

Aula 13 - Reator de Fluxo Pistonado (RFP) isotérmico

Professor: Emílio Graciliano Ferreira Mercuri, D.Sc.

Departamento de Engenharia Ambiental - DEA,

Universidade Federal do Paraná - UFPR

emiliomercuri@gmail.com

Nas aulas passadas foi aprofundado o estudo de reatores em batelada, foram estudadas reações quase estacionárias, autocatáticas e com volume variável. Nesta aula será ampliada a discussão a respeito de reatores de fluxo pistonado isotérmicos. Será discutido uma generalização das equações de projeto para o reator de fluxo do pistão além do caso simples de densidade e velocidade constantes. A principal suposição do fluxo do pistão permanece intacta: deve haver uma mistura completa na direção perpendicular ao fluxo e nenhuma mistura na direção do fluxo. A densidade do fluido e a seção transversal do reator podem variar. A queda de pressão no reator será determinada.

1 RFP isotérmico com densidade e seção transversal constantes

Nas primeiras aulas nós estudamos o tipo mais simples de reator de fluxo de pistão: considerando um fluido com densidade e temperatura constantes e seção transversal constante do reator. As equações de projeto do reator para este tipo de reator de fluxo de pistão são análogas às equações de projeto de um reator de batelada de densidade constante. O que acontece no tempo no reator em batelada acontece no espaço do reator de fluxo de pistão, e a transformação $t = z/\bar{u}$ converte as equação de projeto dos dois reatores (t : tempo, z : coordenada de comprimento axial, \bar{u} : velocidade média na seção transversal). Para o componente A:

Reator de Batelada:

$$\frac{da}{dt} = \mathcal{R}_A \quad \text{sendo que} \quad a = a_0 \quad \text{em} \quad t = 0 \quad (1)$$

Reator de Fluxo Pistonado:

$$\bar{u} \frac{da}{dz} = \mathcal{R}_A \quad \text{sendo que} \quad a = a_{\text{entrada}} \quad \text{em} \quad z = 0 \quad (2)$$

TRANSFORMAÇÃO:

① $t = \frac{z}{\bar{u}}$

③ $z = t\bar{u}$

$\frac{dz}{dt} = \bar{u}$

② E.D.O.:

$\frac{da}{dt} = \mathcal{R}_A$

REGRAS DA CADEIA

$\frac{da}{dz} \frac{dz}{dt} = \mathcal{R}_A$

④ $\bar{u} \frac{da}{dz} = \mathcal{R}_A$

Figura 1: Dedução da mudança de variáveis usando a transformação e a Regra da Cadeia

Todos os resultados obtidos para reatores isotérmicos de batelada com densidade constante aplicam-se a RFP isotérmicos de densidade constante (e seção transversal A_c constante). Basta substituir t por $z = t\bar{u}$ e avaliar a concentração de saída em $z = L$: Equivalentemente, ao invés de analisar o resultado no domínio do tempo, basta avaliar a composição de saída no tempo de retenção do reator $\bar{t} = V/Q = (LA_c)/(\bar{u}A_c) = L/\bar{u}$.

Por exemplo, a solução para o componente B na reação competitiva sequencial:



em um reator de batelada é:

$$b_{\text{batelada}}(t) = \left[b_0 - \frac{a_0 k_A}{k_B - k_A} \right] e^{-k_B t} + \left[\frac{a_0 k_A}{k_B - k_A} \right] e^{-k_A t} \quad (4)$$

em um RFP é:

$$b_{\text{RFP}}(z) = \left[b_{in} - \frac{a_{in} k_A}{k_B - k_A} \right] e^{-k_B z / \bar{u}} + \left[\frac{a_{in} k_A}{k_B - k_A} \right] e^{-k_A z / \bar{u}} \quad (5)$$

A ênfase que será dada nesta aula está na generalização do fluxo do pistão para situações diferentes de caso de velocidade constante no tubo. Os reatores reais podem aproximar-se de perto dos reatores de fluxo de pistão, mas apresentam muitas complicações em comparação com o caso de densidade constante e seção constante considerado anteriormente. Os reatores tubulares de fase gasosa podem apresentar grandes diferenças de densidade desde a entrada até a saída.

2 RFP com fluxo de massa constante

Nessa seção assume-se que a vazão mássica no tubo é constante; isto é, a parede do tubo é impermeável. A área de seção transversal do reator A_c pode variar em função da posição axial, $A_c = A_c(z)$. A Figura 2 mostra o sistema e indica a nomenclatura.

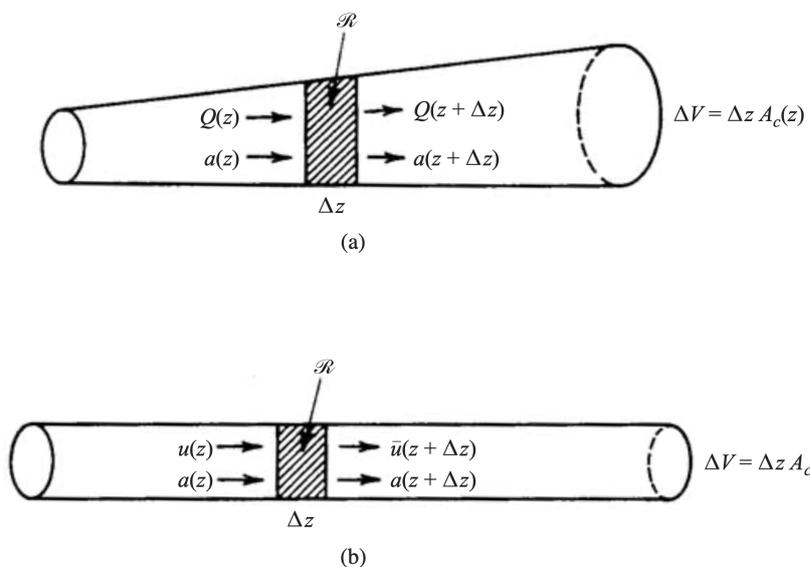


Figura 2: Elementos de volume diferencial nos reatores de fluxo de pistão: (a) seção transversal variável; (b) seção transversal constante.

Considerando $Q = A_c \bar{u}$ a vazão volumétrica no reator [volume/tempo], um balanço geral de massa fornece:

$$Q\rho = Q_{in}\rho_{in} = A_c \bar{u}\rho = (A_c)_{in} \bar{u}_{in}\rho_{in} = \text{constante} \quad (6)$$

sendo que ρ é a densidade de massa que se supõe ser uniforme na seção transversal do reator, mas pode mudar em função de z . A equivalência da Equação 6 em um sistema em batelada é apenas que ρV seja constante.

O balanço da componente A é escrita com base na taxa de fluxo molar a [moles/volume]:

$$\dot{N}_A = Qa \quad (7)$$

Ao contrário de $Q\rho$, \dot{N}_A não é uma quantidade conservada e varia ao longo do comprimento do tubo. Considere um elemento diferencial de comprimento Δz e volume $\Delta z A_c$. O fluxo molar que entra no elemento é $\dot{N}_A(z)$ e o que sai do elemento é $\dot{N}_A(z + \Delta z)$, sendo a diferença devido à reação dentro do elemento de volume. O balanço de massa do componente A fornece:

$$\dot{N}_A(z) + A_c \Delta z \mathcal{R}_A = \dot{N}_A(z + \Delta z) \quad (8)$$

ou

$$\mathcal{R}_A = \frac{\dot{N}_A(z + \Delta z) - \dot{N}_A(z)}{A_c \Delta z} \quad (9)$$

Tomando o limite onde $\Delta z \rightarrow 0$, tem-se que:

$$\frac{1}{A_c} \frac{d(\dot{N}_A)}{dz} = \frac{1}{A_c} \frac{d(Qa)}{dz} = \frac{1}{A_c} \frac{d(A_c \bar{u}a)}{dz} = \mathcal{R}_A \quad (10)$$

A derivada na Equação 10 pode ser expandida em três termos separados:

$$\frac{1}{A_c} \frac{d(A_c \bar{u}a)}{dz} = \bar{u} \frac{da}{dz} + a \frac{d\bar{u}}{dz} + \frac{\bar{u}a}{A_c} \frac{dA_c}{dz} = \mathcal{R}_A \quad (11)$$

O primeiro termo deve ser mantido, pois A é um componente reativo e, portanto, varia na direção z . O segundo termo deve ser mantido se a densidade mássica ou a área da seção transversal do reator variar com z (essas duas condições implicam na velocidade média não ser constante). O último termo é necessário para reatores com seções transversais variáveis. A Figura 3 ilustra um reator anular (ou anelar, forma de um anel) que é uma razão relevante para a inclusão desse terceiro termo.

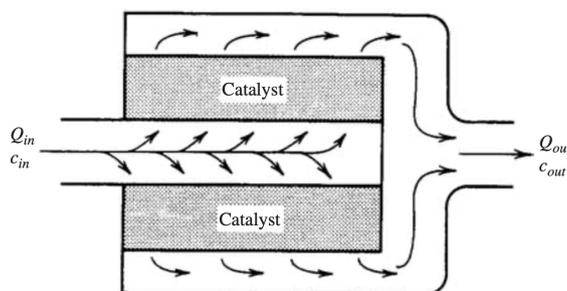


Figura 3: Reator anular de leito compactado usado para reações adiabáticas favorecidas por baixa pressão.

Problemas práticos que envolvem RFPs de densidade variável requerem soluções numéricas e, para elas, é melhor evitar a expansão da Equação 11 em derivadas separadas para a e u . Poderíamos continuar usando a taxa de fluxo molar, \dot{N}_A , como variável dependente, mas é comum usar o fluxo molar,

$$\Phi_A = \bar{u}a. \quad (12)$$

A unidade de Φ_A é $\text{mol}/(\text{m}^2 \text{ s})$. Este é o **fluxo convectivo**. O estudante que cursou disciplinas como “Fenômenos de Transporte” ou “Transferência de calor e massa” ou “Mecânica dos fluidos” reconhecerá que um termo de difusão como $\mathcal{D}_A da/dz$ é geralmente incluído na formulação de fluxo. Este termo é o **fluxo difusivo** e é zero para o fluxo do pistão. A equação de projeto para o RFP de densidade variável e seção variável pode ser escrita como:

$$\frac{d\Phi_A}{dz} = \mathcal{R}_A - \frac{\Phi_A}{A_c} \frac{dA_c}{dz} \quad \text{sendo que} \quad \Phi_A = (\Phi_A)_{in} \quad \text{em} \quad z = 0 \quad (13)$$

O termo $dA_c = dz$ é geralmente zero, uma vez que os reatores tubulares com diâmetro constante são de longe a aplicação mais importante da Equação 13. Para o caso excepcional, supomos que $A_c(z)$ seja conhecida, digamos, dos desenhos de projeto do reator. $A_c(z)$ deve ser uma função suave de z (ou seja, diferenciável) e de variação lenta, caso contrário a suposição de fluxo do pistão terá dificuldades hidrodinâmicas e matemáticas. Mudanças bruscas na A_c criarão fluxos secundários que invalidam as suposições do fluxo do pistão.

Podemos definir uma nova expressão de taxa \mathcal{R}'_A que inclua o termo dA_c/dz . A equação do projeto se torna:

$$\frac{d\Phi_A}{dz} = \mathcal{R}_A - \frac{\Phi_A}{A_c} \frac{dA_c}{dz} = \mathcal{R}'_A = \mathcal{R}'_A(a, b, \dots, z) \quad (14)$$

onde \mathcal{R}'_A tem uma dependência explícita de z quando a seção transversal é variável e $\mathcal{R}'_A = \mathcal{R}_A$ para o caso de seção transversal constante.

Se houver M reações envolvendo N componentes químicos:

$$\frac{d\Phi}{dz} = \nu \mathcal{R}' \quad \text{sendo que} \quad \Phi = \Phi_{in} \quad \text{em} \quad z = 0 \quad (15)$$

onde Φ e Φ_{in} são vetores coluna $N \times 1$ dos fluxos de componentes, ν é uma matriz $N \times M$ de coeficientes estequiométricos e \mathcal{R}' é um vetor de coluna $M \times 1$ de taxas de reação que inclui os efeitos da variação da seção transversal do reator. A Equação 15 representa um conjunto de EDOs de primeira ordem.

É possível desenvolver uma técnica geral para a solução numérica da Equação 15, mesmo quando a densidade varia no tubo. É primeiro necessário converter as taxas de reação dos componentes de sua dependência habitual da concentração para uma dependência dos fluxos molares. Isso é feito simplesmente substituindo a por Φ_A/\bar{u} e assim por diante nos vários componentes. Isso introduz \bar{u} como uma variável na taxa de reação:

$$\frac{d\Phi_A}{dz} = \mathcal{R}'_A = \mathcal{R}'_A(a, b, \dots, z) = \mathcal{R}'_A(\Phi_A, \Phi_B, \dots, \bar{u}, z) \quad (16)$$

Para encontrar \bar{u} , é necessário usar algumas equações auxiliares. Como de costume na solução problemas de valor inicial, assumimos que todas as variáveis são conhecidas na entrada do reator para que o termo $(A_c)_{in} \bar{u}_{in} \rho_{in}$ seja conhecido. A equação 6 pode ser usada para calcular \bar{u} em um local a jusante no fluxo, se ρ for conhecida. Uma equação de estado fornecerá ρ , mas requer conhecimento de variáveis de estado como composição, pressão e temperatura. Para encontrá-las, precisaremos de mais equações, mas um conjunto fechado pode eventualmente ser alcançado, e os cálculos podem prosseguir gradualmente no tubo.

2.1 Reações em fase gasosa

Para reações em fase gasosa, a densidade molar é mais útil que a densidade de massa. Determinar a equação de estado para uma mistura de gases não ideais pode ser uma tarefa difícil em termodinâmica. Para fins ilustrativos e para muitos problemas industriais, a lei do gás ideal é suficiente. Aqui ela é apresentada em uma forma adequada para reatores de fluxo:

$$PV = nR_gT \quad \rightarrow \quad \frac{P}{R_gT} = \frac{n}{V} \quad (17)$$

sendo que P é a pressão, V é o volume, n é o número de moles, R_g é a constante universal dos gases e T é a temperatura em Kelvin. Para uma mistura e fluxo de com N componentes, tem-se que a densidade molar é:

$$\frac{n}{V} = a + b + c + \dots + i \quad (18)$$

Portanto, a lei dos gases ideais é:

$$\frac{P}{R_gT} = a + b + c + \dots + i \quad (19)$$

sendo que i representa a concentração (densidade molar) dos gases inertes. Note que a Equação 15 deve incluir inertes como um dos componentes quando a reação é fase gasosa. O coeficiente estequiométrico é zero para um inerte, de modo que $\mathcal{R}'_I = 0$, porém se A_c variar com z , então $\mathcal{R}'_I \neq 0$.

Multiplicando a Equação 19 por \bar{u} :

$$\frac{P\bar{u}}{R_gT} = \bar{u}a + \bar{u}b + \bar{u}c + \dots + \bar{u}i = \Phi_A + \Phi_B + \Phi_C + \dots + \Phi_I \quad (20)$$

Se o reator foi isotérmico e se a queda de pressão for suficientemente baixa, conseguimos o fechamento. As equações 16 e 20 juntas permitem uma solução de marcha adiante ao longo de z . O caso mais geral requer equações adicionais para calcular a pressão e a temperatura. Uma EDO é adicionada para calcular a pressão $P(z)$ e também é possível adicionar um EDO para calcular a temperatura $T(z)$ (isso é estudado no capítulo 5 do livro).

Para o *fluxo laminar* em um tubo circular de raio R , o gradiente de pressão é dado por uma forma diferencial da equação de Poiseuille:

$$\frac{dP}{dz} = -\frac{8\mu\bar{u}}{R^2} \quad (21)$$

sendo que μ é a viscosidade dinâmica. No caso geral μ , \bar{u} , e R variam em função de z e a Equação 21 deve ser integrada numericamente.

Para *fluxo turbulento*, a queda de pressão é calculada a partir de:

$$\frac{dP}{dz} = -\frac{F_a \rho \bar{u}^2}{R} \quad (22)$$

onde o fator de atrito de Fanning \mathbf{Fa} pode ser aproximado usando o número de Reynolds \mathbf{Re} pela relação:

$$\mathbf{Fa} = \frac{0,079}{\mathbf{Re}^{1/4}} \quad (23)$$

Correlações mais precisas, que levam em consideração fatores como a rugosidade da parede, estão disponíveis na literatura, mas a forma usada aqui é adequada para a maioria dos propósitos.

Para leitos recheados (com partículas empacotadas) conforme ilustra a Figura 4, tendo fluxo turbulento ou laminar, a equação de Ergun é geralmente empregada:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dz} &= -\frac{\rho \bar{u}_s^2 (1-\varepsilon)}{d_p \varepsilon^3} \left[\frac{150(1-\varepsilon)\mu}{d_p \rho \bar{u}_s} + 1,75 \right] \\ &= -\frac{\rho \bar{u}_s^2 (1-\varepsilon)}{d_p \varepsilon^3} \left[\frac{150(1-\varepsilon)}{(\mathbf{Re})_p} + 1,75 \right] \end{aligned} \quad (24)$$

onde ε é a fração de vazios do leito, \mathbf{Re}_p é o número de Reynolds das partículas e d_p é o diâmetro das partículas empacotadas. Para empacotamento de partículas não esféricas, recomenda-se usar seis vezes a razão do volume em relação à área da superfície do empacotamento como um d_p efetivo. Observe que \bar{u}_s é a velocidade superficial, ou seja, a velocidade média que o fluido teria se o tubo estivesse vazio.

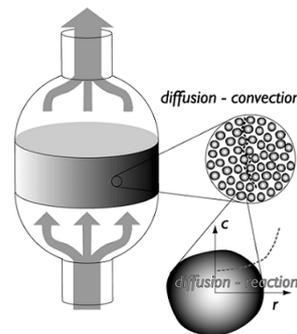


Figura 4: Projeto simplificado de um reator típico de leito recheado.

Pronto, a formulação está agora completa. Incluindo os inertes entre os N componentes, existem N EDOs que têm os Φ 's como variáveis dependentes. O caso mais geral possui duas EDOs adicionais, um para pressão e outro para temperatura. Existem, portanto, $N + 2$ EDOs de primeira ordem no caso geral. Há também uma equação de estado, como a Equação 20, que relaciona P , T e Φ : A técnica de marcha em frente pressupõe que todas as variáveis sejam conhecidas na entrada do reator. A pressão pode ser uma exceção, pois a pressão de descarga geralmente é especificada e a pressão de entrada possui qualquer valor necessário para atingir a vazão necessária. Isso é tratado assumindo um valor para P_{in} e ajustando-o até que o valor desejado para P_{out} seja obtido.

Uma solução analítica para um problema de densidade variável raramente é possível. O exemplo a seguir é uma exceção que ilustra a técnica da solução primeiro na forma analítica e depois na forma numérica. Segue-se com uma descrição do algoritmo geral para resolver a Equação 16 numericamente.

Exemplo: Considere a reação $2A \xrightarrow{k} B$. Derive uma expressão analítica para a fração que não reagiu em um reator isotérmico de fluxo de pistão em fase gasosa de comprimento L . A queda de pressão no reator é insignificante. A seção transversal do reator é constante. Não há inertes. A alimentação é pura A e os gases são ideais. Teste sua matemática com uma solução numérica.

Solução: As equações de design para os dois componentes são:

$$\frac{d(\bar{u}a)}{dz} = \frac{d\Phi_A}{dz} = -2ka^2 = -2k \frac{\Phi_A^2}{\bar{u}^2} \quad (25)$$

$$\frac{d(\bar{u}b)}{dz} = \frac{d\Phi_B}{dz} = ka^2 = k \frac{\Phi_A^2}{\bar{u}^2} \quad (26)$$

Aplicação da lei do gás ideal:

$$\frac{P}{R_g T} = \rho_{molar} = a + b \quad (27)$$

Multiplicando por \bar{u} , tem-se:

$$\frac{P\bar{u}}{R_g T} = \bar{u}\rho_{molar} = \bar{u}(a + b) = \Phi_A + \Phi_B \quad (28)$$

Como a queda de pressão é pequena, $P = P_{in}$, pode-se escrever uma expressão para a velocidade média \bar{u} com base nos fluxos molares e na concentração molar de entrada (que é puro componente A):

$$\bar{u} = \frac{\Phi_A + \Phi_B}{(a + b)} = \frac{\Phi_A + \Phi_B}{a_{in}} \quad (29)$$

Os EDOs que governam o sistema são:

$$\frac{d\Phi_A}{dz} = -2k \frac{\Phi_A^2}{\bar{u}^2} = -2k \frac{a_{in}^2 \Phi_A^2}{(\Phi_A + \Phi_B)^2} \quad (30)$$

$$\frac{d\Phi_B}{dz} = k \frac{\Phi_A^2}{\bar{u}^2} = k \frac{a_{in}^2 \Phi_A^2}{(\Phi_A + \Phi_B)^2} \quad (31)$$

Essas equações são o ponto de partida para as soluções analíticas e numéricas.

Solução Analítica: Uma relação estequiométrica pode ser usada para eliminar Φ_B . Combine as duas EDOs para obter:

$$\frac{-d\Phi_A}{2} = d\Phi_B \quad (32)$$

A condição inicial é $\Phi_A = \Phi_{in}$ e $\Phi_B = 0$. Portanto,

$$\Phi_B = \frac{\Phi_{in} - \Phi_A}{2} \quad (33)$$

Substituindo isso na equação para \bar{u} , obtém-se uma única EDO:

$$\frac{d\Phi_A}{dz} = \frac{-8ka_{in}^2 \Phi_A^2}{(\Phi_A + \Phi_{in})^2} \quad (34)$$

que é uma equação variável-separável. Portanto,

$$\int_{\Phi_{in}}^{\Phi_A} \frac{(\Phi_A + \Phi_{in})^2}{\Phi_A^2} d\Phi_A = - \int_0^z 8ka_{in}^2 dz \quad (35)$$

Uma tabela de integrais (e uma substituição variável, $s = \Phi_A + \Phi_{in}$) fornece

$$\frac{\Phi_A}{\Phi_{in}} - \frac{\Phi_{in}}{\Phi_A} - 2 \ln \frac{\Phi_{in}}{\Phi_A} = \frac{-8ka_{in}^2 z}{\Phi_{in}} = \frac{-8ka_{in} z}{\bar{u}_{in}} \quad \blacksquare \quad (36)$$

A solução para o caso de densidade constante (não é o problema que resolvemos) é:

$$\frac{\Phi_A}{\Phi_{in}} = \frac{a}{a_{in}} = \frac{1}{1 + 2ka_{in} z / \bar{u}_{in}} \quad (37)$$

Voltando para a solução de interesse, Equação 35, essa solução é uma equação transcendental para Φ_A , que pode ser resolvida por sucessivas substituições até a convergência com uma tolerância pré-estabelecida. A fração que não reagiu é Φ_A/Φ_{in} . Fazendo $z = L$ pode-se obter o valor de Φ_A/Φ_{in} na saída do reator. Suponha que $\Phi_{in} = 1$ e $ka_{in}/\bar{u}_{in} = 1$ em algum sistema de unidades. A solução de interesse fornece que para $z = 0,3608$ o fluxo molar advectivo do componente A é $\Phi_A = 0,5$. A velocidade nesse ponto é $0,75 \bar{u}_{in}$.

A solução para densidade constante fornece que para $z = 0,5$ o fluxo molar advectivo do componente A é $\Phi_A = 0,5$ e a velocidade na saída não varia em relação a \bar{u}_{in} . O caso de densidade constante falha em levar em conta a redução de \bar{u} à medida que a reação ocorre, consequentemente o tempo de residência é sub-estimado.

Solução Numérica: Google Colab.

Esquema computacional para RFPs de fase gasosa: Um procedimento geral para resolver as equações de projeto do reator de fluxo de pistão usando a técnica de marcha adiante (método de Euler) tem sete etapas:

1. Escolha um tamanho de passo Δz :
2. Calcular valores iniciais para todas as variáveis, incluindo um chute para P_{in} . Valores iniciais são necessários para $a, b, c, \dots, i, \bar{u}, \Phi_A, \Phi_B, \Phi_C, \dots, \Phi_I, P$ e T , além das propriedades físicas como μ que são usadas nas equações auxiliares.
3. Dê um passo, calculando novos valores para $\Phi_A, \Phi_B, \Phi_C, \dots, \Phi_I, P$ e T em uma nova posição axial, $z + \Delta z$. As equações de marcha adiante para os fluxos molares têm a forma

$$(\Phi_A)_{new} = (\Phi_A)_{old} + \Delta z \mathcal{R}'_A [(\Phi_A)_{old}, (\Phi_B)_{old}, \dots, (\Phi_I)_{old}, z] \quad (38)$$

Os lados direito dessas equações são avaliados usando os valores antigos que correspondem à posição z . Uma solução semelhante do tipo Euler é usada para calcular P_{new} e eventualmente EDOs para a temperatura no caso não isotérmico.

4. Atualize \bar{u} usando:

$$\bar{u}_{new} = R_g T_{new} (\Phi_A + \Phi_B + \Phi_C + \dots + \Phi_I)_{new} / P_{new} \quad (39)$$

Observe que esta etapa usa a lei do gás ideal. Outras equações de estado podem ser substituídas.

5. Atualize todos os valores da propriedade física para as novas condições. As concentrações dos componentes são atualizadas usando

$$a_{new} = (\Phi_A)_{new} / \bar{u}_{new}, \quad b_{new} = (\Phi_B)_{new} / \bar{u}_{new}, \dots \quad (40)$$

6. Se $z < L$ vá até a etapa 3. Se $z \geq L$, o P_{out} está correto? Caso contrário volte até a etapa 2 e chute outro valor para P_{in}
7. Divida Δz por um fator de 2 e retorne à etapa 1. Repita até que os resultados converjam para 3 ou 4 algarismos significativos.

2.2 Reações em fase líquida

A solução das equações de projeto para reatores de fluxo de pistão em fase líquida é geralmente mais fácil do que para reatores em fase gasosa porque a pressão normalmente não afeta a densidade do fluido ou a cinética da reação. Pressões extremas são uma exceção que teoricamente pode ser manipulada pelos mesmos métodos usados para sistemas de fase gasosa. A dificuldade será encontrar uma equação de estado. Para pressões comuns, a densidade de massa pode geralmente ser estimada como uma simples função da composição. Isso leva ao uso fácil e direto da Equação 6, repetida agora:

$$Q\rho = Q_{in}\rho_{in} = A_c\bar{u}\rho = (A_c)_{in}\bar{u}_{in}\rho_{in} = \text{constante}$$

Esquema computacional para RFPs de fase líquida: A seguir, é apresentado um procedimento para resolver as equações de projeto do reator para um reator de fluxo de pistão de pressão moderada, em fase líquida, usando a técnica de marcha adiante (método de Euler):

1. Escolha um tamanho de passo Δz :
2. Calcular valores iniciais para todas as variáveis. Valores iniciais são necessários para $a, b, c, \dots, i, \rho, \bar{u}, \Phi_A, \Phi_B, \Phi_C, \dots, \Phi_I$ e T . A pressão pode ser incluída caso seja necessário, mas ela não afeta as reações.
3. Dê um passo, calculando novos valores para $\Phi_A, \Phi_B, \Phi_C, \dots, \Phi_I$ na nova posição axial, $z + \Delta z$. As equações de marcha adiante para os fluxos molares têm a forma

$$(\Phi_A)_{new} = (\Phi_A)_{old} + \Delta z \mathcal{R}'_A [(\Phi_A)_{old}, (\Phi_B)_{old}, \dots, (\Phi_I)_{old}, z] \quad (41)$$

Os lados direito dessas equações são avaliados usando os valores antigos que correspondem à posição z .

4. Atualize as concentrações dos componentes usando:

$$a_{new} = (\Phi_A)_{new} / \bar{u}_{old}, \quad b_{new} = (\Phi_B)_{new} / \bar{u}_{old}, \dots \quad (42)$$

5. Use essas novas concentrações para atualizar as propriedades físicas que aparecem nas equações auxiliares. Uma propriedade que deve ser atualizada é ρ .
6. Use o novo valor de ρ para calcular \bar{u} :

$$\bar{u}_{new} = \frac{\bar{u}_{in}\rho_{in}}{\rho_{new}} \quad (43)$$

7. Se $z < L$, volte à etapa 3. Se $z \geq L$, divida Δz por um fator de 2 e retorne à etapa 1. Repita até que os resultados converjam para 3 ou 4 algarismos significativos.



Bibliografia sobre Reatores

- Nauman, E. Bruce. Chemical reactor design, optimization, and scaleup. John Wiley & Sons, 2008.
- Chapra, Steven C. Surface water-quality modeling. Waveland press, 2008.
- Introdução à Engenharia Ambiental, Tradução da 2^a Ed. norte-americana. P. Aarne Vesilind, Susan M. Morgan; revisão técnica de Carlos Alberto de Moya Figueira Netto e Lineu Belico dos Reis. São Paulo, Cengage Learning, 2011.
- Princípios de Engenharia Ambiental. Mackenzie L. Davis, Susan J. Masten. 3a ed. Porto Alegre: AMGH, 2016.
- Engenharia Ambiental: Fundamentos, Sustentabilidade e Projeto. Mihelcic, James R., Julie Beth Zimmerman, and Ramira Maria Siqueira da Silva Pires. Grupo Gen-LTC, 2000.
- Mihelcic, James R. Fundamentals of environmental engineering. 1999.
- Scott A. Socolofsky & Gerhard H. Jirka. OCEN 475/677 : Special Topics in Mixing and Transport in the Environment (Environmental Fluid Mechanics)

Bibliografia sobre Equações Diferenciais Ordinárias

- Rice, Richard G., and Duong D. Do. Applied mathematics and modeling for chemical engineers. John Wiley & Sons, 2012.
- Greenberg, Michael D. Advanced engineering mathematics. Prentice-Hall, 1988.
- Butkov, Eugene. Física matemática. Livros Técnicos e Científicos, 1988.