

Universidade Federal de Santa Maria
Centro de Tecnologia
Departamento de engenharia química
DEQ 1032 – Engenharia das Reações Químicas Avançadas

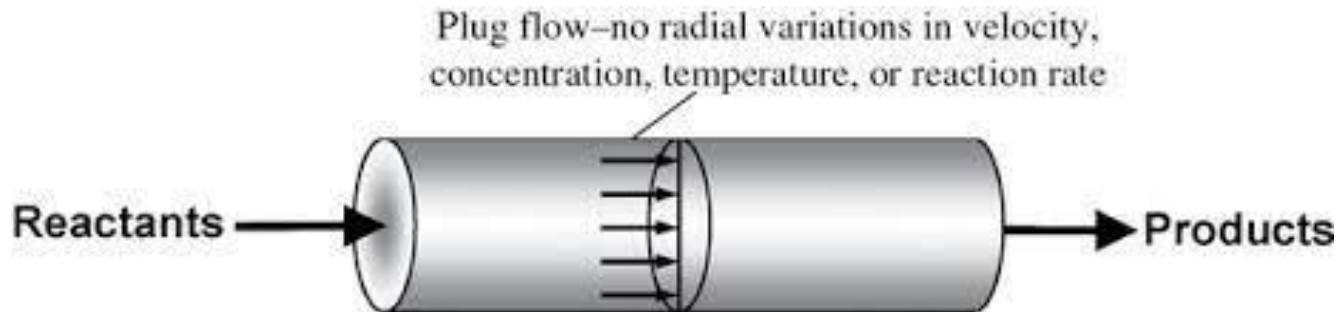
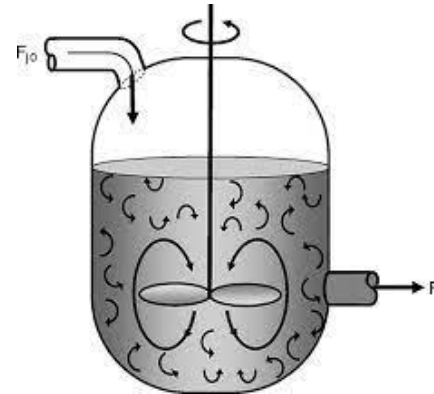
REATORES NÃO IDEAIS

DTR

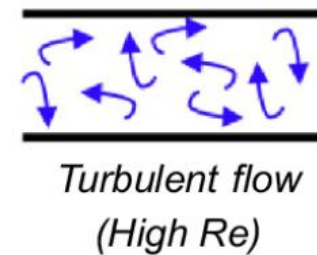
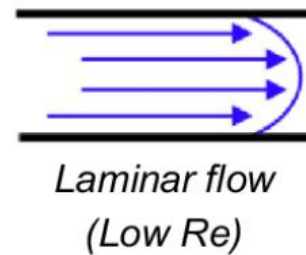
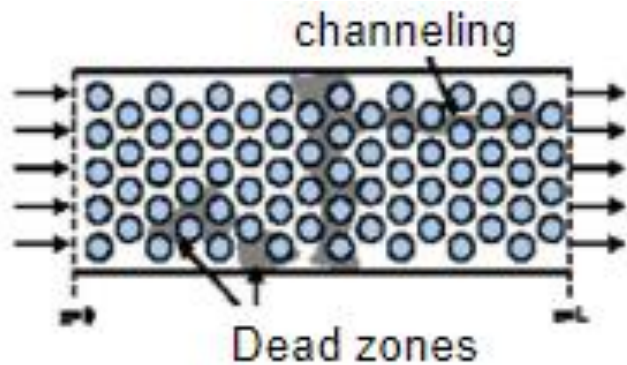
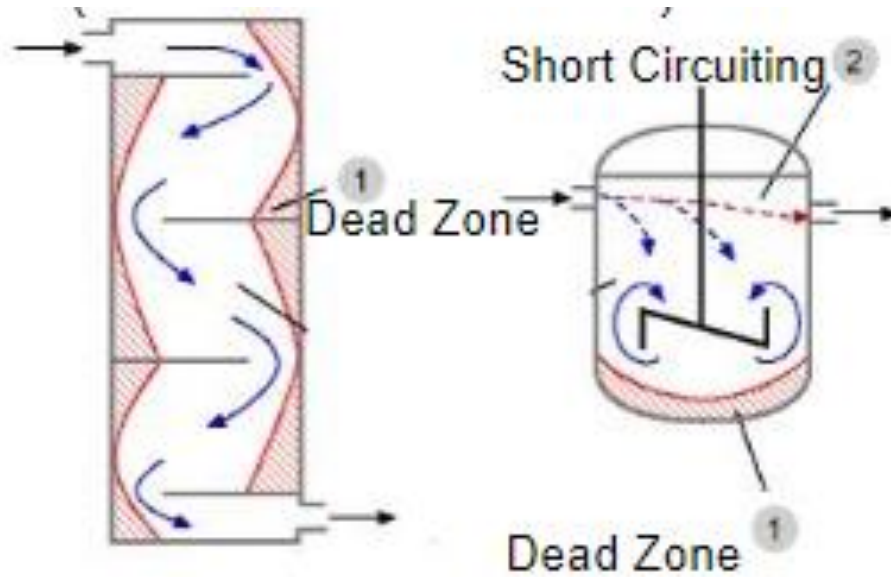
Profa. Dra. Gabriela Carvalho Collazzo
(gabriela.collazzo@ufsm.br)

Introdução

Sistemas reacionais ideais



Sistemas reacionais não-ideais

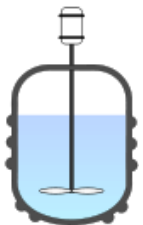


São vários os fatores envolvidos em um sistema reacional real e que influenciam na eficiência (rendimento/conversão) de uma reação química em sistemas não ideais:

- Tempo de residência/ tempo espacial;
- Temperatura – Energia de ativação;
- Agitação – nível de mistura e interação molecular;
- Cinética química – natureza das moléculas envolvidas;
- Catalisadores e outros.

Projeto de reatores:

- Métodos de projetos baseados em escoamento ideal, ou seja, escoamento tubular empistonado ou de mistura perfeita, são relativamente simples, e em grande parte dos casos, o escoamento se aproxima com erro desprezível do comportamento ideal.
- Métodos de projetos que levam em conta os desvios de idealidade são mais complexos. Estes desvios podem ser causados pela formação de canais, aparecimento de regiões estagnantes ou outros fenômenos não considerados nas hipóteses dos modelos ideais.



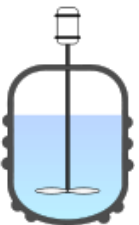
Os problemas de escoamento não-ideal estão intimamente ligados ao aumento de escala, este aumento exige controle de todas as variáveis mais importantes envolvidas no processo.

O fator não controlado no aumento de escala é a grandeza da não idealidade do escoamento, e esta, frequentemente, é muito diferente para unidades pequenas ou grandes. O desconhecimento deste fator pode levar a erros grosseiros no projeto.

No projeto do reator com escoamento não ideal é necessário saber o que esta acontecendo dentro do reator. O ideal é ter um mapa completo da distribuição de velocidade para o fluido, o que é muito difícil de ser obtido.

Para superar estas dificuldades, existe um número mínimo de parâmetros que devem ser determinados a fim de que o projeto seja possível.

Em muitos casos, o conhecimento do tempo em que as moléculas individuais permanecem no reator, isto é, qual a distribuição do tempo de residência do fluido que está escoando, é suficiente para o projeto.



DISTRIBUIÇÃO DE TEMPOS DE RESIDÊNCIA - DTR

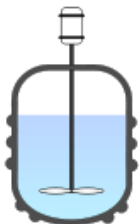
Uma informação importante na prática industrial em reatores é o conhecimento da distribuição de tempos de residência (DTR).

Devemos usar a DTR para caracterizar reatores existentes (ou seja, reais) e depois usá-la para prever conversões de saída e concentrações nesses reatores.

A determinação da DTR permite diagnosticar problemas de escoamento.

Os principais defeitos são:

- Existência de zonas de estagnação do fluido ou zonas mortas;
- Curto circuito extremo e sub-passagem do fluido;
- Existência de canalização, especialmente em operações em contracorrente;
- Dispersão axial / caminhos preferências em reatores tubulares;
- Segregação, resultante das condições de mistura.



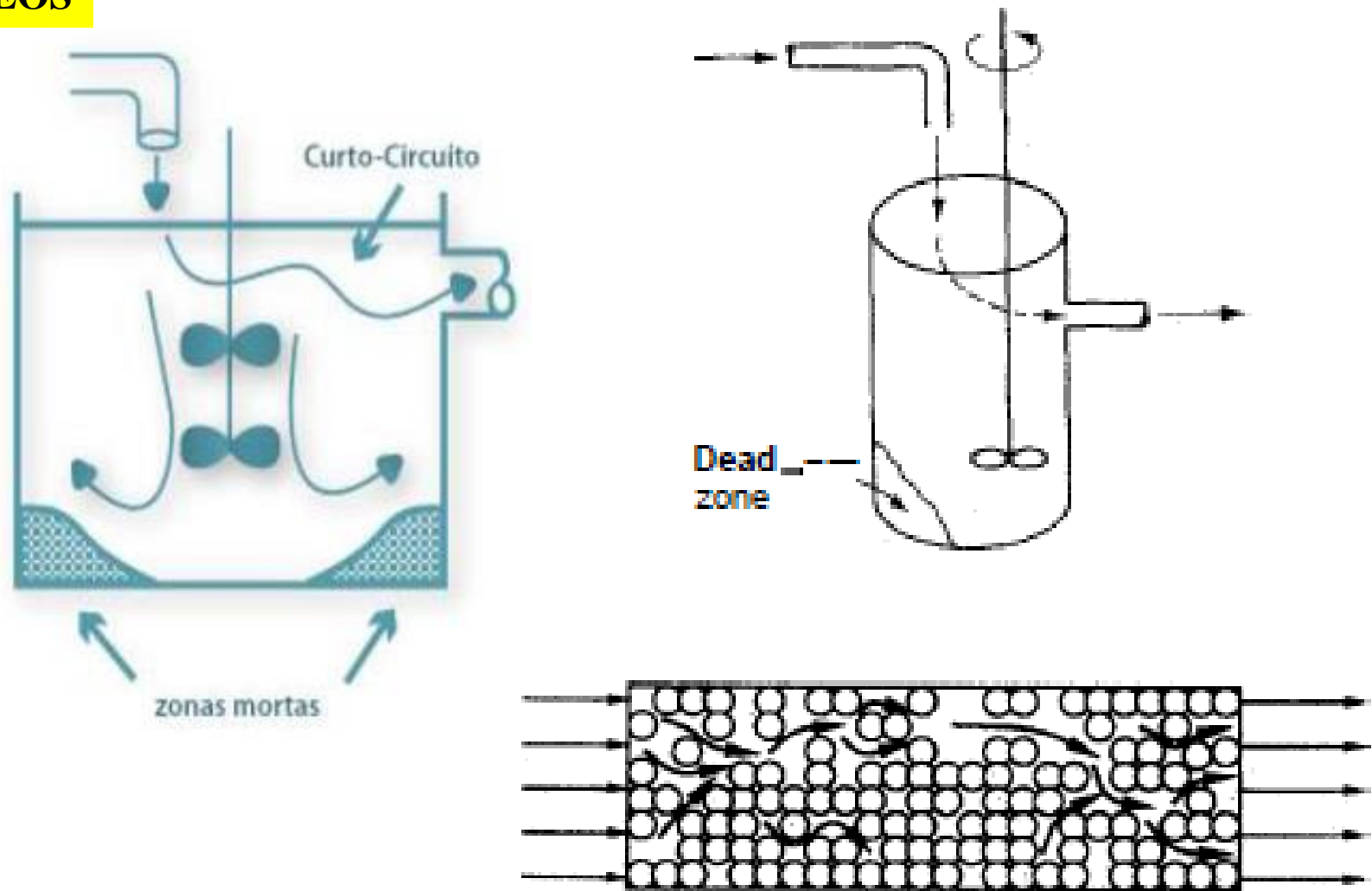


Figura 1. Escoamento não-ideal: curto-circuitos; zonas mortas ou estagnação e caminhos preferências.

Outras técnicas além da DTR são necessárias para a previsão do comportamento para o projeto de um reator real:

modelos matemáticos com parâmetros a serem ajustados a partir de informações experimentais

Esses parâmetros são correlacionados como funções de propriedades do fluido, do escoamento e da configuração do reator.

Esses modelos são por natureza semi-empíricas:

Reator PBR - modelo de dispersão axial

Reatores de escoamento em mistura em série - modelo de tanques em série.

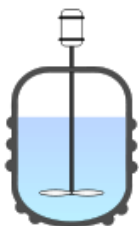
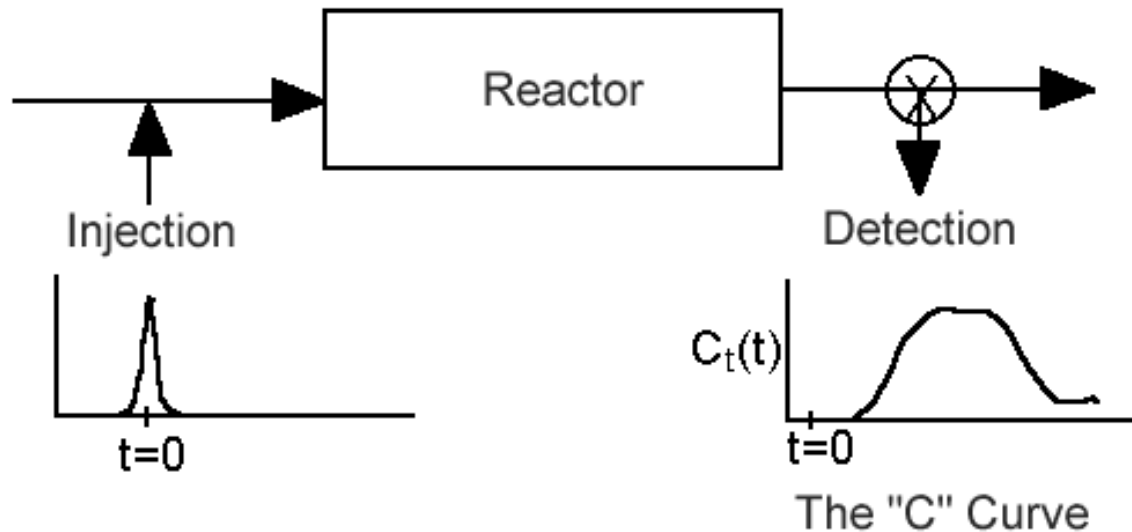
A forma mais simples e direta de se encontrar a distribuição de tempos de residência é utilizar um traçador físico ou não reativo, empregando a técnica de estímulo e resposta.

Vários tipos de experimentos podem ser usados com estímulos do tipo **pulso, degrau, periódico ou randômico**.

Entre estes, o pulso e o degrau são os mais fáceis de serem interpretados.



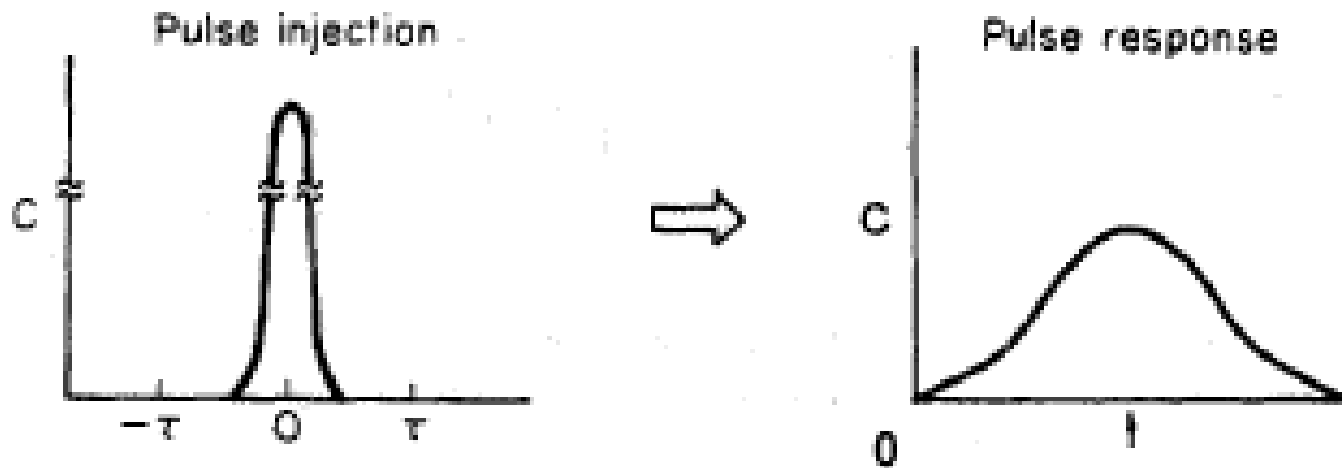
A DTR é uma função da concentração do traçador no fluido na saída do reator com o tempo.



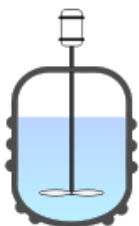
Entrada tipo pulso

Para uma entrada tipo pulso, a quantidade de traçador N_0 é repentinamente injetada de uma só vez na corrente de alimentação do reator, em um tempo tão curto quanto possível.

A concentração de saída é então medida em função do tempo.



Essa é a curva C !



Analisaremos a injeção de um pulso de traçador para um sistema em uma única entrada e uma única saída, na qual somente o escoamento (isto é, sem dispersão) transporta o material do traçador através das fronteiras do sistema.

Primeiro, escolhemos um incremento de tempo Δt suficientemente pequeno tal que a concentração do traçador $C(t)$, entre os tempos t e $t + \Delta t$ seja essencialmente constante. A quantidade de material traçador, ΔN , que sai do reator entre os tempos t e $t + \Delta t$ é:

$$\Delta N = C(t) * v * \Delta t$$

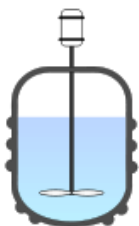
v é a vazão volumétrica do efluente.

Em outras palavras ΔN , é a quantidade de material que permaneceu no reator em um período entre t e $t + \Delta t$.

Se agora dividirmos pela quantidade total de material que foi injetada no reator N_0 , obtemos:

$$\frac{\Delta N}{N_0} = \frac{C(t) * v}{N_0} * \Delta t$$

Que representa a fração de material que tem um tempo de residência entre t e $t + \Delta t$.



Para a injeção em pulso definimos:

$$E(t) = \frac{C(t) * v}{N_0}$$

De forma que:

$$\frac{\Delta N}{N_0} = E(t) * \Delta t$$

A quantidade $E(t)$ é chamada de Função de distribuição de tempos de residência. Ela é a função que descreve de uma maneira quantitativa quanto tempo diferentes elementos de fluido permanecem no reator.

Se a quantidade N_0 não for conhecida diretamente, ela poderá ser obtida a partir das medidas da concentração de saída, somando-se todas as quantidades de material, ΔN , entre os tempos zero e infinito.

Se escrevermos a equação $\Delta N = C(t) * v * \Delta t$ na forma diferencial:

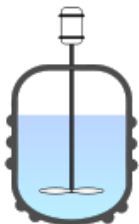
$$dN = v * C(t) * dt$$

Integrando obtemos:

$$N_0 = \int_0^{\infty} v * C(t) * dt$$

A vazão volumétrica é geralmente constante, então podemos definir $E(t)$ como:

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) * dt} \longrightarrow \text{Área sob a curva } C$$



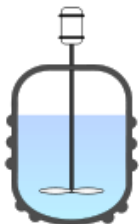
Uma forma alternativa de interpretar a função de distribuição de tempo de residência é obtida através da sua forma integral:

$$\left[\begin{array}{c} \text{fração de material na saída} \\ \text{que permaneceu no reator entre os} \\ \text{tempos } t_1 \text{ e } t_2 \end{array} \right] = \int_{t_1}^{t_2} E(t) * dt$$

Se abemos que a fração correspondente a todo o material que teve um tempo de residência t no reator entre $t = 0$ e $t \rightarrow \infty$ é 1, logo:

$$\int_0^{\infty} E(t) * dt = 1$$

Isso significa que se a técnica foi desenvolvida corretamente, a área da curva E deverá ser igual a 1.

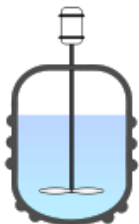


Prática

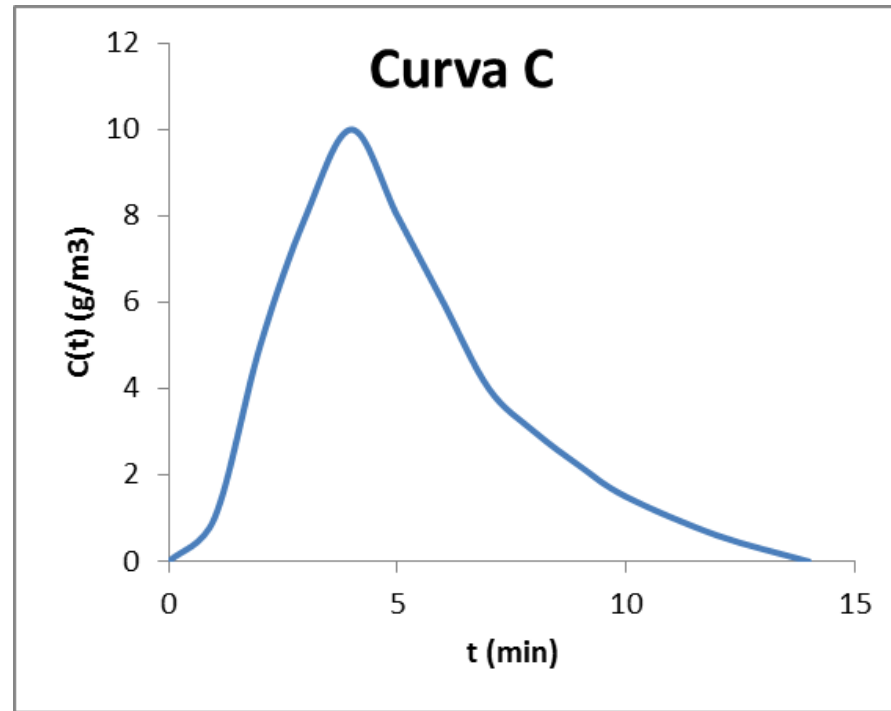
Uma amostra de traçador a 320K foi injetada como um pulso num reator e a concentração do efluente foi medida em função do tempo, resultando em:

| | | | | | | | | | | | | | |
|-----------------------|---|---|---|---|----|---|---|---|-----|-----|-----|-----|----|
| t (min) | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 12 | 14 |
| C (g/m ³) | 0 | 1 | 5 | 8 | 10 | 8 | 6 | 4 | 3.0 | 2.2 | 1.5 | 0.6 | 0 |

Construa as curvas $C(t)$ e $E(t)$.



$C(t)$



Para $E(t)$ em função de t :

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t)dt}$$

Precisamos calcular a integral, área da curva C. Dividindo em duas partes para maior precisão:

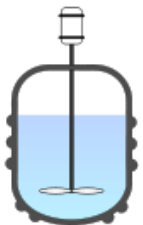
$$\int_0^{\infty} C(t)dt = \int_0^{10} C(t)dt + \int_{10}^{14} C(t)dt$$

**TÉCNICAS DE
INTEGRAÇÃO
APÊNDICE A.4**

$$\int_0^{10} C(t)dt = \frac{1}{3} \left[\begin{array}{l} 1(0) + 4(1) + 2(5) + 4(8) + 2(10) + 4(8) + \\ 2(6) + 4(4) + 2(3) + 4(2.2) + 1(1.5) \end{array} \right] = 47.4 \text{ g.min/m}^3$$

$$\int_{10}^{14} C(t)dt = \frac{2}{3} [1.5 + 4(0.6) + 0] = 2.6 \text{ g.min/m}^3$$

$$\int_0^{\infty} C(t)dt = 50.0 \text{ g.min/m}^3$$

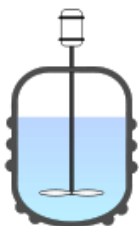
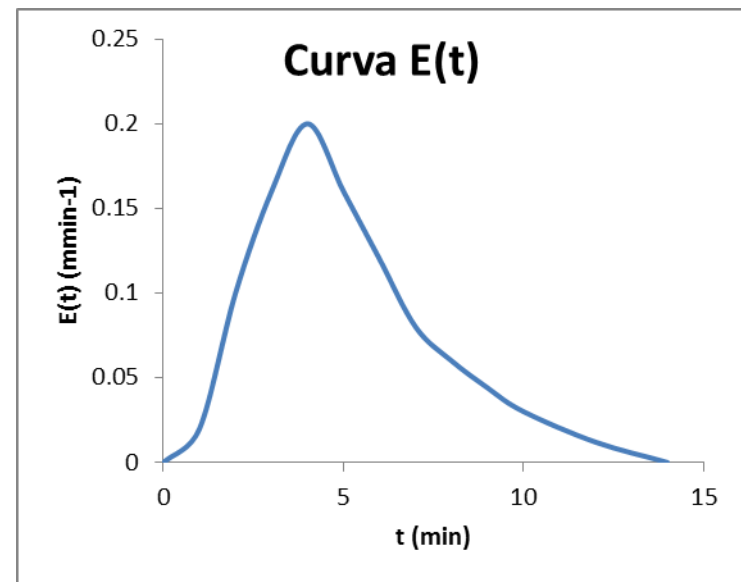


Agora calculamos:

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t)dt} = \frac{C(t)}{50.0 \text{ g.min/m}^3}$$

Então temos:

| t(min) | C (g/m ³) | E(t) |
|--------|-----------------------|-------|
| 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 0.02 |
| 2 | 5 | 0.1 |
| 3 | 8 | 0.16 |
| 4 | 10 | 0.2 |
| 5 | 8 | 0.16 |
| 6 | 6 | 0.12 |
| 7 | 4 | 0.08 |
| 8 | 3 | 0.06 |
| 9 | 2.2 | 0.044 |
| 10 | 1.5 | 0.03 |
| 12 | 0.6 | 0.012 |
| 14 | 0 | 0 |

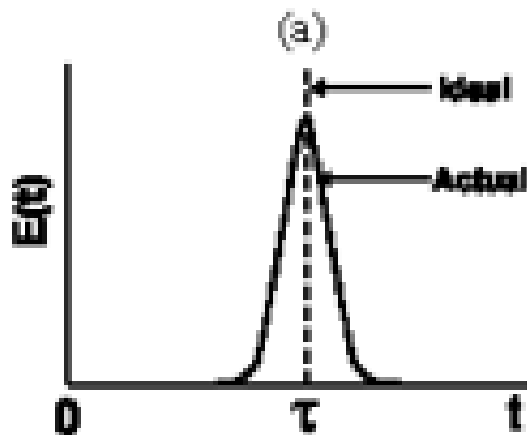


Características da DTR

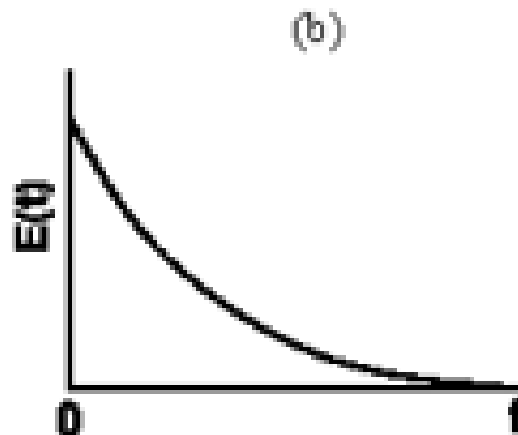
Algumas vezes a $E(t)$ é chamada de *função de distribuição da idade de saída*.

Se considerarmos a “idade” de um átomo como o tempo que ele permaneceu no ambiente da reação, então, $E(t)$ se refere à distribuição de idades da corrente efluente.

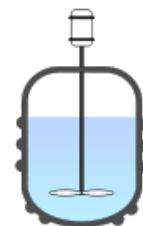
Ela é a mais usada das funções de distribuição relacionadas à análise de reatores, porque ela caracteriza a extensão de tempo que os vários átomos permanecem nas condições de reação.



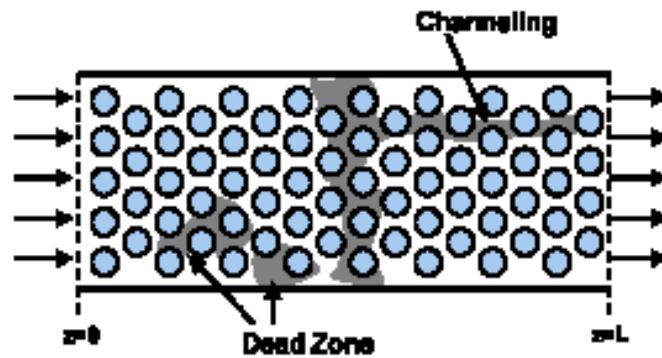
DTR – PFR IDEAL



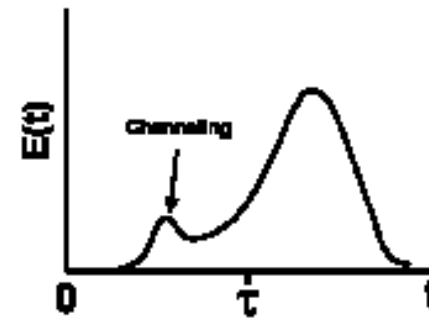
DTR – CSTR IDEAL



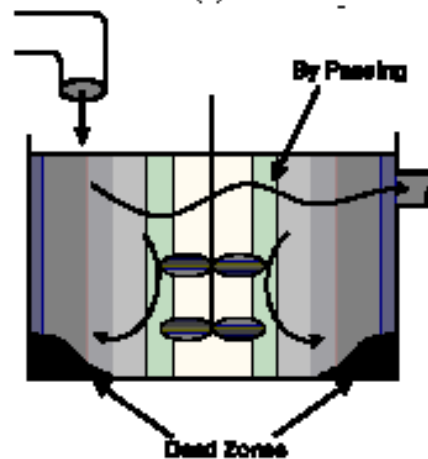
DTR típicas



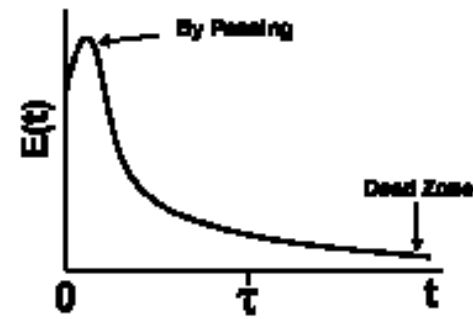
(c)



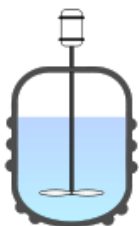
(d)



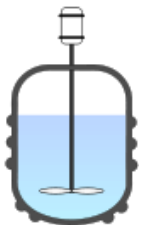
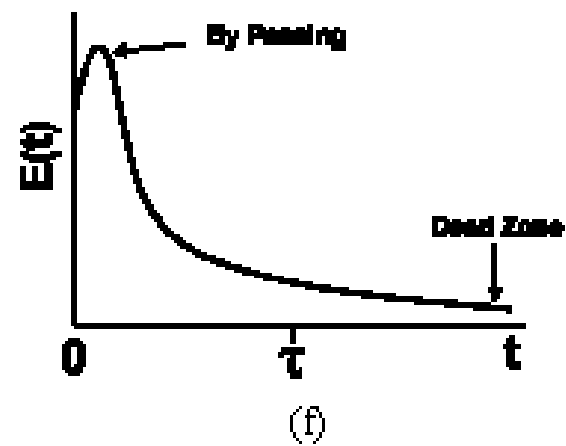
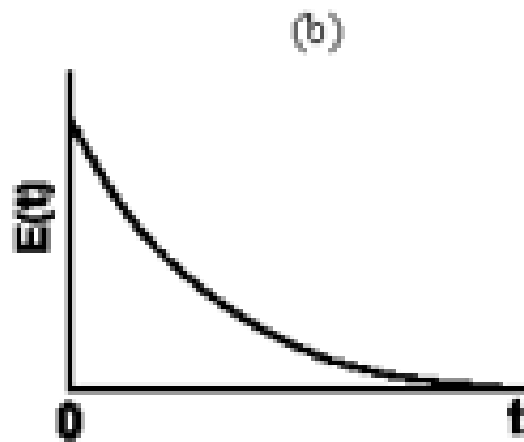
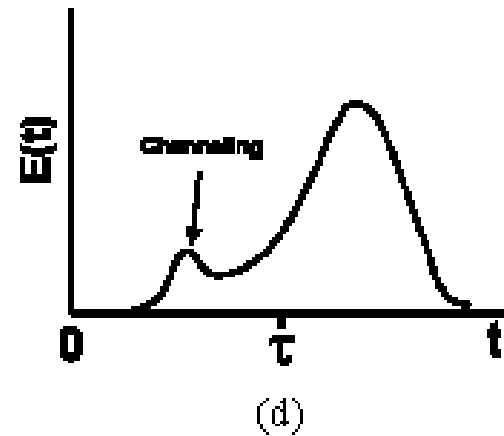
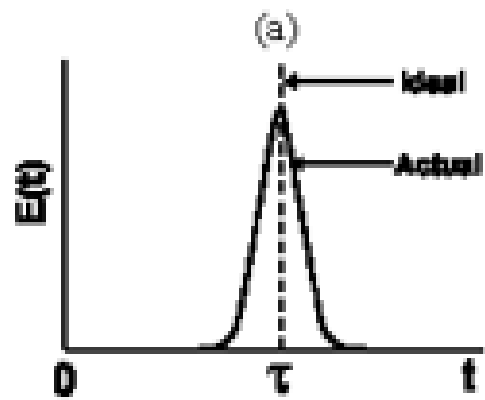
(e)



(f)



DTR típicas



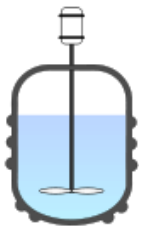
Tempo médio de residência

Para reatores ideais, $\tau = V/v$, tempo espacial ou tempo médio de residência.

Será demonstrado que independente da DTR que existe para um determinado reator, ideal ou não-ideal, este tempo nominal de retenção, τ , é igual ao tempo médio de residência, t_m .

O tempo médio de residência é descrito por:

$$t_m = \int_0^{\infty} t * E(t) dt$$



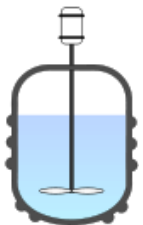
Outros momentos da DTR

É muito comum comparar-se as DTRs usando os seus momentos ao invés de tentar comparar as distribuições em sua totalidade. Três momentos são normalmente utilizados.

- **Primeiro momento** é o tempo médio de residência.
- **Segundo momento** comumente usado é tomado em torno da média e é chamado de variância ou quadrado do desvio padrão.
Definido como:

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - t_m)^2 * E(t) * dt$$

A magnitude deste momento é uma indicação do “espalhamento” da distribuição, quanto maior o valor deste momento, maior o espalhamento da distribuição.



- **Terceiro momento** é também tomado em torno da média e está relacionado com a assimetria da distribuição.

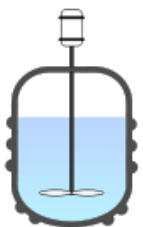
A assimetria é definida como:

$$s^3 = \frac{1}{\sigma^{3/2}} \int_0^{\infty} (t - t_m)^3 * E(t) * dt$$

A magnitude deste momento mede a extensão da assimetria da distribuição em uma direção ou outra em relação à média.

Rigorosamente, para uma completa descrição da distribuição, todos os momentos devem ser determinados.

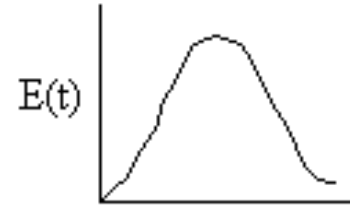
Na prática, estes três são geralmente suficientes para uma caracterização razoável da DTR.



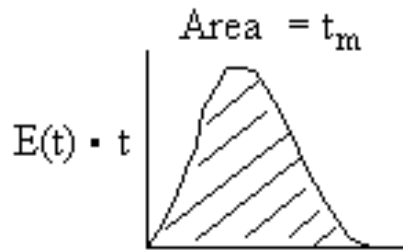
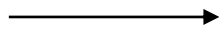
Concluindo...



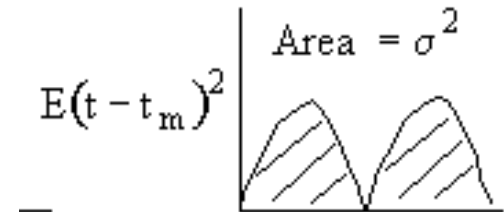
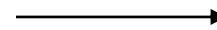
$$\text{Area} = \int_0^{\infty} C(t) dt$$



$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t) dt}$$



$$t_m = \int_0^{\infty} t E(t) dt$$



$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - t_m)^2 E(t) dt$$

CSTR

a. Perfect Operation

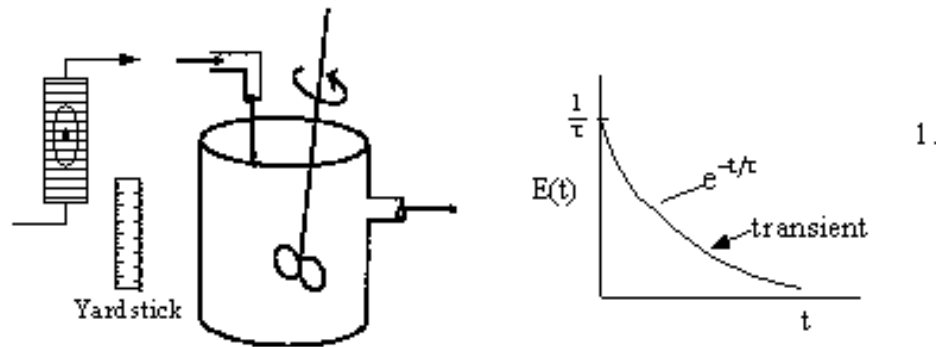


Figure 13-11 Perfect operation of a CSTR.

b. Passing (BP)

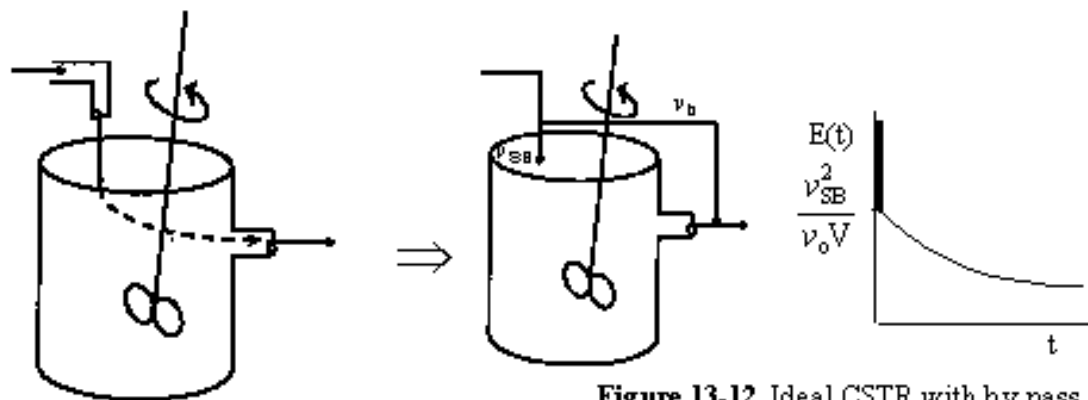
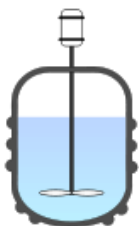


Figure 13-12 Ideal CSTR with by pass



c. Dead Volume

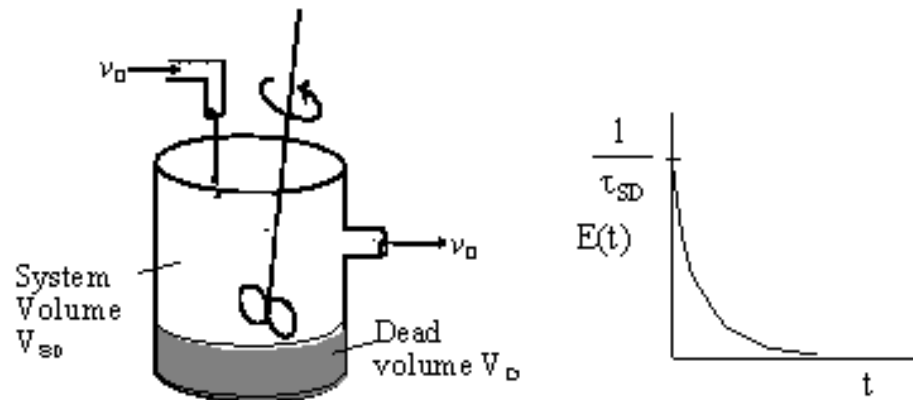


Figure 13-13 Ideal CSTR with dead volume

A summary for ideal CSTR mixing volume is shown in Figure 13-14

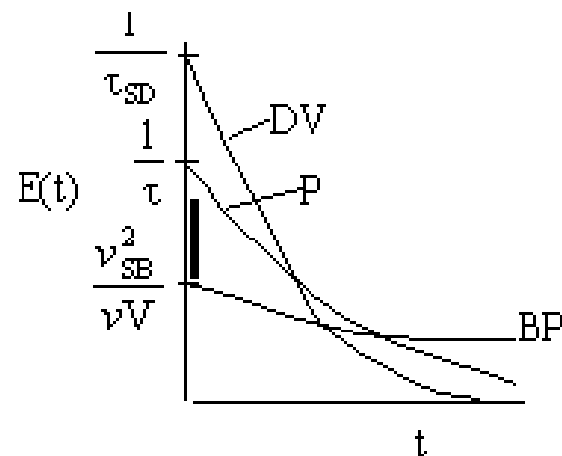
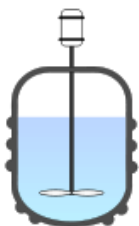
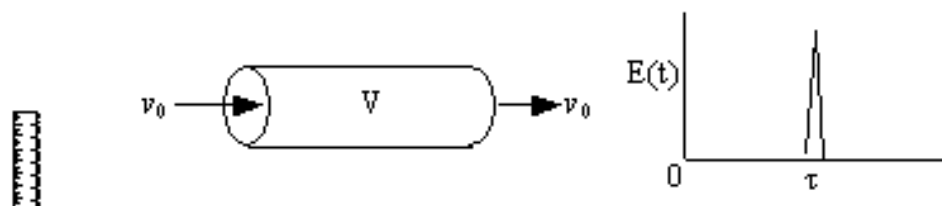


Figure 13-14 Comparison of $E(t)$ and $F(t)$ for CSTR under perfect operation, bypassing, and dead volume. (BP = bypassing, P = perfect, and DV = dead volume).

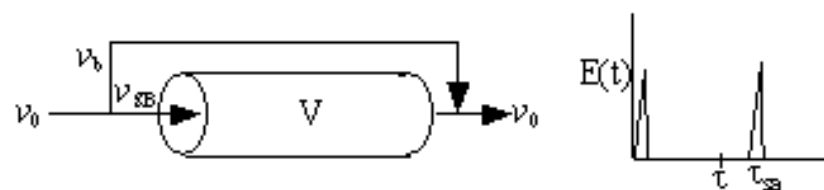


PFR

a. Perfect Operation of PFR (P)

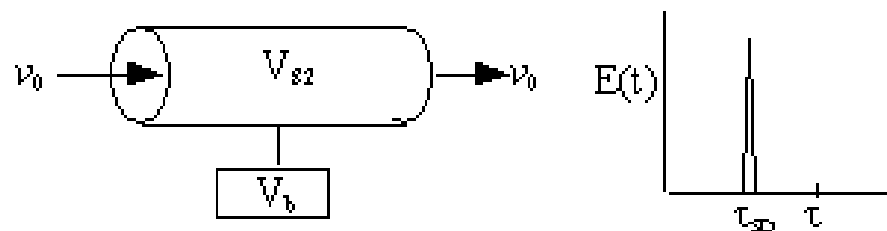


b. PFR with Channeling (Bypassing, BP)



PFR

c. PFR with Dead Volume (DV)



A summary for PRF is shown in Figure 13-18

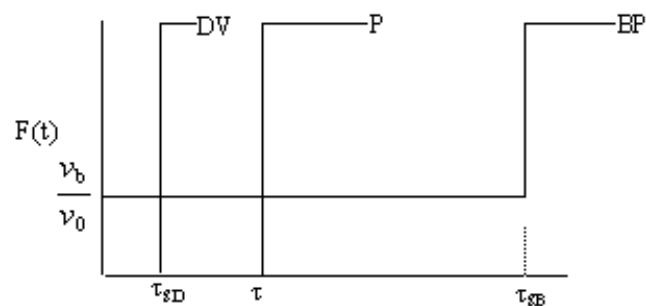


Figure 13-18 Comparison of PFR under perfect operation, bypassing, and dead volume (DV = dead volume, P = perfect PFR, BP = bypassing).



Prática

Calcule o tempo médio de residência e a variância para o reator caracterizado anteriormente. Onde uma amostra de traçador a 320K foi injetada como um pulso num reator e a concentração do efluente foi medida em função do tempo, resultando em:

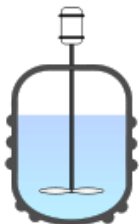
| | | | | | | | | | | | | | |
|-----------------------|---|---|---|---|----|---|---|---|-----|-----|-----|-----|----|
| t (min) | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 12 | 14 |
| C (g/m ³) | 0 | 1 | 5 | 8 | 10 | 8 | 6 | 4 | 3.0 | 2.2 | 1.5 | 0.6 | 0 |

Construir uma tabela com novas colunas, de acordo com as equações.

* $t \cdot E(t)$, $t - t_m$ e $(t - t_m)^2 \cdot E(t)$.

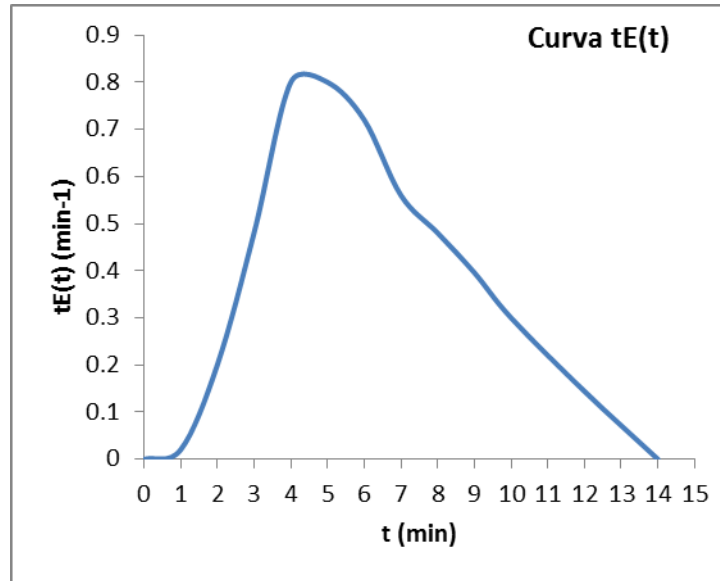
$$t_m = \int_0^{\infty} t \cdot E(t) \cdot dt$$

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - t_m)^2 \cdot E(t) \cdot dt$$



Construir a curva $t E(t)$ em função de t , para determinar t_m .

| $t(\text{min})$ | $C (\text{g/m}^3)$ | $E(t)$ | $tE(t)$ |
|-----------------|--------------------|--------|---------|
| 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 0.02 | 0.02 |
| 2 | 5 | 0.1 | 0.2 |
| 3 | 8 | 0.16 | 0.48 |
| 4 | 10 | 0.2 | 0.8 |
| 5 | 8 | 0.16 | 0.8 |
| 6 | 6 | 0.12 | 0.72 |
| 7 | 4 | 0.08 | 0.56 |
| 8 | 3 | 0.06 | 0.48 |
| 9 | 2.2 | 0.044 | 0.396 |
| 10 | 1.5 | 0.03 | 0.3 |
| 12 | 0.6 | 0.012 | 0.144 |
| 14 | 0 | 0 | 0 |



$$t_m = \int_0^{\infty} t E(t) dt$$

Área da
curva

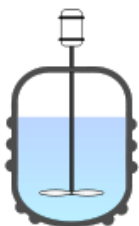
Por integração numérica

$$\int_0^{\infty} tE(t)dt = \int_0^{10} tE(t)dt + \int_{10}^{14} tE(t)dt$$

$$\int_0^{\infty} tE(t)dt = \frac{1}{8} \left[1(0) + 4(0.02) + 2(0.2) + 4(0.48) + 2(0.8) + 4(0.8) + 2(0.72) + 4(0.56) + 2(0.48) + 4(0.40) + 1(0.3) \right] + \frac{2}{3} [0.3 + 4(0.14) + 0]$$

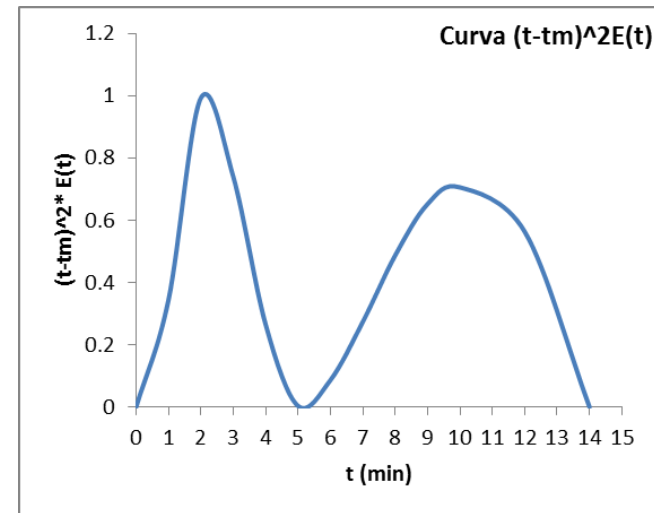
$$= 4.58 + 0.573 = 5.15 \text{ min}$$

$$t_m = 5.15 \text{ min}$$



Calculando a variância, área sob a curva $(t-t_m)^2 E(t)$

| t(min) | C (g/m3) | E(t) | tE(t) | t-t _m | (t-t _m) ² E(t) |
|--------|----------|-------|-------|------------------|---------------------------------------|
| 0 | 0 | 0 | 0 | -5.15 | 0 |
| 1 | 1 | 0.02 | 0.02 | -4.15 | 0.34445 |
| 2 | 5 | 0.1 | 0.2 | -3.15 | 0.99225 |
| 3 | 8 | 0.16 | 0.48 | -2.15 | 0.7396 |
| 4 | 10 | 0.2 | 0.8 | -1.15 | 0.2645 |
| 5 | 8 | 0.16 | 0.8 | -0.15 | 0.0036 |
| 6 | 6 | 0.12 | 0.72 | 0.85 | 0.0867 |
| 7 | 4 | 0.08 | 0.56 | 1.85 | 0.2738 |
| 8 | 3 | 0.06 | 0.48 | 2.85 | 0.48735 |
| 9 | 2.2 | 0.044 | 0.396 | 3.85 | 0.65219 |
| 10 | 1.5 | 0.03 | 0.3 | 4.85 | 0.705675 |
| 12 | 0.6 | 0.012 | 0.144 | 6.85 | 0.56307 |
| 14 | 0 | 0 | 0 | 8.85 | 0 |



$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - t_m)^2 E(t) dt$$

Área da
curva

Por integração numérica

$$\int_0^{\infty} (t - t_m)^2 E(t) dt = \int_0^5 (t - t_m)^2 E(t) dt + \int_5^{14} (t - t_m)^2 E(t) dt$$

$$\int_0^{\infty} tE(t) dt$$

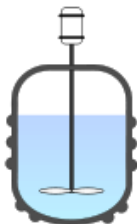
$$= \frac{3}{8} * 0.83 [0 + 3(0.34) + 3(0.99) + 2(0.73) + 3(0.26) + 0.0036] + \frac{3}{3}$$

$$* 1.5 [0.0036 + 3(0.27) + 3(0.49) + 2(0.65) + 3(0.70) + 0] = 1.94 + 8.52 = 10.46 \text{ min}^2$$

$$\sigma^2 = 10.46 \text{ min}^2$$

$$\sigma = 3.23 \text{ min}$$

Desvio do t_m

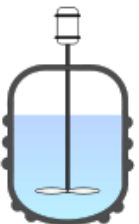


Modelando o reator com a DTR

Existem muitas situações nas quais o fluido no reator não está nem bem misturado nem se aproxima do escoamento uniforme. Como podemos utilizar a DTR para prever a conversão em um reator real?

Utilizamos modelos.

1. Zero parâmetros ajustáveis
 - a. Modelo segregado
 - b. Modelo de antecipação de mistura
2. Um parâmetro ajustável
 - a. Modelos de tanques em série
 - b. Modelos de dispersão
3. Dois parâmetros ajustáveis: reator real modelado como combinações de reatores ideais.

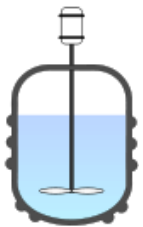


Analizando....

A DTR nos diz por quanto tempo os vários elementos de fluido permaneceram no reator (isto é, informa sobre a intensidade da mistura global no reator), mas não nos diz nada a respeito da troca de material entre os elementos do fluido (isto é, o grau de mistura no nível molecular).

A mistura dos reagentes é um dos principais fatores responsáveis pelo comportamento de reatores químicos.

Para reações de primeira ordem o conhecimento da DTR é suficiente para prever a conversão já para as demais precisamos da informação sobre a mistura, através de um modelo de mistura.



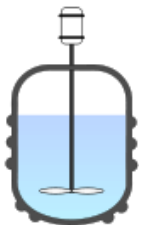
Modelo segregado

Tomando como exemplo um reator CSTR ideal de mistura perfeita, todos os elementos de fluido se misturam.....agora se os elementos de fluido de diferentes idades não se misturarem, esses elementos se mantêm segregados, ou seja, separados uns dos outros e o fluido é completamente segregado.

Então em um modelo de mistura segregado visualizamos o escoamento através do reator como sendo constituído por uma série contínua de glóbulos, e tratamos cada glóbulo como se operasse em batelada.

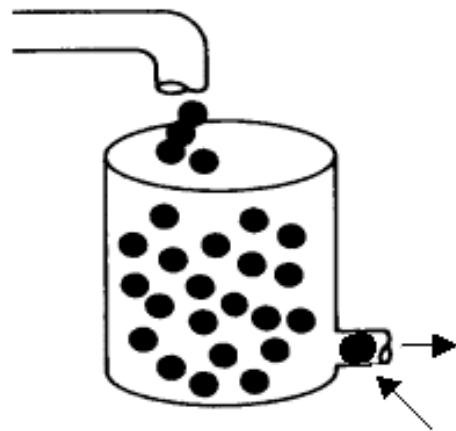
**** Equacionamento em:

<http://www.umich.edu/~elements/5e/17chap/summary.html>



Então esse modelo considera o reator real como uma série de pequenos reatores de lote, cada um passando um tempo diferente no reator.

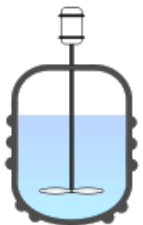
Todas as moléculas que passam o mesmo comprimento de tempo no reator (isto é, que são da mesma idade) permanecem juntas no mesmo glóbulo (isto é, reator em lote). A mistura dos diferentes grupos etários ocorre no último momento possível na saída do reator.



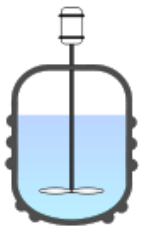
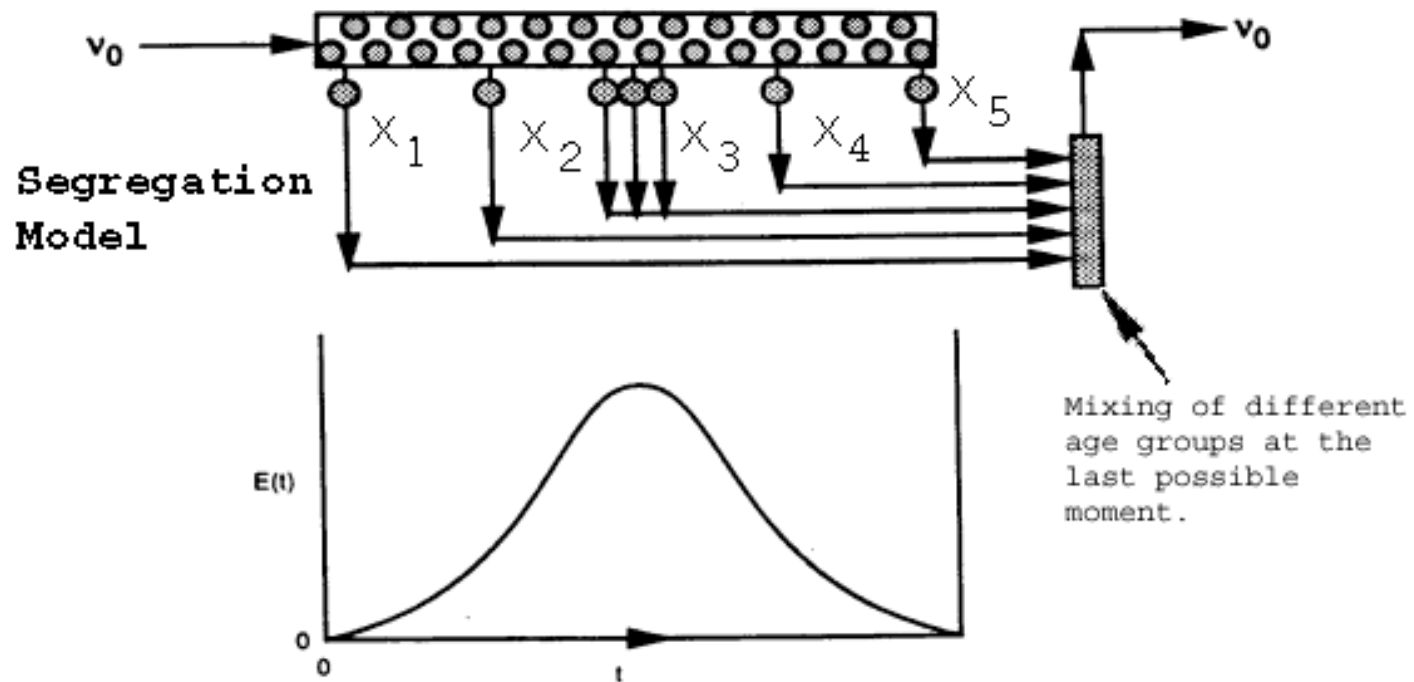
Mixing of the globules of different ages occurs here.

Little batch reactors (globules) inside a CSTR.

$$X_3 > X_2 > X_1$$

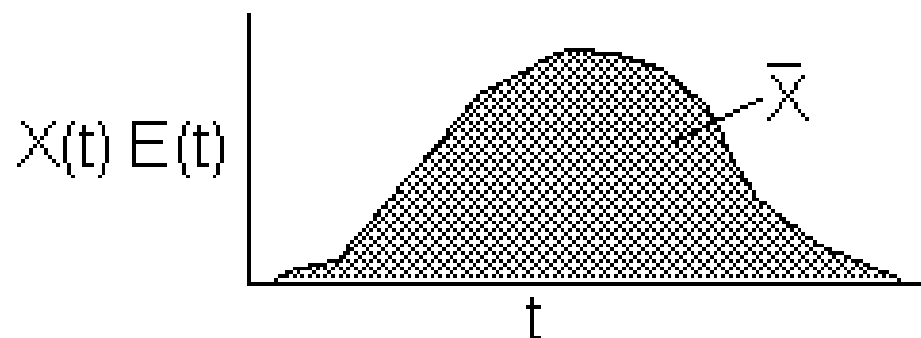


A mistura ocorre no último momento possível. Cada pequeno reator em lote (glóbulo) que saia do reator real em diferentes momentos terá uma conversão diferente. ($X_1, X_2, X_3 \dots$)



Conversão média

$$\bar{X} = \int_0^{\infty} X(t) E(t) dt$$

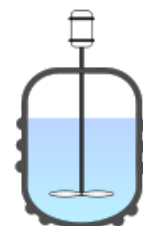
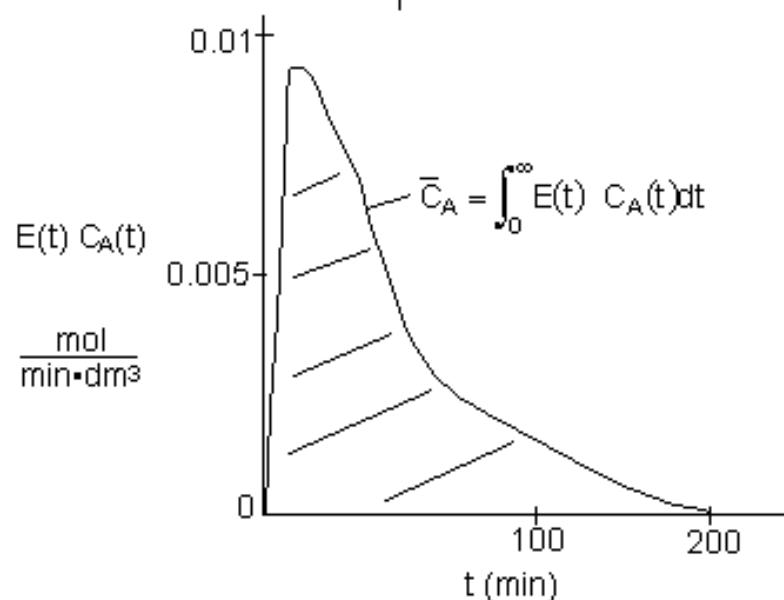


Concentração média

$$\bar{C}_A(t) = \int_0^{\infty} C_A(t) E(t) dt$$

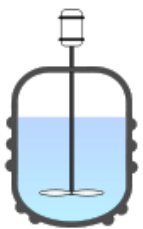
Use Spreadsheets

| t | C(t) | E(t) | tE(t) | $(\tau - t_m)^2 E(t)$ | X(t)E(t) | C _A (t) | E(t) | E(t)C _A (t) |
|---|------|------|-------|-----------------------|----------|--------------------|------|------------------------|
| 0 | 0.0 | : | : | : | : | : | : | : |
| 1 | 0.1 | : | : | : | : | : | : | : |
| 2 | : | : | : | : | : | : | : | : |
| 3 | : | : | : | : | : | : | : | : |
| — | — | — | — | — | — | — | — | — |



-

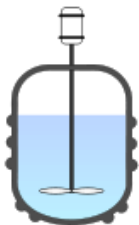
| t | $C(t)$ | $E(t)$ | $tE(t)$ | $(\tau - t_m)^2 E(t)$ | $X(t)E(t)$ | $C_A(t)$ | $E(t)$ | $E(t)C_A(t)$ |
|-----|----------|----------|----------|-----------------------|------------|----------|----------|--------------|
| 0 | 0.0 | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |
| 1 | 0.1 | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |
| 2 | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |
| 3 | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots | \vdots |
| — | — | — | — | — | — | — | — | — |



Prática – Cálculo da conversão média em um reator real

Calcule a conversão média no reator que caracterizamos a DTR, conforme tabela, para uma reação de primeira ordem, em fase líquida, irreversível, $A \rightarrow \text{produtos}$, em um fluido completamente segregado. A velocidade específica de reação é 0.1 min^{-1} a 320 K.

| t(min) | C (mol/m ³) | E(t) |
|--------|-------------------------|-------|
| 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 0.02 |
| 2 | 5 | 0.1 |
| 3 | 8 | 0.16 |
| 4 | 10 | 0.2 |
| 5 | 8 | 0.16 |
| 6 | 6 | 0.12 |
| 7 | 4 | 0.08 |
| 8 | 3 | 0.06 |
| 9 | 2.2 | 0.044 |
| 10 | 1.5 | 0.03 |
| 12 | 0.6 | 0.012 |
| 14 | 0 | 0 |



Quem é $\bar{X}(t)$?

$$\text{DTR} + \text{MODELO} + \text{DADOS CINÉTICOS} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{CONVERSÃO DE SAÍDA e} \\ \text{CONCENTRAÇÕES DE SAÍDA} \end{array} \right\}$$

Para determinar a conversão média na corrente efluente, precisamos calcular a média das conversões dos vários glóbulos na corrente de saída, logo:

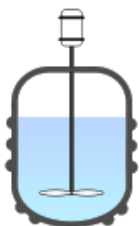
$$\left[\begin{array}{c} \text{Conversão} \\ \text{média daqueles} \\ \text{glóbulos que} \\ \text{permanecem} \\ \text{entret + dt no} \\ \text{reator} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Conversão alcançada} \\ \text{em um glóbulo após} \\ \text{permanecer um} \\ \text{tempo } t \text{ no reator} \end{array} \right] \times \left[\begin{array}{c} \text{Fração de} \\ \text{glóbulos que} \\ \text{permanecem} \\ \text{entret + dt no} \\ \text{reator} \end{array} \right]$$

$$d\bar{X} = X(t) \times E(t)dt$$

$$d\bar{X} = X(t) \times E(t)dt$$

$$\frac{d\bar{X}}{dt} = X(t)E(t)$$

$$\bar{X} = \int_0^{\infty} X(t)E(t)dt$$



Quem é $X(t)$?

Modelo de Segregação para uma Reação de Primeira Ordem: $A \rightarrow \text{produtos}$

Tratamos os glóbulos, que permanecem diferentes períodos de tempo no reator real, como pequenos reatores. Para um reator em batelada, temos:

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

Para volume constante e com $N_A = N_{A0}(1 - X)$,

$$N_{A0} \frac{dX}{dt} = -r_A V = k C_A V = k N_A = k N_{A0}(1 - X)$$

$$\frac{dX}{dt} = k(1 - X)$$

Resolvendo para $X(t)$, temos para qualquer glóbulo que permanece um tempo t no reator real

$$X(t) = 1 - e^{-kt}$$



Então se $k = 0.1 \text{ min}^{-1}$ e o tempo da reação é 14 min:

$$X(t) = 1 - e^{-kt}$$

$$X = 1 - \exp^{(-0.1 \cdot 14)} = 0.75$$

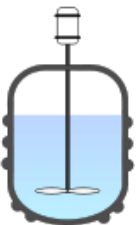
É possível calcular a $X(t)$ para cada tempo da tabela, a conversão final irá resultar em 0.75.

Logo a conversão média será:

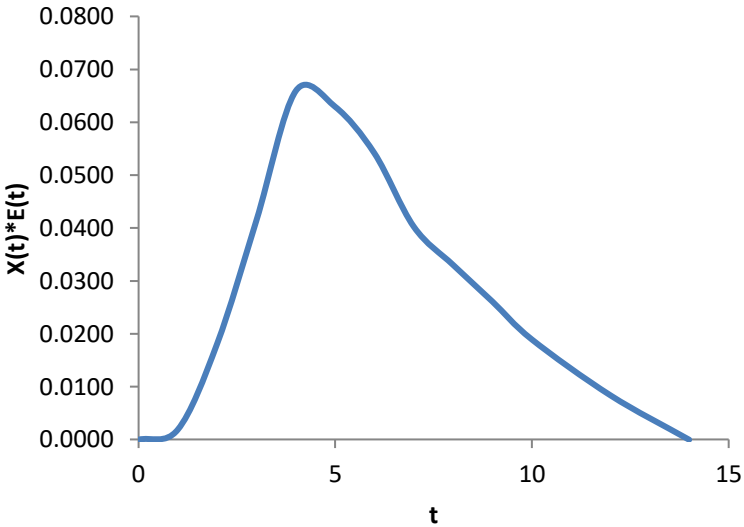
$$\bar{X} = \int_0^{\infty} X(t) E(t) dt$$

A área da curva:

$$\int_0^{\infty} X(t) E(t) dt$$



| t(min) | C (g/m3) | E(t) | X(t) | X(t).E(t) | X(t).E(t).delta_t |
|--------|----------|-------|---------|-----------|-------------------|
| 0 | 0 | 0 | 0.00 | 0.0000 | 0.0000 |
| 1 | 1 | 0.02 | 0.10 | 0.0019 | 0.0019 |
| 2 | 5 | 0.1 | 0.18 | 0.0181 | 0.0181 |
| 3 | 8 | 0.16 | 0.26 | 0.0415 | 0.0415 |
| 4 | 10 | 0.2 | 0.33 | 0.0659 | 0.0659 |
| 5 | 8 | 0.16 | 0.39 | 0.0630 | 0.0630 |
| 6 | 6 | 0.12 | 0.45 | 0.0541 | 0.0541 |
| 7 | 4 | 0.08 | 0.50 | 0.0403 | 0.0403 |
| 8 | 3 | 0.06 | 0.55 | 0.0330 | 0.0330 |
| 9 | 2.2 | 0.044 | 0.59 | 0.0261 | 0.0261 |
| 10 | 1.5 | 0.03 | 0.63 | 0.0190 | 0.0379 |
| 12 | 0.6 | 0.012 | 0.70 | 0.0084 | 0.0168 |
| 14 | 0 | 0 | 0.75 | 0.0000 | 0.0000 |
| | | | X_medio | | 0.399 |



Prática – Desafio

Conhecendo a DTR neste reator, calcule a conversão ideal e a conversão média para a reação de saponificação do acetato de etila desenvolvida até 14 min. Esta reação é considerada pseudo primeira ordem com k (25°C) = 20.55 min⁻¹ e C_{a0} = 0.1 mol/L.

| t(min) | C (g/m ³) | E(t) |
|--------|-----------------------|-------|
| 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 0.02 |
| 2 | 5 | 0.1 |
| 3 | 8 | 0.16 |
| 4 | 10 | 0.2 |
| 5 | 8 | 0.16 |
| 6 | 6 | 0.12 |
| 7 | 4 | 0.08 |
| 8 | 3 | 0.06 |
| 9 | 2.2 | 0.044 |
| 10 | 1.5 | 0.03 |
| 12 | 0.6 | 0.012 |
| 14 | 0 | 0 |

