



Aula 6: Reatores com cargas afluentes contínuas e não conservativas

Professor: Emílio Graciliano Ferreira Mercuri, D.Sc.
Departamento de Engenharia Ambiental - DEA,
Universidade Federal do Paraná - UFPR
emiliomercuri@gmail.com

No estudo de reações e reatores para aplicações em Engenharia Ambiental eventualmente nos deparamos com Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs). O Objetivo dessa aula é apresentar técnicas de resolução de EDOs e aplicá-las no estudo de reatores ideais que podem ter reações químicas e/ou biológicas ocorrendo no sistema.

No final deste documento há uma lista de bibliografias para o estudo de reatores e uma lista de livros para o estudo de equações diferenciais ordinárias. Encorajo os(as) discentes a consultar estes documentos, são materiais complementares recomendados para a disciplina EAMB7014.

1 Reatores

Estamos estudando 3 tipos de reatores ideais.

1. Reator de batelada
2. Reator de fluxo de pistão
3. Reator de mistura completa

Na última aula deduzimos o Método do Fator Integrante para resolução de EDOs.

Pontos importantes

A concentração $C = C(t)$ de uma substância no reator pode variar ao longo do tempo t (variável independente do problema) de acordo com a equação diferencial ordinária linear:

$$C' + p(t)C = q(t)$$

Solução geral do Método do Fator Integrante:

$$C(t) = e^{-\int p(t)dt} \left(\int e^{\int p(t)dt} q(t) dt + E \right)$$

A equação geral para o balanço de massa na abordagem diferencial é:

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_a - \dot{m}_e + \dot{m}_r$$

O lado esquerdo da equação mostra a taxa de variação a massa do sistema (ou volume de controle) ao longo do tempo: $\frac{dm}{dt}$. Do lado direito tem-se o fluxo de massa afluente ao reator \dot{m}_a , o fluxo de massa efluente ao reator \dot{m}_e e o termo que representa a taxa das reações químicas ou biológicas \dot{m}_r para produção ou destruição de massa dentro do reator.

1.1 Lançamento de cargas contínuas e não conservativas

Nessa subseção estudaremos reatores em que ocorre o lançamento de cargas não conservativas, ou seja, quando ocorrem reações químicas ou biológicas. Além disso, em alguns casos será adotada a hipótese simplificadora de reator completamente misturado.

1.1.1 Reator de batelada

O reator em batelada (ou estático) não possui nenhum fluxo de entrada nem de saída, conforme indica a Figura abaixo. Considera-se que o reator tem volume V e é completamente misturado.

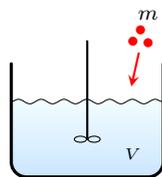


Figura 1: Reator de batelada

No início o reator tem um fluido e nesse fluido a concentração C de uma certa substância (marcador) é nula. No tempo t_0 é realizada a adição instantânea de uma substância que tem comportamento não conservativo, ou seja pode sofrer reações químicas com o fluido presente no reator. O marcador de massa m é adicionado ao volume V , sendo V o volume do fluido e do marcador, e portanto, em t_0 o reator tem concentração do marcador $C_0 = m/V$.

O balanço de massa é:

$$\frac{dm}{dt} = \cancel{\dot{m}_a} - \cancel{\dot{m}_e} + \dot{m}_r \quad (1)$$

Como o reator estático não tem fluxos afluentes e efluentes tem-se que:

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_r \quad (2)$$

e tem-se os mesmos casos já estudados quando trabalhamos com reações puras.

A concentração $C = m/V$ agora pode variar no tempo e o balanço de massa pode ser reescrito em termos de concentração.

Se o volume V é constante, a derivada de $m = CV$ é:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{dC}{dt} V \quad (3)$$

Substituindo a Equação 3 na Equação 2: Se o volume V é constante, a derivada de $m = CV$ é:

$$\frac{dC}{dt} V = rV \quad (4)$$

sendo que r é a taxa da reação, que varia de acordo com a ordem da reação: $r = \pm kC^m$.

Como já foi visto anteriormente no estudo de reações, para uma concentração do tipo massa por volume $[\frac{M}{L^3}]$, tem-se que:

$$\frac{dC}{dt} = \pm k C^m \quad (5)$$

sendo que: k é a constante da reação e m é a ordem da reação. As soluções da Equação 5 para os casos de reações de ordem zero, 1, 2 e não inteira são idênticas ao que foi estudado na Aula 3 da disciplina.

**Exemplo 1: Reator de Batelada com reação de 1ª ordem**

Considere um reator para remoção da coloração no tratamento de águas residuárias. O sistema de adsorção de cor em batelada opera com uma reação de primeira ordem sendo $k = 0,35 \text{ dia}^{-1}$. Qual o tempo para remoção de 90% da cor do efluente?

Solução:

Considere C a cor do efluente, que é uma medida da concentração de pigmentos. Como tem-se um processo de remoção, a constante k deve ser negativa, além disso, para a ordem da reação $m = 1$:

$$\frac{dC}{dt} = -k C^1$$

Cuja solução é:

$$C = C_0 e^{-kt}$$

Portanto, qual t para que $C = 0,1C_0$?

$$C = C_0 e^{-kt} \rightarrow \frac{C}{C_0} = e^{-kt} \rightarrow \ln \frac{C}{C_0} = -kt$$

$$t = -\frac{1}{k} \ln \frac{C}{C_0} = -\frac{1}{0,35} \ln \frac{0,1C_0}{C_0} = -\frac{1}{0,35} \ln 0,1 = 6,6 \text{ dias} \quad \blacksquare$$

1.1.2 Reator de fluxo de pistão

Um reator de fluxo de pistão (ou tubular), também chamado de reator de fluxo pistonado, é um reator ideal no qual se usa a simplificação de que o fluido é completamente misturado nas direções radial e angular. Além disso, considera-se que a velocidade do fluido é função apenas da posição axial no tubo.

O modelo de reator tipo fluxo de pistão é usado para aproximar o escoamento em tubos com alto número de Reynolds $Re = \frac{\rho v D}{\mu} = \frac{v D}{\nu}$. Sendo que v é a velocidade do fluido, D é o diâmetro do tubo, ρ é a densidade do fluido, μ é a viscosidade dinâmica e ν é a viscosidade cinemática do fluido. Escoamentos turbulentos tendem a misturar o fluido nas direções radial e angular. O perfil de velocidade nos escoamentos turbulentos é razoavelmente constante na direção radial, exceto perto da parede.

Dadas as hipóteses simplificadoras do reator tubular, é natural usar um disco fino para o elemento de volume do reator:

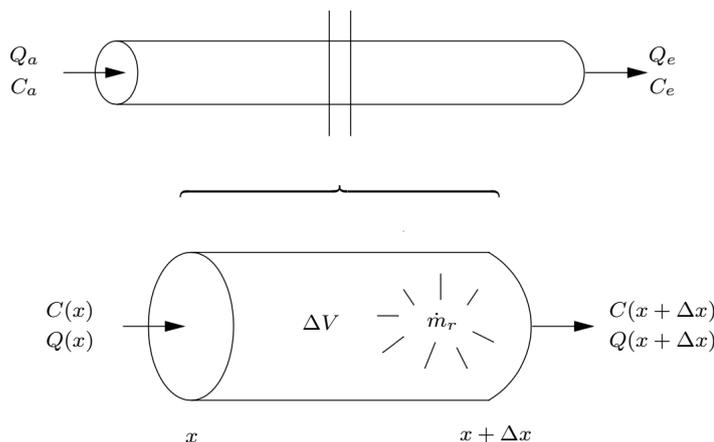


Figura 2: Reator de fluxo de pistão e elemento de volume (disco fino)

O balanço de massa para o elemento de volume é:

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_a - \dot{m}_e + \dot{m}_r \quad (6)$$

Fazendo $\dot{m}_r = r\Delta V$, sendo $r = \pm k C^m$

$$\frac{\partial(C\Delta V)}{\partial t} = CQ|_x - CQ|_{x+\Delta x} + r\Delta V \quad (7)$$

Dividindo a equação por ΔV e tomando o limite quando ΔV tende a zero, obtém-se:

$$\underbrace{\frac{\partial C}{\partial t}}_{\text{acumulação}} = - \underbrace{\frac{\partial(CQ)}{\partial V}}_{\text{advecção}} \pm \underbrace{k C^m}_{\text{reações}} \quad (8)$$

Se o tubo tem secção transversal constante, de área A_c , então a velocidade, v , está relacionada com a vazão por $v = Q/A_c$, e o comprimento axial está relacionado ao volume do tubo por $x = V/A_c$. Portanto, a equação pode ser rearranjada:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \frac{\partial(Cv)}{\partial x} \pm k C^m \quad (9)$$

Pode-se escolher representar o movimento do fluido usando as descrições euleriana ou lagrangeana do movimento. Na descrição euleriana é fixada uma “janela” no espaço e observa-se o fluido passando pela janela usando um sistema de eixos de referência fixo na janela para determinar a posição. Já na descrição lagrangeana é utilizado um sistema de eixos de referência que se movimenta com as partículas do fluido. Na descrição lagrangeana do movimento é muito útil utilizar a definição de derivada material:

$$\frac{DC}{Dt} \equiv \frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C \quad (10)$$

sendo ∇C o gradiente de concentração e \mathbf{u} o vetor velocidade.

Se a velocidade do fluido v na direção x for constante:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial(C)}{\partial x} = \pm k C^m \quad (11)$$



Pode-se usar o conceito de derivada material em um sistema referencial lagrangeano para escrever :

$$\frac{DC}{Dt} = \pm kC^m \quad (12)$$

A Equação 12 é exatamente igual às equações já estudadas no caso de reações puras, com a ressalva de que estamos num referencial lagrangeano. Além disso, se for realizada a leitura na secção final do tubo, o tempo se iguala ao tempo de retenção do reator e obtém-se as seguintes soluções:

- Reação de ordem zero: $C = C_0 \pm k\bar{t}$
- Reação de ordem 1: $C = C_0 e^{\pm k\bar{t}}$
- Reações de ordem superior e ordem não inteira ... (já foram discutidas em aula)

Repare no uso do tempo de retenção $\bar{t} = \frac{V}{Q}$ ao invés do tempo t , pois está se fazendo uma leitura na extremidade efluente do reator.

1.1.3 Reator de Mistura Completa (RMC)

O reator possui um fluxo de entrada e outro de saída, com vazão Q , conforme ilustrado na Figura 3. Como premissa assume-se que há mistura perfeita (homogênea) e instantânea após a adição de alguma substância.

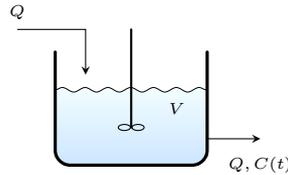


Figura 3: Reator de mistura completa

Para ilustrar o efeito de cargas contínuas e que podem sofrer reações químicas e/ou biológicas serão trabalhados exemplos.

Exemplo 2: RMC em regime permanente

Um RMC é usado para tratar um efluente líquido industrial empregando uma reação que destrói o poluente de acordo com a cinética de 1ª ordem. Dados:

- Constante da reação de 1ª ordem: $k = 0,216 \text{ dia}^{-1}$
- Volume do reator: $V = 500 \text{ m}^3$
- Vazão $Q_a = Q_e = Q = 50 \text{ m}^3/\text{dia}$
- Concentração afluente: $C_a = 100 \text{ mg/L}$

Considerando que o RMC está operando em regime permanente, qual a concentração efluente C ?

Solução:

Balanco de massa:

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_a - \dot{m}_e + \dot{m}_r \quad (13)$$

$$0 = QC_a - QC - VkC \quad (14)$$

$$C = C_a \frac{Q}{(Q + kV)} = 100 \frac{50}{(50 + 0,216(500))} = 32 \text{ mg/L} \quad \blacksquare \quad (15)$$

Exemplo 3: RMC em regime não permanente

Considere o mesmo reator do exemplo anterior, que estava operando em regime permanente. Esse reator, no tempo $t = 0$ passa a receber uma corrente afluente com a mesma vazão Q , porém com concentração de poluente nula $C_a = 0$. Em outras palavras, pense que o reator está sendo lavado com a mesma vazão de operação.

Quanto tempo leva para a concentração no tanque alcançar 10% do seu valor inicial? Por valor inicial entende-se a concentração do RMC em regime permanente.

Solução: Balanco de massa:

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_a - \dot{m}_e + \dot{m}_r \quad (16)$$

$$V \frac{dC}{dt} = 0 - QC - VkC \quad (17)$$

$$\frac{dC}{dt} = - \left(\frac{Q}{V} + k \right) C \quad \rightarrow \quad \int_{C_0}^{C_t} \frac{dC}{C} = - \int_0^t \left(\frac{Q}{V} + k \right) dt \quad (18)$$

$$C(t) = C_0 e^{-\left(\frac{Q}{V} + k\right)t} \quad (19)$$

$$\frac{C(t)}{C_0} = e^{-\left(\frac{Q}{V} + k\right)t} \quad (20)$$



$$\ln\left(\frac{C(t)}{C_0}\right) = \ln\left(e^{-\left(\frac{Q}{V}+k\right)t}\right) = -\left(\frac{Q}{V}+k\right)t \quad (21)$$

$$t = -\ln\left(\frac{C(t)}{C_0}\right) \left(\frac{V}{Q+Vk}\right) = -\ln\left(\frac{0,1 C_0}{C_0}\right) \left(\frac{V}{Q+Vk}\right) = 7,3 \text{ dias} \quad \blacksquare \quad (22)$$

Exemplo 4: RMC com reação de 1ª ordem

Um RMC opera com uma reação de 1ª ordem para destruição de uma substância, conforme ilustrado na Figura 4. A vazão de entrada é a mesma da saída, Q , a concentração afluenta C_a é constante, e a condição inicial é o reator com concentração C_0 . Obter a solução geral em função do tempo.

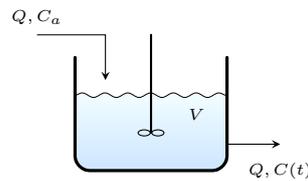


Figura 4: Reator de mistura completa

Solução: Balanço de massa:

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_a - \dot{m}_e + \dot{m}_r \quad (23)$$

$$V \frac{dC}{dt} = QC_a - QC - VkC \quad (24)$$

$$\frac{dC}{dt} + C \left(\frac{Q}{V} + k \right) = \frac{Q}{V} C_a \quad (25)$$

Usando as constantes $\alpha = \left(\frac{Q}{V} + k \right)$ e $\beta = \frac{Q}{V} C_a$ para simplificar a notação:

$$\frac{dC}{dt} + \alpha C = \beta \quad (26)$$

A solução geral da EDO $C' + p(t)C = q(t)$ já demonstrada pelo Método do Fator Integrante é:

$$C(t) = e^{-\int p(t)dt} \left(\int e^{\int p(t)dt} q(t) dt + E \right)$$

Identifica-se que $p(t) = \alpha$ e $q(t) = \beta$, portanto:

$$C(t) = e^{-\int \alpha dt} \left(\int e^{\int \alpha dt} \beta dt + E \right) = e^{-\alpha t} \left(\beta \frac{1}{\alpha} e^{\alpha t} + E \right) = \frac{\beta}{\alpha} + E e^{-\alpha t} \quad (27)$$

Para encontrar a constante de integração E , vamos usar a condição inicial: em $t = 0$ tem-se C_0 :

$$C_0 = \frac{\beta}{\alpha} + E \quad \rightarrow \quad E = C_0 - \frac{\beta}{\alpha} \quad (28)$$

Substituindo na solução:

$$C(t) = \frac{\beta}{\alpha} + \left(C_0 - \frac{\beta}{\alpha} \right) e^{-\alpha t} \quad (29)$$

Voltando para as variáveis do problema:

$$C(t) = \frac{\frac{Q}{V} C_a}{\left(\frac{Q}{V} + k \right)} + \left(C_0 - \frac{\frac{Q}{V} C_a}{\left(\frac{Q}{V} + k \right)} \right) e^{-\left(\frac{Q}{V} + k \right) t} \quad (30)$$

$$C(t) = \frac{QC_a}{(Q + kV)} + \left(C_0 - \frac{QC_a}{(Q + kV)} \right) e^{-\left(\frac{Q}{V} + k \right) t} \quad \blacksquare \quad (31)$$

Exemplo 5: RMC com reação de 2ª ordem (Riccati)

Um RMC opera com uma reação de 2ª ordem para destruição de uma substância, conforme ilustrado na Figura 5. A vazão de entrada é a mesma da saída, Q , a concentração afluenta C_a é constante, e a condição inicial é o reator com concentração C_0 . Obter a solução geral em função do tempo.

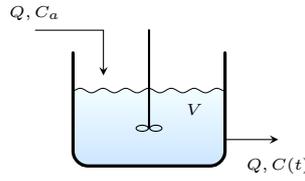


Figura 5: Reator de mistura completa

Solução: Balanço de massa:

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_a - \dot{m}_e + \dot{m}_r \quad (32)$$

$$V \frac{dC}{dt} = QC_a - QC - VkC^2 \quad (33)$$

$$\frac{dC}{dt} = -kC^2 - \frac{Q}{V}C + \frac{Q}{V}C_a \quad (34)$$

A Equação 34 é conhecida como Equação de Riccati, batizada em homenagem ao italiano Jacopo Francesco Riccati (1676-1754) nascido em Veneza. Trata-se de uma equação diferencial ordinária não linear, que não pode ser resolvida com a solução geral obtida pelo Método do Fator Integrante.

O caso mais geral da Equação de Riccati é:

$$y'_x = f(x)y^2 + g(x)y + h(x) \quad (35)$$

sendo $y'_x = \frac{dy}{dx}$.

Essa equação pode ser resolvida em alguns casos usando a substituição (referência na lista de links):

$$u(x) = \exp \left[- \int f(x)y(x)dx \right] \quad (36)$$

Essa substituição reduz a equação geral de Riccati a uma equação linear de segunda ordem:

$$f(x)u''_{xx} - [f'_x(x) + f(x)g(x)]u'_x + f^2(x)h(x)u = 0 \quad (37)$$

A Equação 34 é um caso particular da Equação de Riccati pois seus coeficientes são constantes. Reescrevendo a Equação 34 usando o inverso do tempo de retenção $\lambda = \frac{Q}{V}$ e $C_a = A$ para simplificar a notação:

$$\frac{dC}{dt} = -kC^2 - \lambda C + \lambda A \quad (38)$$

Identifica-se que $f = -k$, $g = -\lambda$ e $h = \lambda A$.

Portanto, podemos transformar a equação diferencial não linear de 1ª ordem em uma equação diferencial linear de 2ª ordem:

$$-k \frac{d^2u}{dx^2} - k\lambda \frac{du}{dx} + k^2\lambda Au = 0 \quad (39)$$

Dividindo por $-k$:

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \lambda \frac{du}{dx} - k\lambda Au = 0 \quad (40)$$

Vamos procurar uma solução na forma $u = e^{\alpha x}$.

$$\frac{du}{dx} = \alpha e^{\alpha x} \quad \frac{d^2u}{dx^2} = \alpha^2 e^{\alpha x} \quad (41)$$

∴ substituindo:

$$\alpha^2 e^{\alpha x} + \lambda \alpha e^{\alpha x} - k\lambda A e^{\alpha x} = 0 \quad (42)$$

$$\alpha^2 + \lambda \alpha - k\lambda A = 0 \quad (43)$$

A Equação 43 é conhecida como equação característica e pode ser resolvida usando a fórmula de Báskara:

$$\alpha = \frac{-\lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - 4(-k\lambda A)}}{2} = \frac{-\lambda \pm \sqrt{\lambda^2 + 4k\lambda A}}{2} \quad (44)$$

A equação característica possui duas raízes reais pois o radicando é positivo.



As duas raízes são:

$$\alpha_1 = \frac{-\lambda + \sqrt{\lambda^2 + 4k\lambda A}}{2} \quad (45)$$

$$\alpha_2 = \frac{-\lambda - \sqrt{\lambda^2 + 4k\lambda A}}{2} \quad (46)$$

A solução geral é:

$$u = C_1 e^{\alpha_1 x} + C_2 e^{\alpha_2 x} \quad (47)$$

Para voltar à variável y usaremos uma consequência da substituição de variáveis (ver exercício proposto):

$$y = \frac{1}{uk} \frac{du}{dx} \quad (48)$$

$$y = \frac{1}{k} \frac{1}{C_1 e^{\alpha_1 x} + C_2 e^{\alpha_2 x}} (C_1 \alpha_1 e^{\alpha_1 x} + C_2 \alpha_2 e^{\alpha_2 x}) \quad (49)$$

Voltando para $C(t)$: $x = t$ e $y(x) = C(t)$.

$$C = \frac{1}{k(C_1 e^{\alpha_1 t} + C_2 e^{\alpha_2 t})} (C_1 \alpha_1 e^{\alpha_1 t} + C_2 \alpha_2 e^{\alpha_2 t}) \quad (50)$$

sendo:

$$\alpha_{1,2} = -\frac{Q}{2V} \pm \frac{\sqrt{\left(\frac{Q}{V}\right)^2 + 4\frac{Q}{V}C_a k}}{2} \quad (51)$$

Dada a substituição utilizada:

$$u = e^k \int y dx \quad (52)$$

como $y = C$ e $x = t$, na condição inicial ($t = 0$) tem-se que

$$u = e^k \int C_0 dx = e^{kC_0} \int dt = e^0 = 1 \quad (53)$$

Aplicando a condição inicial $C(t = 0) = 0$ na Equação 47:

$$1 = C_1 + C_2 \quad (54)$$

$$C_1 = 1 - C_2 \quad (55)$$

Aplicando a condição inicial $C(t = 0) = C_0$ na Equação 50:

$$C_0 = \frac{1}{k(C_1 + C_2)} (C_1 \alpha_1 + C_2 \alpha_2) \quad (56)$$

Substituindo a Eq. 55 na Equação 56:

$$C_0 k ((1 - C_2) + C_2) = (1 - C_2) \alpha_1 + C_2 \alpha_2 = \alpha_1 - C_2 \alpha_1 + C_2 \alpha_2 \quad (57)$$

$$C_0 k = \alpha_1 + C_2 (\alpha_2 - \alpha_1) \quad (58)$$

$$C_2 = \frac{C_0 k - \alpha_1}{(\alpha_2 - \alpha_1)} \quad (59)$$

Gráfico da Equação 50:

Para as condições: $k = 0.5 \text{ m}^3/(\text{kg s})$, $V = 10$ litros, $Q = 1 \text{ m}^3/\text{s}$, $C_a = 2 \text{ mg/L}$ e $C_0 = 2.1 \text{ mg/L}$.

≡

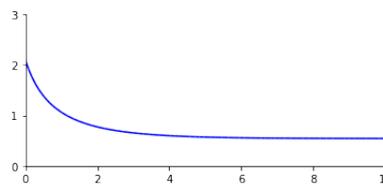


Figura 6: Resultado do Reator de Riccati

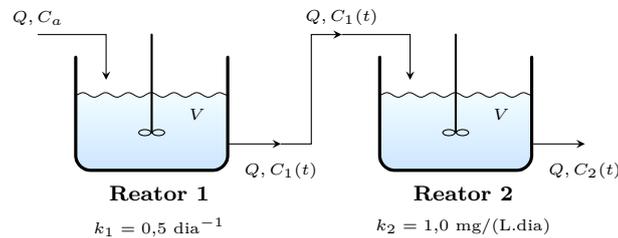


Código Python para fazer o gráfico do Exemplo 5 - Reator de Riccati:

```
1 from sympy import *
2 from sympy.plotting import plot
3 %matplotlib inline
4
5 C, C1, C2, t = symbols('C C1 C2 t')
6
7 #k = 0.1 # m3/(kg s)
8 k = 0.5 # m3/(kg s)
9 V = 10 # Litros
10 Q = 1 # m3/s
11 Ca = 2 # mg/L
12 C0 = 2.1 # mg/L
13
14 lamb = Q/V
15
16 alfa1 = -lamb/2 + sqrt(lamb**2 + 4*lamb*Ca*k)/2
17 alfa2 = -lamb/2 - sqrt(lamb**2 + 4*lamb*Ca*k)/2
18
19 u = C1*exp(alfa1*t) + C2*exp(alfa2*t)
20 print(u)
21
22 C2 = (C0*k-alfa1)/(alfa2-alfa1)
23 C1 = 1 - C2
24
25 C = 1/(k*( C1*exp(alfa1*t) + C2*exp(alfa2*t))) * (C1*alfa1*exp(alfa1*t) + C2*alfa2*
      exp(alfa2*t))
26 C = simplify(C)
27 print(C)
28
29 # Grafico do Resultado
30 #p = plot(C,(t, 0, 10), show=False, ylim = (-0.1,4.5))
31 p = plot(C,(t, 0, 10), show=False)
32 p[0].line_color = 'blue'
33 p.show()
```

Exemplo 6: RMC em série com reações

Um processo de tratamento de efluentes é composto de dois reatores completamente misturados em série para reduzir a concentração do poluente C . O primeiro reator opera com uma reação de 1ª ordem para destruição do poluente com a taxa $k_1 = 0,5 \text{ dia}^{-1}$. O segundo reator recebe o fluxo de saída do primeiro reator e consome o poluente através de uma reação de ordem zero com taxa $k_2 = 1,0 \text{ mg}/(\text{L.dia})$.



O volume dos dois reatores é 200 L e a vazão é 100 L/dia. Considere que a concentração afluyente ao primeiro reator é constante e igual a $C_a = 100 \text{ mg/L}$. Além disso, a concentração inicial dos dois reatores é $C_0 = 100 \text{ mg/L}$. Qual é a concentração de saída do Reator 2, C_2 , após 300 dias?

Solução

Fazendo o balanço de massa para o poluente C no Reator 1, tem-se que:

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_a - \dot{m}_e \pm \dot{m}_r$$

$$\frac{dC_1}{dt}V = QC_a - QC_1 - k_1C_1V$$

$$\frac{dC_1}{dt} + C_1 \left(\frac{Q}{V} + k_1 \right) = C_a \frac{Q}{V}$$

Fazendo $\beta = \frac{Q}{V} + k_1$

$$C_1' + \beta C_1 = C_a \frac{Q}{V}$$

Usando a técnica de fator integrante ($\times e^{\beta t}$):

$$e^{\beta t} (C_1' + \beta C_1) = C_a \frac{Q}{V} e^{\beta t}$$

$$(e^{\beta t} C_1)' = C_a \frac{Q}{V} e^{\beta t}$$

Integrando:

$$\int (e^{\beta t} C_1)' dt = \frac{Q}{V} C_a \int e^{\beta t} dt + A$$

$$e^{\beta t} C_1 = \frac{Q}{V} \frac{C_a}{\beta} e^{\beta t} + A$$

Dividindo por $e^{\beta t}$, tem-se:

$$C_1 = \frac{Q}{V} \frac{C_a}{\beta} + A e^{-\beta t}$$

Mas, quando $t = 0$, $C_1 = C_0 = C_a$, e podemos encontrar $A = C_0 - \frac{Q}{V} \frac{C_a}{\beta}$. Substituindo A e simplificando, tem-se a seguinte expressão, que é a solução para regime transiente da concentração do primeiro reator:

$$C_1(t) = \frac{Q}{V} \frac{C_a}{\beta} (1 - e^{-\beta t}) + C_0 e^{-\beta t}$$



Fazendo o balanço de massa para o poluente C no Reator 2, tem-se que:

$$\frac{dm}{dt} = \dot{m}_a - \dot{m}_e \pm \dot{m}_r$$

$$\frac{dC_2}{dt}V = QC_1 - QC_2 - k_2V$$

$$\frac{dC_2}{dt} + \frac{Q}{V}C_2 = \frac{Q}{V}C_1 - k_2$$

Fazendo $\alpha = \frac{Q}{V}$ e substituindo C_1 do primeiro Reator, tem-se:

$$\frac{dC_2}{dt} + \alpha C_2 = \alpha^2 \frac{C_0}{\beta} (1 - e^{-\beta t}) + C_0 e^{-\beta t} - k_2$$

Dada uma equação diferencial ordinária (EDO) de primeira ordem linear na forma:

$$\frac{dy}{dt} + p(t)y = q(t)$$

A solução geral é:

$$y(t) = e^{-\int p(t)dt} \left[\int e^{\int p(t)dt} q(t)dt + B \right]$$

Identificando $y(t) = C_2(t)$, $p = \alpha$ e $q(t) = \alpha^2 \frac{C_0}{\beta} (1 - e^{-\beta t}) + C_0 e^{-\beta t} - k_2$, a solução é:

$$C_2 = e^{-\int \alpha dt} \left\{ \int e^{\int \alpha dt} \left[\alpha^2 \frac{C_0}{\beta} (1 - e^{-\beta t}) + C_0 e^{-\beta t} - k_2 \right] dt + B \right\}$$

$$C_2 = e^{-\alpha t} \left\{ \int e^{\alpha t} \left[\alpha^2 \frac{C_0}{\beta} (1 - e^{-\beta t}) + C_0 e^{-\beta t} - k_2 \right] dt + B \right\}$$

$$C_2 = e^{-\alpha t} \left\{ \int e^{\alpha t} \alpha^2 \frac{C_0}{\beta} dt - \int \alpha^2 \frac{C_0}{\beta} e^{(\alpha-\beta)t} dt + \int C_0 e^{(\alpha-\beta)t} dt - \int k_2 e^{\alpha t} dt + B \right\}$$

$$C_2 = e^{-\alpha t} \left\{ \alpha^2 \frac{C_0}{\beta} \int e^{\alpha t} dt - \alpha^2 \frac{C_0}{\beta} \int e^{(\alpha-\beta)t} dt + C_0 \int e^{(\alpha-\beta)t} dt - k_2 \int e^{\alpha t} dt + B \right\}$$

$$C_2 = e^{-\alpha t} \left\{ \alpha^2 \frac{C_0}{\beta} \frac{1}{\alpha} e^{\alpha t} - \alpha^2 \frac{C_0}{\beta} \frac{1}{(\alpha-\beta)} e^{(\alpha-\beta)t} + C_0 \frac{1}{(\alpha-\beta)} e^{(\alpha-\beta)t} - k_2 \frac{1}{\alpha} e^{\alpha t} + B \right\}$$

$$C_2 = \alpha^2 \frac{C_0}{\beta} \frac{1}{\alpha} - \alpha^2 \frac{C_0}{\beta} \frac{1}{(\alpha-\beta)} e^{-\beta t} + C_0 \frac{1}{(\alpha-\beta)} e^{-\beta t} - k_2 \frac{1}{\alpha} + B e^{-\alpha t}$$

$$C_2 = \alpha \frac{C_0}{\beta} - k_2 \frac{1}{\alpha} + \left(1 - \frac{\alpha^2}{\beta} \right) \frac{C_0}{(\alpha-\beta)} e^{-\beta t} + B e^{-\alpha t}$$

Quando $t = 0$, $C_2 = C_0$:

$$C_0 = \alpha \frac{C_0}{\beta} - k_2 \frac{1}{\alpha} + \left(1 - \frac{\alpha^2}{\beta} \right) \frac{C_0}{(\alpha-\beta)} + B$$

Substituindo $\alpha - \beta = -k_1$ e isolando B :

$$B = C_0 - \alpha \frac{C_0}{\beta} + k_2 \frac{1}{\alpha} + \left(1 - \frac{\alpha^2}{\beta} \right) \frac{C_0}{(k_1)}$$

$$B = C_0 \left[1 - \frac{\alpha}{\beta} + \left(1 - \frac{\alpha^2}{\beta} \right) \frac{1}{(k_1)} \right] + k_2 \frac{1}{\alpha}$$



Substituindo valores, $\alpha = 0,5$, $\beta = 1,0$:

$$B = 100 [1 - 0,5 + (1 - 0,25) 2] + 2 = 100 [0,5 + (0,75) 2] + 2 = 202$$

Portanto:

$$C_2 = 50 - 2 - 200 (0,75) e^{-t} + 202e^{-t/2}$$

$$C_2 = 48 - 150e^{-t} + 202e^{-t/2} \quad \blacksquare$$

Conferindo as condições iniciais: para $t = 0$:

$$C_2 = 48 - 150 + 202 = 100 \text{ mg/L}$$

Para $t = 2$ dias:

$$C_2 = 48 - 150(0,1353352832366127) + 202(0,3678794411714423) = 102,01 \text{ mg/L}$$

Para $t = 300$ dias:

$$C_2 = 48 \text{ mg/L} \quad \blacksquare$$

**Exercícios propostos**

1) Deduzir a Equação 39 a partir de:

$$y'_x = -ky^2 - \lambda y + \lambda A \quad (60)$$

usando a substituição:

$$u = e^{k \int y dx} \quad (61)$$

Dica: isolar y da equação acima. Isso pode ser feito calculando o logaritmo neperiano dos dois lados da igualdade:

$$\ln u = k \int y dx \quad (62)$$

Derivando ambos os lados:

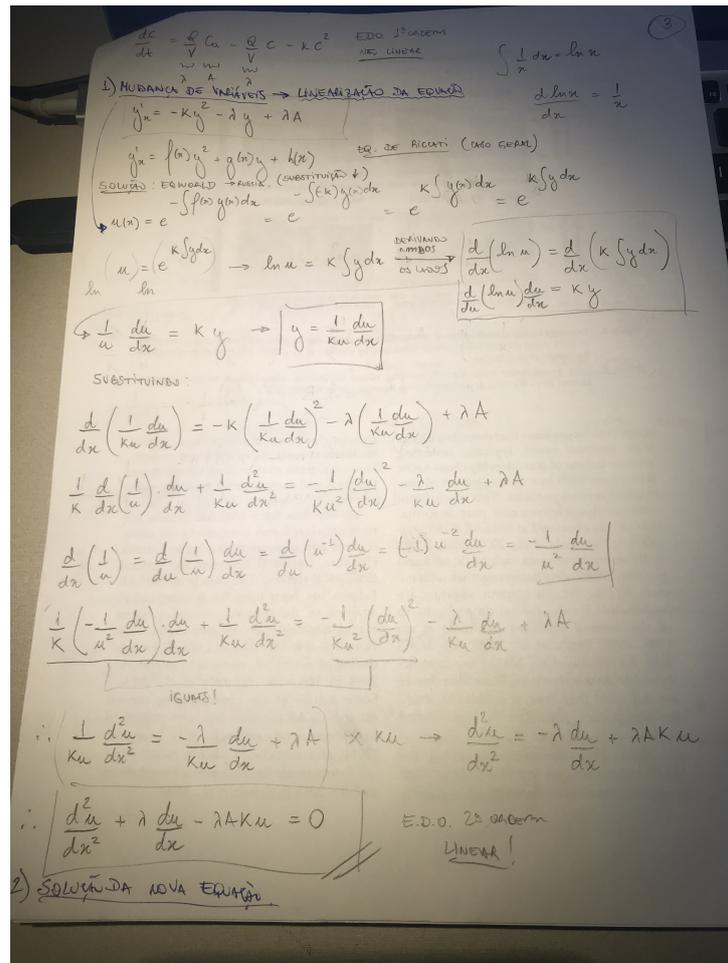
$$\frac{d}{dx} (\ln u) = \frac{d}{dx} \left(k \int y dx \right) \quad (63)$$

Usando a regra da cadeia e simplificando:

$$\frac{d}{du} (\ln u) \frac{du}{dx} = ky \quad (64)$$

$$\frac{1}{u} \frac{du}{dx} = ky \quad (65)$$

$$y = \frac{1}{uk} \frac{du}{dx} \quad (66)$$

**Figura 7:** Solução do Exercício Proposto



2) Fazer um gráfico comparando os resultados do Exemplo 4 e do Exemplo 5. Qual a diferença na evolução da concentração de um RMC com reação de primeira para segunda ordem?

Solução:

A linha azul escuro representa a reação de 2a ordem e a linha azul claro a reação de 1a ordem.

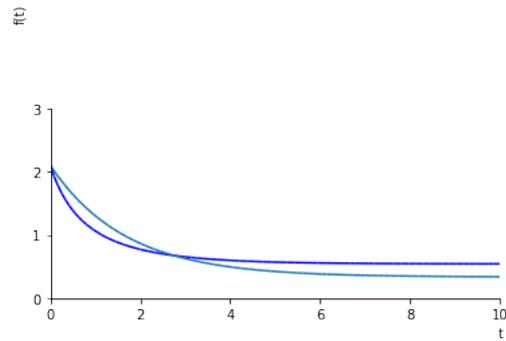


Figura 8: Solução do Exercício Proposto



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 2ª 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.

Links úteis

- Derivada Material: https://en.wikipedia.org/wiki/Material_derivative
- Solução da Equação de Riccati: <http://eqworld.ipmnet.ru/en/solutions/ode/ode0123.pdf>