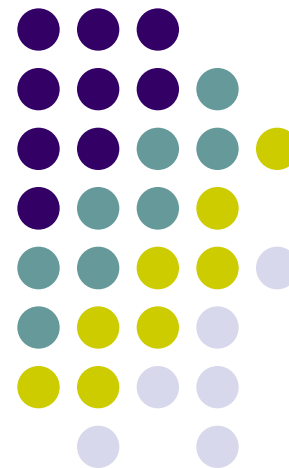




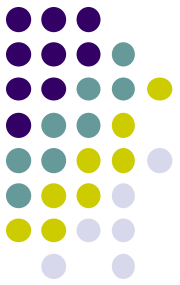
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE LORENA - EEL

BALANÇO DE MASSA E ENERGIA

Prof. Geronimo

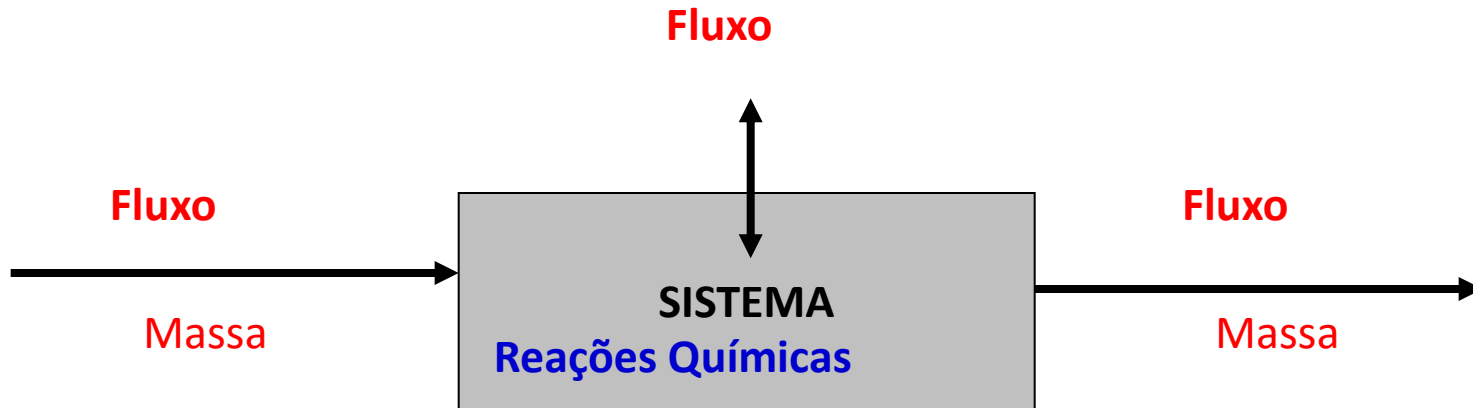


BALANÇO MATERIAL EM PROCESSOS COM REAÇÃO QUÍMICA



Mecanismos responsáveis pela variação da massa no interior dos sistemas:

Fluxos e **Reações Químicas**.

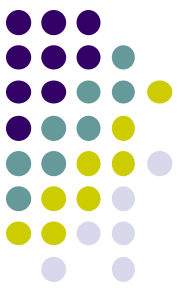


Fluxos ou Correntes: responsáveis pela entrada e saída de matéria (massa) no sistema.

Reações Químicas: responsáveis pela geração e consumo de espécies químicas.



Principal diferença em relação aos balanços vistos até aqui!!



❑ **Processos em Batelada:** cozimento em panela de pressão; esterilização de materiais (autoclave).

Pelas suas próprias características, esses processos ocorrem em regime transiente. Não havendo entrada ou saída do componente **A** no VC.

$$\begin{array}{ccccccc} \textit{ACUMULADO (A)} & = & \textit{ENTRA (A)} & - & \textit{SAI (A)} & + & \textit{REAGE (A)} \\ \text{(dentro do VC)} & & \underbrace{\hspace{10em}} & & & & \text{(dentro do VC)} \\ & & \text{(através da SC)} & & & & \end{array}$$

Então, tem-se duas situações:

1) Com reação química

Como ocorre reação química o termo REAGE é diferente de zero, logo:

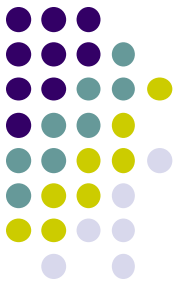
$$\textit{ACUMULADO (A)} = \textit{REAGE (A)}$$

Em termos mássicos:

$$\frac{dm_A}{dt} = R_A$$

Onde:

R_A representa a geração ou consumo de A



❑ Processos em Batelada

2) Sem reação química

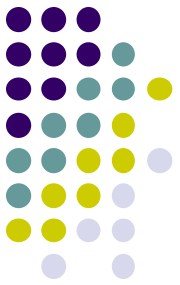
$$ACUMULADO (A) = 0$$

Em termos mássicos:

$$\frac{dm_A}{dt} = 0$$

Como a variação da massa de **A** com o tempo igual a zero, isso mostra que a massa de **A** não sofre variação, ou seja, é constante. Logo:

$$m_{Afinal} = m_{Ainicial}$$



❑ **Processos Contínuos:** produção de vapor em caldeiras; bombeamento e retirada de fluído num tanque a uma mesma vazão.

Como há entrada e saída contínua de matéria no VC. Então, os termos SAI e ENTRA para o componente **A** são diferentes de zero. Nesse caso, são apresentadas as seguintes situações:

1) Com reação química

Tendo reação química, o termo REAGE é diferente de zero. Assim, tem-se:

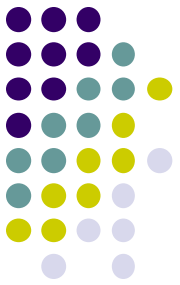
1.1) Em estado não estacionário ou regime transiente

Há acúmulo ou variação da massa de **A** com o tempo. Então, o termo ACUMULADO é diferente de zero. Assim:

$$\begin{array}{ccccc} \textit{ACUMULADO (A)} & = & \textit{ENTRA (A)} - \textit{SAI (A)} & + & \textit{REAGE (A)} \\ \text{(dentro do VC)} & & \underbrace{\hspace{1.5cm}} & & \text{(dentro do VC)} \\ & & \text{(através da SC)} & & \end{array}$$

Em termos mássicos:

$$\frac{dm_A}{dt} = \dot{m}_{Ae} - \dot{m}_{As} + R_A$$



❑ Processos Contínuos

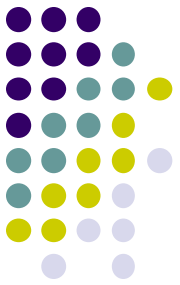
1.2) Em estado estacionário ou regime permanente

Não há acúmulo ou variação da massa de **A** com o tempo. Então, o termo ACUMULADO é igual a zero. Assim:

$$0 = \underbrace{ENTRA (A) - SAI (A)}_{\text{(através da SC)}} + REAGE (A)_{\text{(dentro do VC)}}$$

Em termos mássicos:

$$\dot{m}_{As} = \dot{m}_{Ae} + R_A$$



❑ Processos Contínuos

2) Sem reação química

Como não há reação química, o termo REAGE é igual a zero. Assim, tem-se:

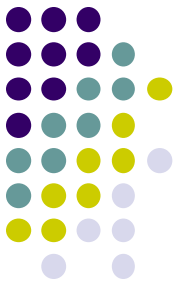
2.1) Em estado não estacionário ou regime transiente

Ocorre acúmulo ou variação da massa de **A** com o tempo. Então, o termo ACUMULADO é diferente de zero. Dessa forma:

$$\begin{array}{ccc} \textit{ACUMULADO (A)} & = & \underbrace{\textit{ENTRA (A)} - \textit{SAI (A)}} \\ \text{(dentro do VC)} & & \text{(através da SC)} \end{array}$$

Em termos mássicos:

$$\frac{dm_A}{dt} = \dot{m}_{Ae} - \dot{m}_{As}$$



❑ Processos Contínuos

2.2) Em estado estacionário ou regime permanente

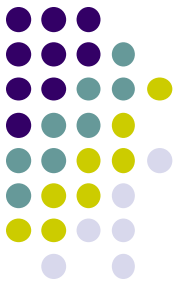
Não há acúmulo ou variação da massa de **A** com o tempo. Então, o termo ACUMULADO é igual a zero. Assim:

$$SAI (A) = ENTRA (A)$$

Em termos mássicos:

$$\dot{m}_{As} = \dot{m}_{Ae}$$

Processos Semicontínuos: borbulhamento de um gás em um meio líquido; escape de gás de um cilindro pressurizado.



Os processos semicontínuos ocorrem apenas em **regime transiente**, com saída ou entrada de matéria no VC. Logo, tem-se que:

1) Com reação química

Como o processo ocorre com reação química, o termo REAGE é diferente de zero, logo:

Em termos mássicos:

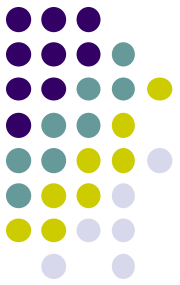
$$\begin{array}{ccccc} \textit{ACUMULADO (A)} & = & \textit{REAGE (A)} & - & \textit{SAI (A)} \\ \text{(dentro do VC)} & & \text{(dentro do VC)} & & \text{(através do VC)} \end{array}$$

$$\frac{dm_A}{dt} = R_A - \dot{m}_{As}$$

$$\begin{array}{ccccc} \textit{ACUMULADO (A)} & = & \textit{ENTRA (A)} & + & \textit{REAGE (A)} \\ \text{(dentro do VC)} & & \text{(através do VC)} & & \text{(dentro do VC)} \end{array}$$

$$\frac{dm_A}{dt} = \dot{m}_{Ae} + R_A$$

❑ Processos Semicontínuos



2) Sem reação química

Não há reação química, o termo REAGE é igual a zero. Assim, tem-se:

Em termos mássicos:

$$\begin{array}{ccc} \textit{ACUMULADO (A)} & = & - \textit{SAI (A)} \\ \text{(dentro do VC)} & & \text{(através do VC)} \end{array}$$

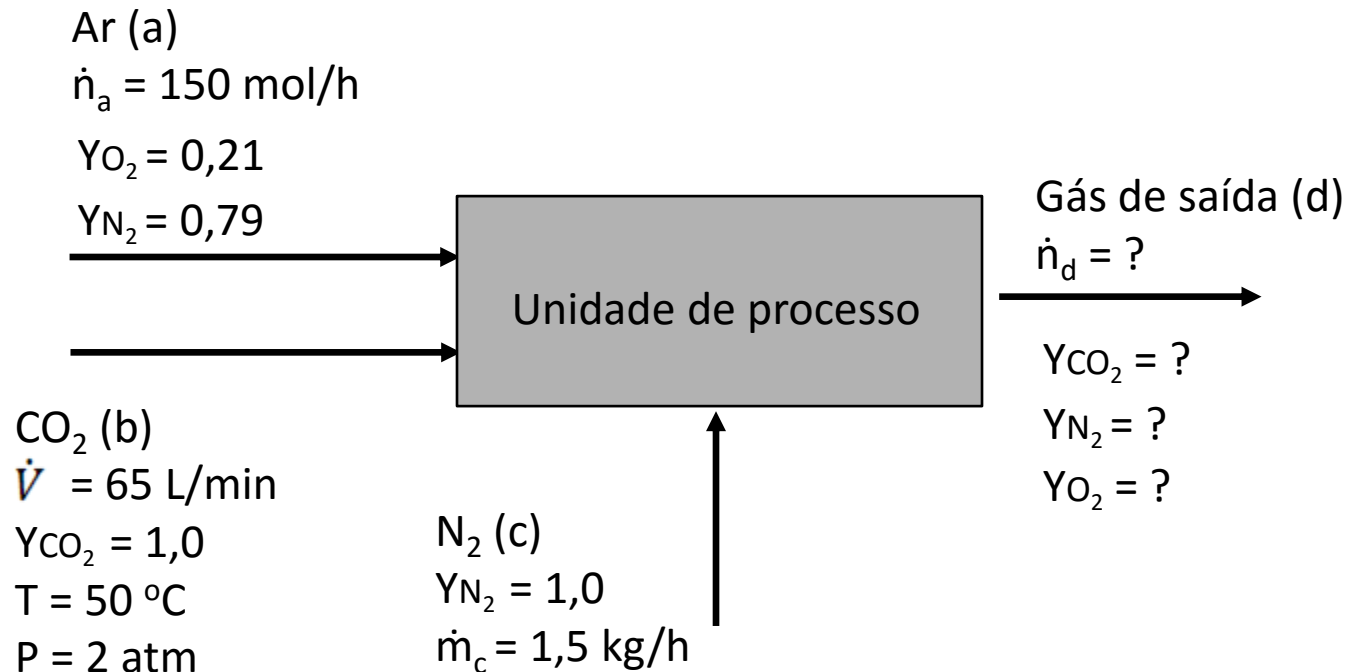
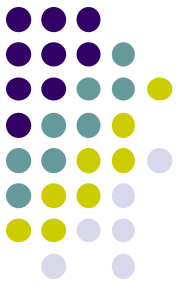
$$\frac{dm_A}{dt} = - \dot{m}_{As}$$

$$\begin{array}{ccc} \textit{ACUMULADO (A)} & = & \textit{ENTRA (A)} \\ \text{(dentro do VC)} & & \text{(através do VC)} \end{array}$$

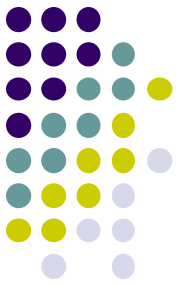
$$\frac{dm_A}{dt} = \dot{m}_{Ae}$$

Exemplo

Considere uma mistura de três correntes: uma de **ar** (21% de O_2 e 79% de N_2 , base molar), à vazão de 150 mol/h; outra de **CO_2** com vazão de 65 L/min, a 50 °C e 2 atm, e outra de **N_2** com vazão de 1,5 kg/h. obtenha a composição molar da corrente resultante.



COMPORTAMENTO DO BM EM PROCESSOS COM REAÇÃO QUÍMICA



Em virtude de a estequiometria da reação relacionar quantidades molares, nos processos com reação química deve-se realizar balanços molares para as espécies envolvidas e não mássicos.

O termo **REAGE** (geração e consumo) é levado em conta.

Considere a seguinte estequiometria geral:



Após o balanceamento da equação, pode-se escrever as seguintes relações:

$$\frac{\text{CONSUME (A)}}{a} = \frac{\text{CONSUME (B)}}{b} = \frac{\text{GERA (C)}}{c} = \frac{\text{GERA (D)}}{d}$$

Ou simplesmente:

$$\frac{\text{REAGE (A)}}{a} = \frac{\text{REAGE (B)}}{b} = \frac{\text{REAGE (C)}}{c} = \frac{\text{REAGE (D)}}{d}$$

Balanço de massa em processos com REAÇÃO QUÍMICA



Assim, se soubermos a quantidade que reage de uma determinada espécie química que participa da reação, através da estequiometria, podemos conhecer as outras espécies.

Exemplo:

Seja a reação de decomposição do peróxido de hidrogênio (H_2O_2)



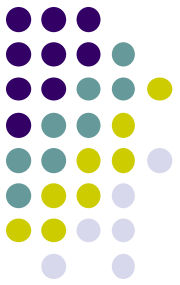
A relação entre as quantidades que reagem é dada por:

$$\frac{\text{CONSOME } (\text{H}_2\text{O}_2)}{2} = \frac{\text{GERA } (\text{H}_2\text{O})}{2} = \frac{\text{GERA } (\text{O}_2)}{1}$$

Multiplicando por 2 tem-se:

$$\text{CONSOME } (\text{H}_2\text{O}_2) = \text{GERA } (\text{H}_2\text{O}) = 2. \text{GERA } (\text{O}_2)$$

Balanço de massa em processos com REAÇÃO QUÍMICA



❑ Reagente em proporção estequiométrica

Os reagentes de uma reação estão em proporção estequiométrica, quando na alimentação do reator a relação molar é igual a relação estequiométrica.

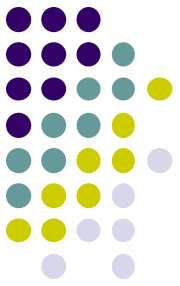
Considere a reação:



A proporção estequiométrica é dada por: $\frac{n_A}{n_B} = \frac{2}{1}$

Por exemplo, se **400** mols de A são alimentados, deve-se alimentar **200** mols de B para que a proporção estequiométrica seja atendida.

Balanço de massa em processos com REAÇÃO QUÍMICA



□ Reagente limitante e reagente em excesso

- ✓ Reagente limitante: é aquele que aparece em menor quantidade;
- ✓ Reagente em excesso: é a aquele que aparece acima da proporção estequiométrica.

Seja a reação do caso anterior:



Como a proporção é 2:1 (400:200), se tivéssemos alimentado um reator com **400** mols de A e **160** mols de B, este seria o reagente limitante e A o reagente em excesso.

$$\% \text{ excesso} = \frac{n - n_e}{n_e} \times 100$$

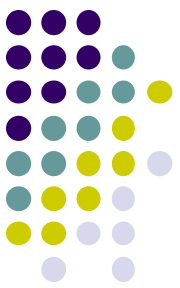
n : mols alimentado

n_e : mols estequiométrico

$$\% \text{ excesso} = \frac{400 - 320}{320} \times 100$$

$$\% \text{ excesso} = 25\%$$

Balanço de massa em processos com REAÇÃO QUÍMICA



❑ Conversão do reagente limitante

A conversão de um reagente A (X_A) é definida como a relação entre a quantidade reagida e a quantidade alimentada, ou seja:

$$X_A = \frac{\text{mols reagidos de A}}{\text{mols alimentados de A}}$$

A fração não reagida de A é, portanto, $1 - X_A$.

No caso de um processo em batelada, a equação acima pode ser reescrita como segue:

$$X_A = \frac{\text{mols iniciais de A} - \text{mols finais de A}}{\text{mols iniciais de A}}$$

No caso de um processo contínuo, tem-se:

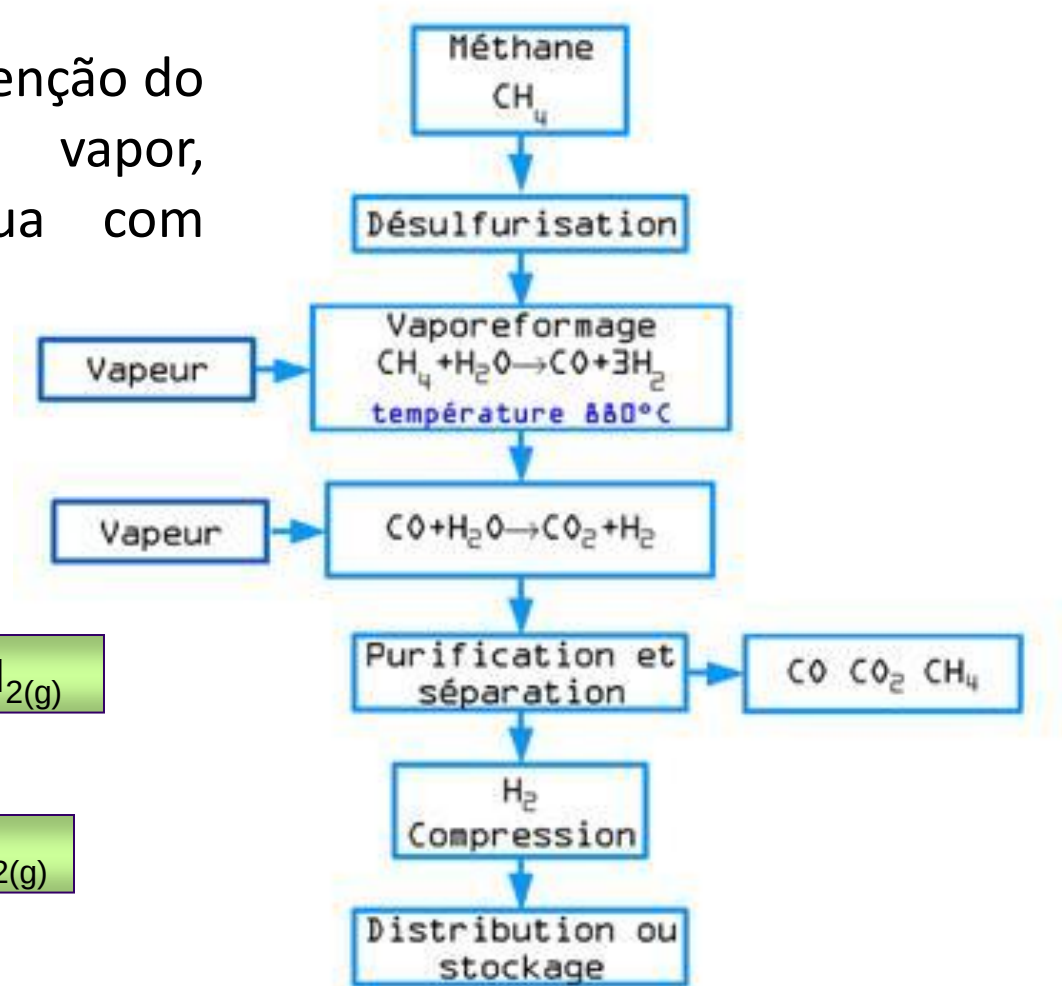
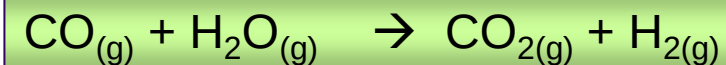
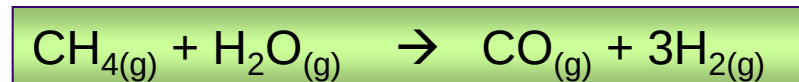
$$X_A = \frac{\text{mols de A na entrada} - \text{mols de A na saída}}{\text{mols de A na entrada}}$$

Balanço de massa em processos com REAÇÃO QUÍMICA

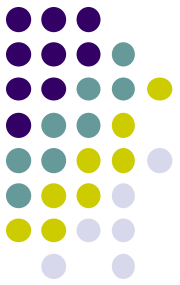


□Rendimento (η) e seletividade (S)

Considere o processo de obtenção do HIDROGÊNIO: reforma a vapor, reação catalisada da água com hidrocarbonetos.



Balanço de massa em processos com REAÇÃO QUÍMICA



□ Rendimento (η) e seletividade (S)

O **rendimento** (η) é um parâmetro que relaciona a quantidade de um produto formado e a quantidade máxima de formação desse produto, prevista pela estequiometria.

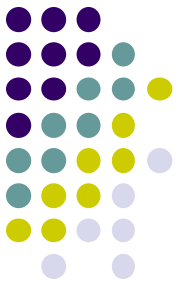
$$\eta_{co} = \frac{\text{quantidade gerada de CO}}{\text{Quatidade estequiométrica de CO}}$$

A **seletividade** (S) relaciona as quantidades de um produto desejado formado e a quantidade de produto indesejado formado.

Por exemplo, a seletividade de CO em relação a CO₂ é dada por:

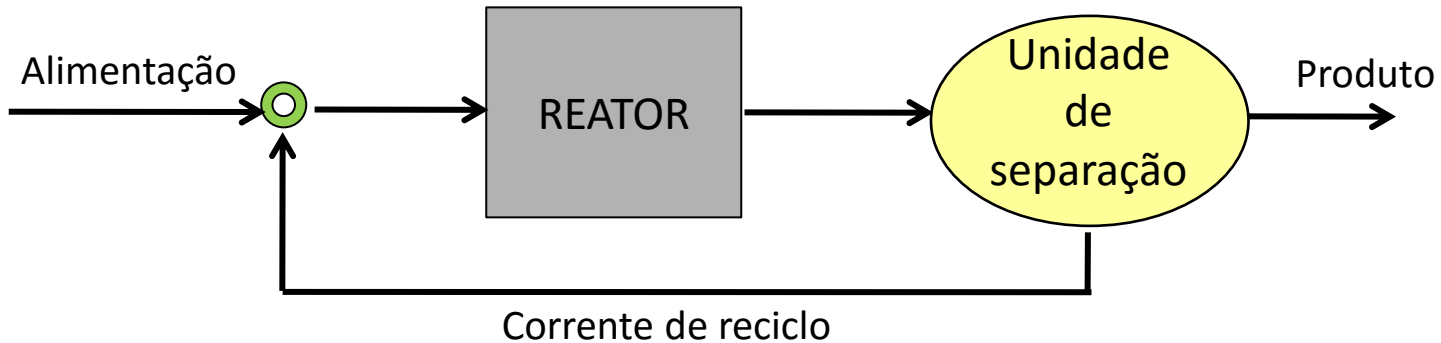
$$S_{co/co_2} = \frac{\text{quantidade de CO formado}}{\text{quantidade de CO}_2 \text{ formado}}$$

Balanço de massa em processos com REAÇÃO QUÍMICA



❑ Reciclo em processos com reação

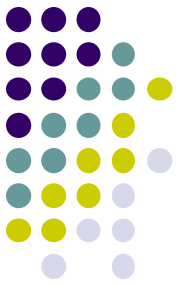
Considere o exemplo abaixo:



Operação de RECICLO com reação

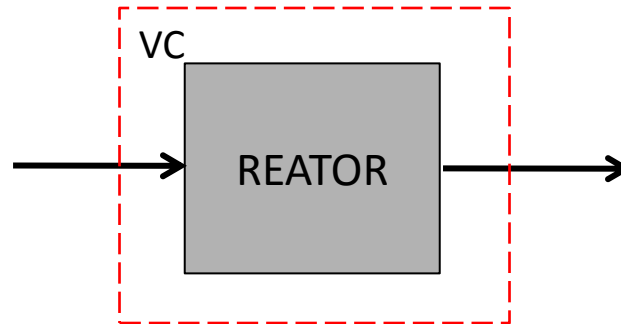
Em operações com reciclo, duas definições são importantes em relação à conversão dos reagentes:

Balanço de massa em processos com REAÇÃO QUÍMICA



❑ Reciclo em processos com reação

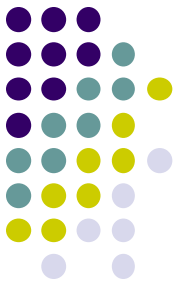
1. Conversão no reator (X_R): considera o reator como volume de controle (VC)



$$X_R = \frac{\text{reagente que entra no reator} - \text{reagente que sai do reator}}{\text{reagente que entra no reator}}$$

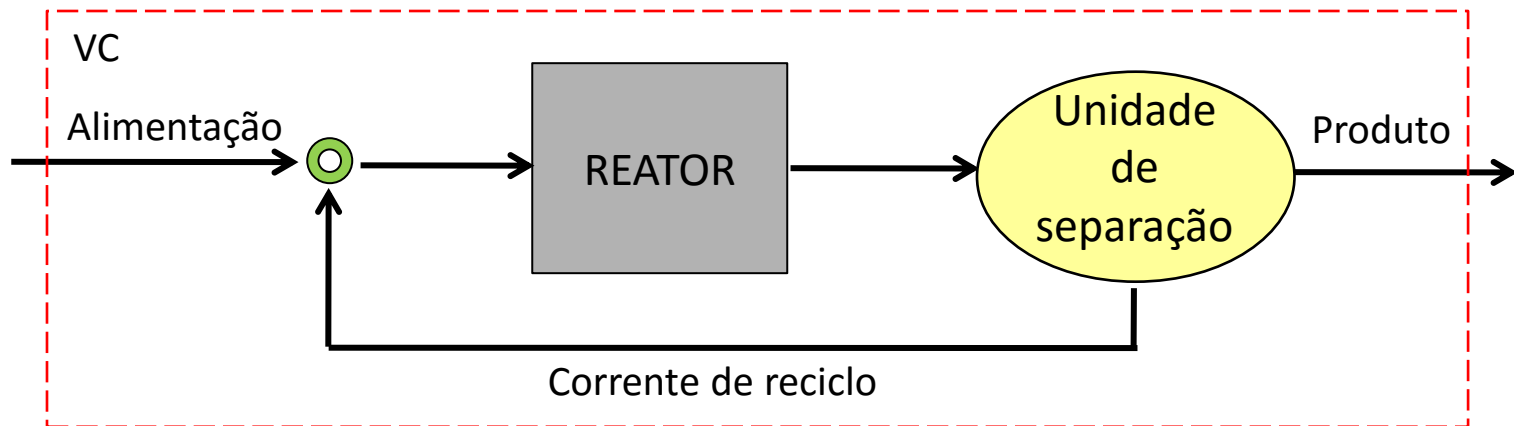
$$0 < X_R < 1 \text{ ou } 0 < X_R < 100\%$$

Balanço de massa em processos com REAÇÃO QUÍMICA



❑ Reciclo em processos com reação

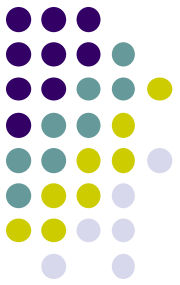
2. **Conversão global** (X_G): considera como volume de controle (VC) o processo com um todo.



$$X_G = \frac{\text{reagente que entra no processo} - \text{reagente que sai do processo}}{\text{reagente que entra no processo}}$$

$$0 < X_G < 1 \text{ ou } 0 < X_G < 100\%$$

Balanço de massa em processos com REAÇÃO QUÍMICA



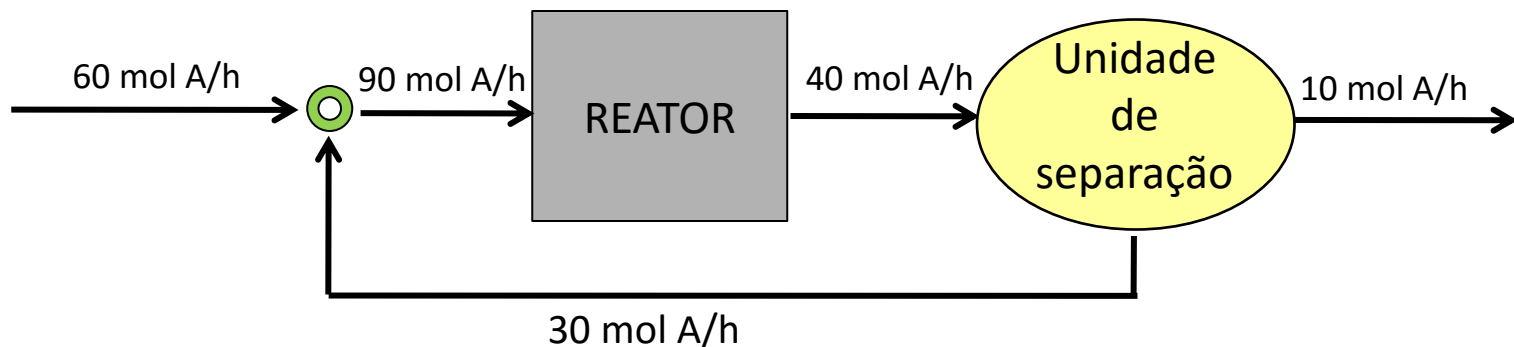
❑ Reciclo em processos com reação

O objetivo do reciclo é aumentar o processo de conversão do reagente não convertido, através de sua separação e retorno ao processo.

Sendo assim, tem-se que:

Conversão global > conversão no reator

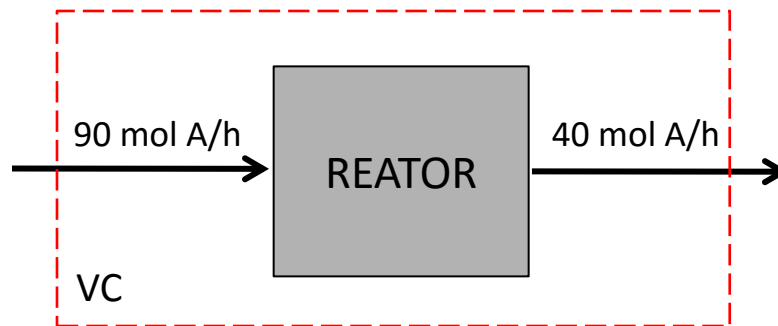
Exemplo: considere o processo reciclo com a reação: $A \rightarrow B$



Balanço de massa em processos com REAÇÃO QUÍMICA

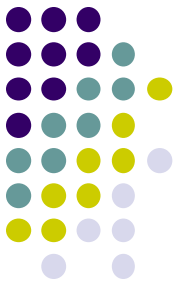
☐ Reciclo em processos com reação

A conversão no reator (X_R) será:

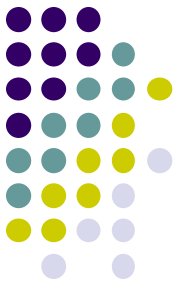


$$X_R = \frac{90 \text{ mol } \frac{A}{h} - 40 \text{ mol } \frac{A}{h}}{90 \text{ mol } \frac{A}{h}} \times 100$$

$$X_R = 56 \%$$

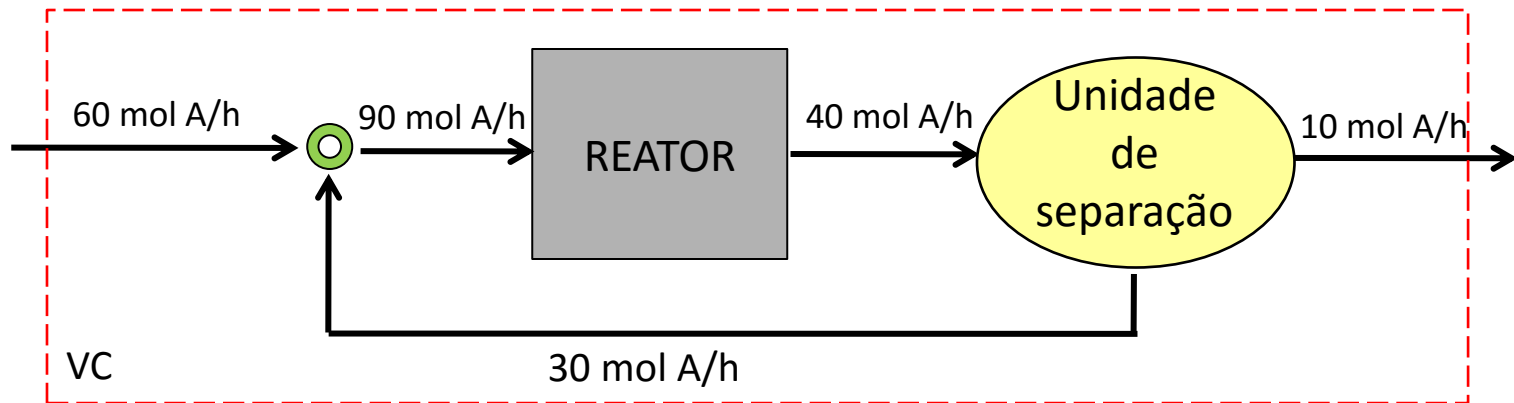


Balanço de massa em processos com REAÇÃO QUÍMICA



❑ Reciclo em processos com reação

A conversão global (X_G) será:



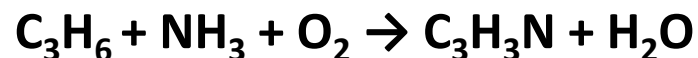
$$X_G = \frac{60 \text{ mol} \frac{A}{h} - 10 \text{ mol} \frac{A}{h}}{60 \text{ mol} \frac{A}{h}} \times 100$$

$$X_G = 83 \%$$

EXERCÍCIOS



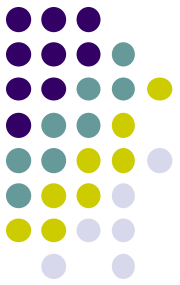
1. Acrilonitrila ($\text{C}_3\text{H}_3\text{N}$) é produzida pela reação de propileno, amônia e oxigênio:



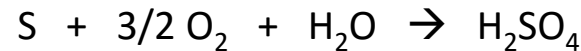
A alimentação molar contém 10% de propileno, 12% de amônia e 78% de ar.

- a) Qual é o reagente limitante?
- b) Quais os reagentes em excesso?
- c) Calcule a quantidade de $\text{C}_3\text{H}_3\text{N}$ produzidos em kg/h supondo uma conversão de 30% do reagente limitante.

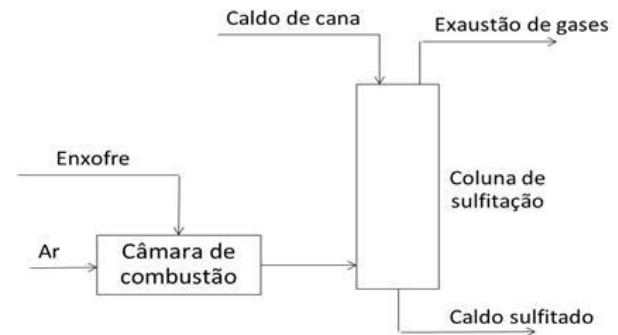
EXERCÍCIOS



3. Uma das etapas do processo de produção de açúcar é a clarificação do caldo com a queima de enxofre (S), produzindo SO_3 que, em contato com a água presente no caldo, gera H_2SO_4 e abaixa o pH, precipitando e flotando impurezas presentes no caldo de cana. Trata-se de um processo contínuo com reação no estado estacionário, cuja reação global é dada por:



Considere o fluxograma de sulfitação que segue:



Supondo que uma unidade de sulfitação processe $200 \text{ m}^3/\text{h}$ de caldo de cana reduzindo o pH do caldo de 6,0 para 3,0; calcule as vazões de alimentação requeridas de enxofre, em kg/h , e de ar, em m^3/h a 30°C e 1 atm , considerando que o mesmo esteja em excesso de 40%.