ao reactor *PFR*:



Moles de A que saiem da “fatia” elementar

Estado estacionário

$$F_A - \left(F_A + dF_A\right) + r_A\,dV = 0$$

Moles de A que entram na “fatia” elementar

Moles de A gerados na “fatia” elementar

$$F_A = F_{A0} \cdot \left(1 - X\right)$$

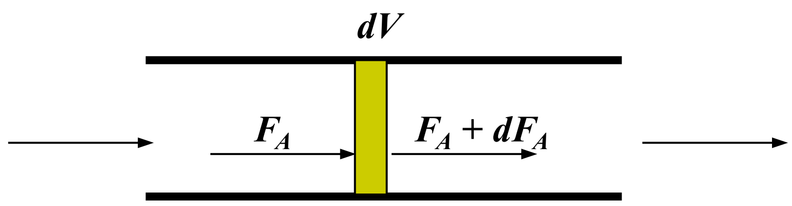
$$\therefore \qquad dF_A = -F_{A0}\,dX$$

$$\therefore \qquad -dF_A + r_A\,dV = 0$$

$$dV = F_{A0} \cdot \frac{dX}{\left(-r_A\right)}$$

$$\therefore \qquad F_{A0}\,dX + r_A\,dV = 0$$

Balanço ao reactor *PFR*:



Moles de A que saiem da "fatia" elementar

Estado estacionário

$$F_A - (F_A + dF_A) + r_A\, dV = 0$$

Moles de A que entram na "fatia" elementar

Moles de A gerados na "fatia" elementar

$$F_A = F_{A0} \cdot (1 - X)$$

$$\therefore \qquad dF_A = -F_{A0}\, dX$$

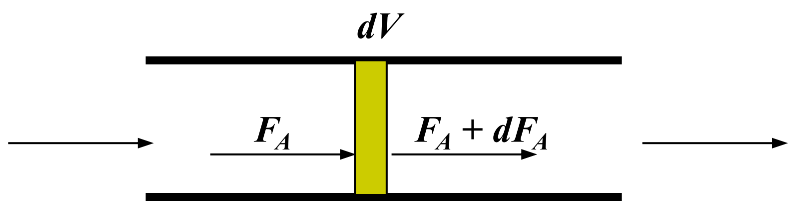
$$\therefore \qquad -dF_A + r_A\, dV = 0$$

$$\therefore \qquad F_{A0} dX + r_A\, dV = 0$$

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

$$\therefore \qquad V = \int_0^V dV = F_{A0} \cdot \int_0^X \frac{dX}{(-r_A)}$$

Balanço ao reactor *PFR*:



Moles de A que saiem da "fatia" elementar

$$F_A - \left(F_A + dF_A\right) + r_A\, dV = 0$$

Estado estacionário

Moles de A que entram na "fatia" elementar

Moles de A gerados na "fatia" elementar

$$F_A = F_{A0} \cdot \left(1 - X\right)$$

$$\therefore \quad dF_A = -F_{A0}\, dX$$

$$\therefore \quad -dF_A + r_A\, dV = 0$$

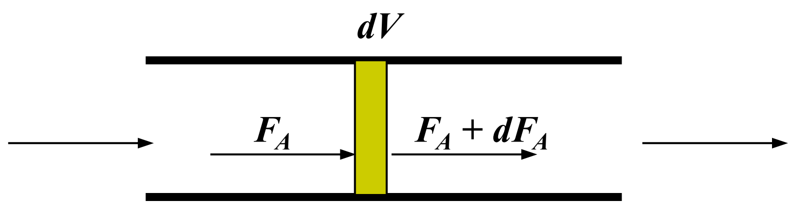
$$\therefore \quad F_{A0}\, dX + r_A\, dV = 0$$

$$dV = F_{A0} \cdot \frac{dX}{\left(-r_A\right)}$$

$$\therefore \quad V = \int_0^V dV = F_{A0} \cdot \int_0^X \frac{dX}{\left(-r_A\right)}$$

$$\therefore \quad V = C_{A0} \cdot v_0 \cdot \int_0^X \frac{dX}{\left(-r_A\right)}$$

Balanço ao reactor *PFR*:



Moles de A que saiem da "fatia" elementar

Estado estacionário

$$F_A - (F_A + dF_A) + r_A\, dV = 0$$

Moles de A que entram na "fatia" elementar

Moles de A gerados na "fatia" elementar

$$F_A = F_{A0} \cdot (1 - X)$$

$$\therefore \quad dF_A = -F_{A0}\, dX$$

$$\therefore \quad -dF_A + r_A\, dV = 0$$

$$\therefore \quad F_{A0} dX + r_A\, dV = 0$$

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

$$\therefore \quad V = \int_0^V dV = F_{A0} \cdot \int_0^X \frac{dX}{(-r_A)}$$

$$V = C_{A0} \cdot v_0 \cdot \int_0^X \frac{dX}{(-r_A)}$$

$$\boxed{\tau = \frac{V}{v_0} = C_{A0} \cdot \int_0^X \frac{dX}{(-r_A)}}$$

Batch:

$$t = \int_0^t dt = C_{A0} \cdot \int_0^X \frac{dX}{(-r_A)}$$

CSTR:

$$\tau = C_{A0} \frac{X}{(-r_A)}$$

PFR:

$$\tau = \frac{V}{v_0} = C_{A0} \cdot \int_0^X \frac{dX}{(-r_A)}$$