Universidade Federal de Santa Maria
Departamento de Engenharia Química
DEQ 1032 - Engenharia das Reações Químicas Avançadas

Unidade III: Projeto de reatores não-isotérmicos
Balanço de energia-Reator batelada
Com troca térmica

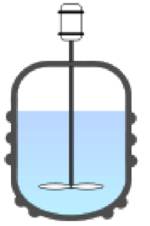
Profa. Gabriela Carvalho Collazzo
(gabrielacollazzo@gmail.com)

Balanço de energia para reatores batelada

Um reator batelada é geralmente bem misturado, por isso podemos desprezar as variações de temperatura e concentração das espécies através do volume do reator. O balanço de energia neste reator é obtido tomando-se a vazão de alimentação $F_{i0} = 0$ na equação do balanço de energia:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}S - \overbrace{\sum F_{i0}(H_i - H_{i0})}^{0} + (-\Delta H_{Rx}) \cdot (-r_A \cdot V)}{\sum N_i \cdot Cp_i}$$

$$\boxed{\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}S + [-\Delta H_{Rx}(T)] \cdot (-r_A \cdot V)}{\sum N_i . Cp_i}}$$



Em função da conversão, $N_i = N_{A0} \cdot (\theta_i + \nu_i \cdot X)$,

Logo balanço se torna:

$$\boxed{\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}S + [-\Delta H_{Rx}(T)](-r_A \cdot V)}{N_{A0}(\sum \theta_i \cdot Cp_i + \Delta Cp \cdot X)}}$$

Esta equação acoplada ao balanço molar:

$$\boxed{N_{A0} \cdot \frac{dX}{dt} = -r_A \cdot V}$$

E também a lei de velocidade, são resolvidas simultaneamente por solução numérica.

Operação com troca térmica um reator batelada

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}S + [-\Delta H_{Rx}(T)] \cdot (-r_A.V)}{\sum N_i \cdot Cp_i}$$

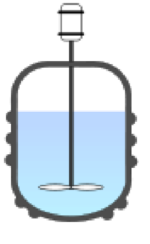
$$\sum N_i C_{P_i} \cong \sum N_{i0} C_{P_i} = N_{A0} \overbrace{\Sigma \Theta_i C_{P_i}}^{C_{P_s}} = N_{A0} C_{P_s}$$

Cp da solução

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}S + [-\Delta H_{Rx}(T)] \cdot (-r_A \cdot V)}{N_{A0} \cdot (\sum \theta_i \cdot Cp_i + \Delta Cp \cdot X)}$$

Calor específico médios ou constantes:

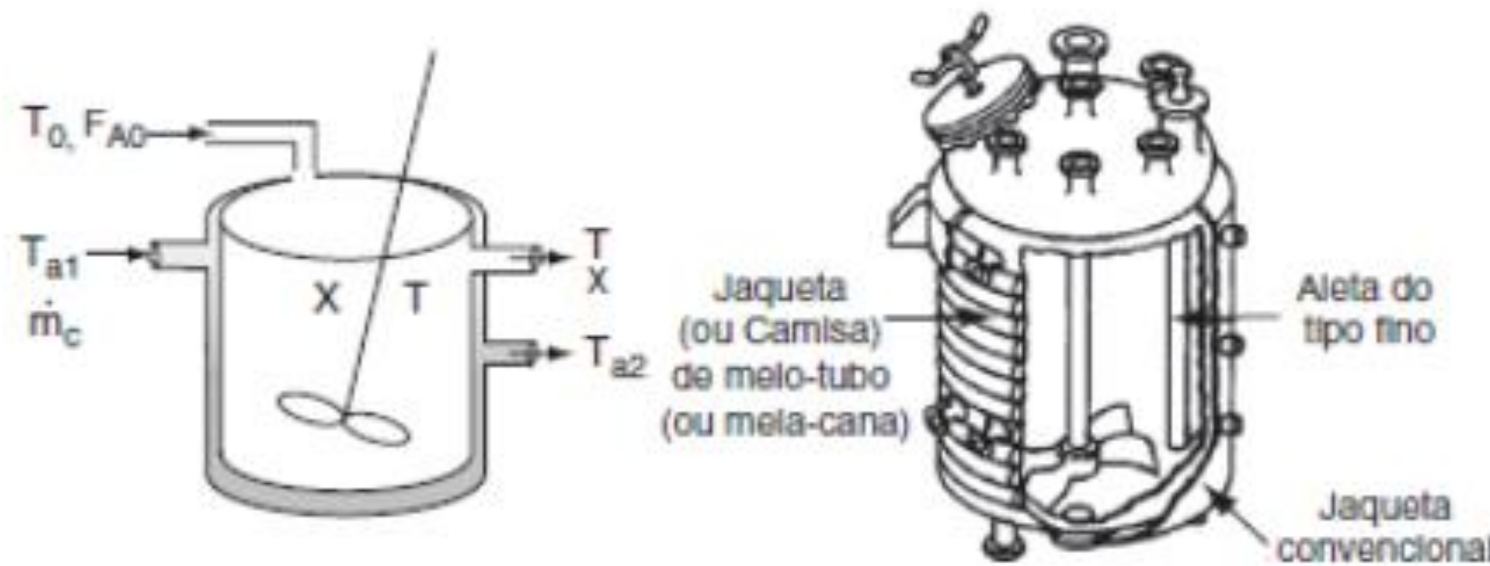
$$\Delta H_{RX}(T) = \Delta H°_{RX}(T_R) + \Delta\hat{C}p(T - T_R)$$



O termo de troca térmica $\dot{Q}$

O fluido de troca térmica entra no trocador a uma vazão mássica *m***c** (por exemplo, kg/s) a uma temperatura T_{a1} e sai a uma temperatura T_{a2}. A taxa de transferência de calor *do*t rocador *para* o fluido reacional a uma temperatura *T* é:

$$\dot{Q} = \frac{UA(T_{a1} - T_{a2})}{\ln[(T - T_{a1})/(T - T_{a2})]}$$



Balanço de energia no fluido do trocador de calor

$$\begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{energia que} \\ \textit{entra} \text{ associada} \\ \text{ao escoamento} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{energia que} \\ \textit{sai} \text{ associada} \\ \text{ao escoamento} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Taxa de} \\ \text{transferência de} \\ \text{calor } \textit{do} \text{ trocador} \\ \textit{para} \text{ o reator} \end{bmatrix} = 0 \quad (12\text{-}14)$$

$$\dot{m}_c C_{P_c}(T_{a1} - T_R) - \dot{m}_c C_{P_c}(T_{a2} - T_R) - \frac{UA(T_{a1} - T_{a2})}{\ln[(T - T_{a1})/(T - T_{a2})]} = 0 \quad (12\text{-}15)$$

em que C_{pC} é a capacidade térmica do fluido do trocador de calor e T_R é a temperatura de referência. Simplificando, temos

$$\dot{Q} = \dot{m}_c C_{P_c}(T_{a1} - T_{a2}) = \frac{UA(T_{a1} - T_{a2})}{\ln[(T - T_{a1})/(T - T_{a2})]} \qquad (12\text{-}16)$$

Resolvendo a Equação (12-16) para a temperatura de saída do fluido do trocador de calor, obtemos

$$T_{a2} = T - (T - T_{a1}) \exp\left(\frac{-UA}{\dot{m}_c C_{P_c}}\right)$$

Da Equação (12-16)

$$\dot{Q} = \dot{m}_c C_{P_c} (T_{a1} - T_{a2}) \tag{12-18}$$

Substituindo T_{a2} na Equação (12-18), resulta

$$\boxed{\dot{Q} = \dot{m}_c C_{P_c} \left\{ (T_{a1} - T)\left[1 - \exp\left(\frac{-UA}{\dot{m}_c C_{P_c}}\right)\right]\right\}} \tag{12-19}$$

Para grandes valores de vazão do fluido térmico, o termo exponencial será pequeno e pode então ser expandido em uma série de Taylor ($e^{-x} = 1 - x + \ldots$) em que apenas o primeiro e o segundo termos são considerados (os demais termos podem ser desprezados), de maneira a se obter

$$\dot{Q} = \dot{m}_c C_{P_c} (T_{a1} - T)\left[1 - \left(1 - \frac{UA}{\dot{m}_c C_{P_c}}\right)\right]$$

Então,

Válido apenas para grandes valores de vazão do fluido de troca térmica!!

em que $T_{a1} \cong T_{a2} = T_a$

$$\boxed{\dot{Q} = UA(T_a - T)}$$

→ Esta será a equação que representa a troca térmica em um tanque agitado

ATENÇÃO:

$$\boxed{\dot{Q} = UA(T_a - T)}$$

Assumimos que Ta possui uma distribuição espacial uniforme ao longo do trocador

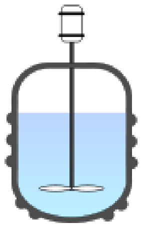
Esta hipótese é válida se o sistema for um reator tubular com a superfície externa do tubo exposta a atmosfera ou se o sistema for um CSTR ou Batelada nos quais a vazão do fluido de troca térmica através do reator for tão rápida que a T de entrada do fluido e a T de saída do fluido poderia ser considerada a mesma.

Balanço de energia para reatores batelada em termos de unidades

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\dot{Q} - \dot{W}S + [-\Delta H_{Rx}(T)](-r_A.V)}{\sum N_i.Cp_i}$$

$$\frac{Temperatura}{tempo} = \frac{{}^{Joule}/_{tempo} - {}^{Joule}/_{tempo} + \left[{}^{Joule}/_{mol}\right]\left(\frac{mol}{tempo \cdot volume} \cdot volume\right)}{mol \cdot {}^{Joule}/_{mol \cdot Temperatura}}$$

$$\frac{Temperatura}{tempo} = \frac{Temperatura}{tempo}$$



Avaliando o tipo de reação

Reação exotérmica: aqui vamos desconsiderar o trabalho de eixo

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Ua \cdot (Ta - T) + [-\Delta H_{Rx}(T)] \cdot (-r_A \cdot V)}{\sum N_i . Cp_i}$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\overbrace{[-\Delta H_{Rx}(T)] \cdot (-r_A \cdot V)}^{\text{Calor gerado}} \overbrace{- Ua \cdot (T - Ta)}^{\text{Calor removido}}}{\sum N_i \cdot Cp_i}$$

Reação endotérmica: aqui vamos desconsiderar o trabalho de eixo

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\overbrace{Ua \cdot (Ta - T)}^{\text{Calor fornecido}} \overbrace{+ [-\Delta H_{Rx}(T)] \cdot (-r_A \cdot V)}^{\text{Calor absorvido}}}{\sum N_i . Cp_i}$$