

Produção de clorofórmio em reator PFR: modelagem matemática e simulação computacional

DOI: 10.5281/zenodo.19893408

Hellen Ferreira da Silva ^{a*}

This work presents a scientific review of the mathematical modeling of chloroform production in a steady-state plug flow reactor. The study is based on simplifying partial differential equations into ordinary differential equations, assuming first-order kinetics and no accumulation. The results show good agreement with experimental data for chloride consumption along the reactor. However, discrepancies were observed in predicting chloroform consumption, mainly due to model simplifications, such as neglecting parallel reactions and complex transport effects. It is concluded that mathematical modeling is a useful tool for preliminary analysis and process optimization, despite its limitations.

Este trabalho apresenta uma resenha científica sobre a modelagem matemática da produção de clorofórmio em reator de fluxo pistonado em regime estacionário. O estudo baseia-se na simplificação de equações diferenciais parciais em equações ordinárias, considerando reação de primeira ordem e ausência de acúmulo. Os resultados indicam boa concordância com dados experimentais para o consumo de cloreto ao longo do reator. Contudo, foram observadas discrepâncias na previsão do consumo de clorofórmio, atribuídas às simplificações do modelo, como a desconsideração de reações paralelas e efeitos de transporte mais complexos. Conclui-se que a modelagem matemática é uma ferramenta útil para análises preliminares e otimização de processos, apesar de suas limitações.

^aUniversidade de Brasília (UnB). Campus Darcy Ribeiro. Instituto de Química (IQ/UnB).

*E-mail: hellenferreiradf@gmail.com

Palavras-chave: PFR; clorofórmio; modelagem; simulação.

Recebido em 11 de abril de 2026,

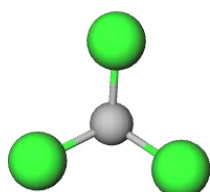
Aprovado em 26 de abril de 2026,

Publicado em 30 de abril de 2026.

Introdução

A produção de compostos químicos em escala industrial está diretamente associada ao domínio dos fenômenos de transporte, da cinética química e do projeto adequado de reatores.¹ Entre os diversos produtos de interesse industrial, o clorofórmio (CHCl₃) destaca-se por sua ampla aplicação como solvente em análises laboratoriais, além de atuar como intermediário na síntese de outros compostos relevantes, como o tetracloreto de carbono e fluidos refrigerantes.² Dessa forma, a compreensão dos mecanismos envolvidos em sua produção é essencial para garantir eficiência, segurança e viabilidade econômica nos processos industriais.

Figura 1. Estrutura do Clorofórmio (CHCl₃)



A produção de clorofórmio ocorre, majoritariamente, por meio de reações sucessivas de cloração de compostos derivados do metano, envolvendo etapas complexas que podem gerar diferentes subprodutos dependendo das condições operacionais.³ Nesse contexto, fatores como temperatura, pressão, tempo de residência e configuração do reator influenciam diretamente a conversão e seletividade do processo. Assim, a análise detalhada dessas variáveis torna-se indispensável para a otimização do sistema reacional.

Diante dessas complexidades, a modelagem matemática surge como uma ferramenta fundamental na engenharia química, permitindo a descrição quantitativa do comportamento de sistemas reacionais por meio de equações que representam balanços de massa, energia e quantidade de movimento. A partir desses modelos, torna-se possível prever o desempenho de processos sob diferentes condições operacionais, reduzindo a necessidade de experimentação direta, o que implica menor custo e maior segurança operacional.⁴

Além disso, a simulação computacional, aliada à modelagem matemática, possibilita a análise de cenários diversos de forma rápida e eficiente, contribuindo para o

desenvolvimento e otimização de processos industriais.⁴ No caso de reatores químicos, modelos baseados em equações diferenciais são amplamente utilizados para descrever variações espaciais e temporais das concentrações das espécies envolvidas, sendo os reatores de fluxo pistonado (PFR) particularmente relevantes devido à sua aplicabilidade em sistemas gasosos e sua elevada eficiência em promover reações com altos graus de conversão.⁵

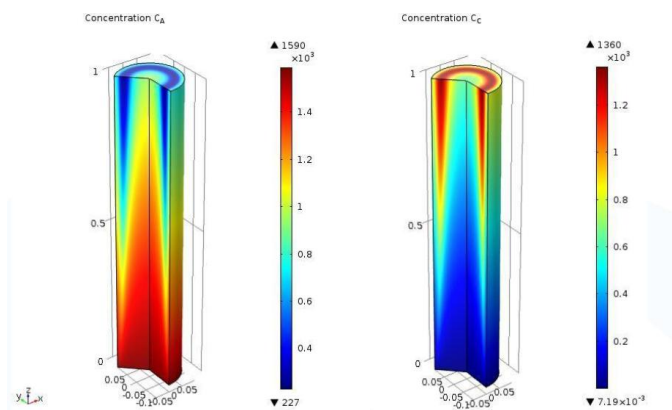
Nesse contexto, o trabalho de Guerreiro, H. M. *et al* propõe a utilização de um modelo matemático simplificado para descrever a produção de clorofórmio em um reator PFR operando em regime estacionário.⁴ A abordagem consiste na redução de equações diferenciais parciais para equações diferenciais ordinárias, facilitando a obtenção de soluções analíticas e a implementação computacional. Tal simplificação permite avaliar o comportamento do sistema com menor custo computacional, ao mesmo tempo em que mantém uma representação adequada dos fenômenos principais.

Portanto, este trabalho tem como objetivo analisar o estudo proposto, destacando seus fundamentos teóricos, metodologia empregada, principais resultados e limitações. Busca-se, assim, compreender a aplicabilidade da modelagem matemática como ferramenta de análise e otimização de processos químicos, evidenciando suas contribuições e restrições no contexto da engenharia química.

Metodologia

A presente resenha científica foi elaborada com base na análise de um estudo que aborda a modelagem matemática e a simulação computacional da produção de clorofórmio em um reator químico de fluxo pistonado (*Plug Flow Reactor* – PFR), operando em regime estacionário.⁴ A metodologia do trabalho original fundamenta-se na aplicação de princípios clássicos da engenharia química, especialmente aqueles relacionados aos balanços de massa, fenômenos de transporte e cinética das reações químicas.

Figura 2. Esquema de um reator de fluxo pistonado (perfil de concentração ao longo do comprimento). Extraído da referência 4.



Inicialmente, o modelo matemático foi construído a partir de equações diferenciais parciais (EDPs), que descrevem o comportamento das concentrações das espécies químicas ao longo do reator, considerando os efeitos combinados de convecção, difusão e reação. Essas equações são derivadas do balanço de massa (Equação 1) aplicado a um elemento diferencial de volume no interior do reator, permitindo representar a variação espacial e temporal das propriedades do sistema.^{6,7}

$$\text{Entrada} - \text{Saída} + \text{Geração} - \text{Consumo} = \text{Acumulado} \quad (1)$$

Com o objetivo de simplificar a resolução do modelo e reduzir a complexidade computacional, adotou-se a hipótese de regime estacionário (Equação 2), na qual o termo de acúmulo é desprezado. Essa consideração permite a transformação das equações diferenciais parciais em equações diferenciais ordinárias (EDOs), facilitando a obtenção de soluções analíticas para o perfil de concentração das espécies ao longo da coordenada axial do reator.^{4,7}

$$C_A = C_{A_0} e^{-\frac{v}{D_{AB}} \sqrt{\left(\frac{v}{D_{AB}}\right)^2 + 4 \frac{k_1}{D_{AB}}} \frac{z}{2}} \quad (2)$$

Adicionalmente, foram assumidas algumas hipóteses simplificadoras, entre as quais destacam-se: comportamento ideal do escoamento em regime pistonado; ausência de mistura axial significativa; reação química de primeira ordem dependente de um único reagente limitante e negligência de efeitos associados a reações paralelas e mecanismos radiculares. Tais suposições são comuns em modelagens iniciais, pois permitem capturar os principais fenômenos do

sistema sem comprometer excessivamente a viabilidade da solução.⁴

Os parâmetros operacionais utilizados na modelagem, como temperatura, pressão, vazão mássica, concentração inicial dos reagentes, velocidade de escoamento e coeficiente de difusividade, foram obtidos a partir de dados da literatura, garantindo consistência e comparabilidade com estudos experimentais previamente realizados. Esses parâmetros são fundamentais para a resolução das equações e influenciam diretamente os perfis de concentração e as taxas de reação ao longo do reator.

A solução do modelo matemático foi implementada com o auxílio do software *Engineering Equation Solver* (EES), uma ferramenta amplamente utilizada na resolução de sistemas de equações não lineares e na simulação de processos de engenharia. O uso desse software possibilitou a obtenção de resultados gráficos que representam o comportamento das espécies químicas ao longo do reator, permitindo a análise qualitativa e quantitativa do sistema.

Por fim, os resultados obtidos por meio da modelagem foram comparados com dados experimentais disponíveis na literatura, utilizando-se métricas de erro percentual para avaliar a precisão do modelo. Essa etapa é essencial para validar a aplicabilidade da abordagem proposta, bem como para identificar possíveis limitações decorrentes das simplificações adotadas.

Resultados e discussão

Os resultados obtidos a partir da modelagem matemática evidenciam que o modelo proposto é capaz de descrever, de forma consistente, o comportamento do consumo de cloreto ao longo do reator de fluxo pistonado. Observa-se que a concentração do reagente decresce acentuadamente nos primeiros trechos do reator, indicando uma elevada taxa de reação inicial. Esse comportamento está de acordo com o esperado para sistemas reacionais com cinética de primeira ordem, nos quais a taxa de consumo é proporcional à concentração do reagente, resultando em maior intensidade reacional nas regiões próximas à entrada.⁴

A comparação entre os dados simulados e os resultados experimentais disponíveis na literatura demonstra uma boa concordância qualitativa no perfil de consumo do cloreto, especialmente no que se refere à posição ao longo do reator onde ocorre seu esgotamento. Tal resultado reforça a validade da abordagem adotada, indicando que o modelo,

mesmo simplificado, é capaz de capturar os principais fenômenos associados ao transporte e à reação química no sistema.^{4,8}

Figura 3. Comparação do comportamento do sistema modelado em estado estacionário (Gráfico da modelagem matemática). Extraído da referência 4.

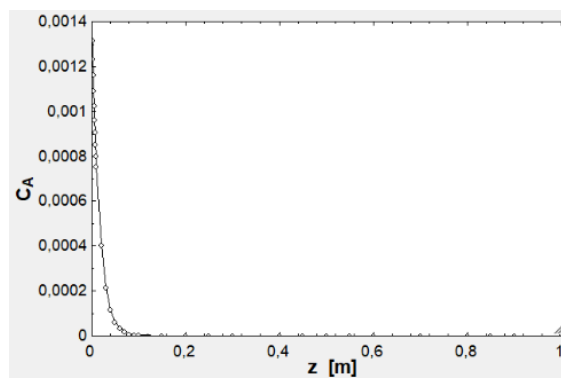
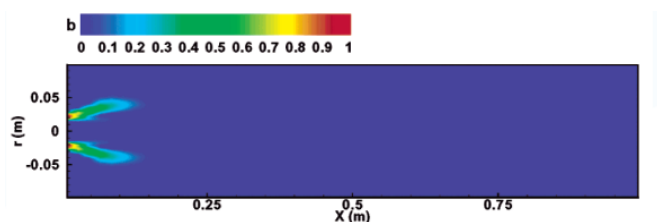


Figura 4. Comparação do comportamento do sistema modelado em estado estacionário (Resultado experimental). Extraído da referência 4.



Entretanto, ao analisar o comportamento do clorofórmio, observam-se discrepâncias relevantes entre os resultados simulados e os dados experimentais. O modelo prevê um consumo mais acentuado desse composto ao longo do reator, resultando em concentrações residuais significativamente inferiores às observadas experimentalmente. Essa diferença pode ser atribuída, principalmente, às simplificações inerentes ao modelo matemático adotado.⁴

Dentre as limitações, destaca-se a consideração de apenas uma reação global de formação do clorofórmio, desconsiderando a presença de reações paralelas e consecutivas que ocorrem no sistema real. Na prática, o processo de cloração envolve uma rede complexa de reações, incluindo a formação de subprodutos como o tetracloreto de carbono, que consomem o clorofórmio formado e alteram significativamente o balanço global de espécies. A ausência

dessa rede reacional no modelo contribui para a superestimação do consumo do produto.^{4,9}

Outro fator relevante diz respeito à representação dos fenômenos de transporte, especialmente a difusão. O modelo utiliza valores de difusividade simplificados, o que pode não refletir adequadamente o comportamento real das espécies no meio reacional, sobretudo em sistemas gasosos com interações multicomponentes.⁴ Pequenas variações nesses parâmetros podem resultar em mudanças significativas nos perfis de concentração, evidenciando a sensibilidade do modelo às propriedades físico-químicas adotadas.

Além disso, o modelo assume condições ideais de escoamento em regime pistonado, negligenciando possíveis efeitos de dispersão axial, não uniformidades de velocidade e limitações de mistura. Em sistemas reais, tais efeitos podem influenciar a distribuição de concentração ao longo do reator, afetando diretamente as taxas de reação e a formação de produtos. A ausência dessas considerações contribui para o afastamento entre os resultados simulados e experimentais.

A influência das condições operacionais também deve ser destacada. Estudos experimentais indicam que fatores como pré-mistura dos reagentes e forma de alimentação impactam significativamente o desempenho do reator.^{4,9} No entanto, essas variáveis não são plenamente incorporadas no modelo simplificado, limitando sua capacidade de reproduzir com exatidão o comportamento do sistema real.

Apesar dessas limitações, o modelo apresenta vantagens importantes, como a simplicidade de implementação e o baixo custo computacional. Tais características tornam a abordagem particularmente útil em etapas iniciais de análise e projeto de processos, permitindo a realização de estudos paramétricos e a identificação de tendências de comportamento do sistema.

De forma geral, os resultados indicam que a modelagem matemática em regime estacionário é eficaz para descrever qualitativamente o processo de produção de clorofórmio, especialmente no que se refere ao consumo de reagentes. Contudo, para uma representação quantitativa mais precisa, faz-se necessária a incorporação de maior complexidade ao modelo, incluindo múltiplas reações, efeitos de transporte mais realistas e validações experimentais adicionais.

Conclusões

A análise do estudo evidenciou que a modelagem matemática aplicada à produção de clorofórmio em reator de fluxo pistonado constitui uma ferramenta relevante para a compreensão do comportamento de sistemas reacionais. O modelo desenvolvido, baseado na simplificação de equações diferenciais e na adoção do regime estacionário, mostrou-se eficiente na descrição qualitativa do consumo de reagentes, especialmente do cloreto, apresentando boa concordância com dados experimentais disponíveis na literatura.

Entretanto, foram identificadas limitações significativas na capacidade do modelo em prever com precisão o comportamento do clorofórmio ao longo do reator. Essas discrepâncias estão diretamente associadas às simplificações adotadas, como a consideração de uma única reação global, a negligência de mecanismos reacionais mais complexos e a ausência de efeitos detalhados de transporte e mistura. Tais fatores evidenciam que, embora o modelo seja útil para análises iniciais, sua aplicação em previsões quantitativas mais rigorosas é limitada.

Apesar disso, destaca-se que a simplicidade do modelo representa uma vantagem importante, permitindo sua utilização em estudos preliminares, análises paramétricas e no ensino de conceitos fundamentais de engenharia química. A abordagem adotada possibilita compreender tendências do sistema com baixo custo computacional, sendo especialmente útil em contextos acadêmicos.

Por fim, recomenda-se que trabalhos futuros incorporem maior complexidade ao modelo, incluindo redes reacionais mais completas, efeitos de difusão multicomponente e validações experimentais adicionais. Tais aprimoramentos poderão ampliar a precisão e a aplicabilidade da modelagem, contribuindo de forma mais robusta para o desenvolvimento e otimização de processos industriais.

Contribuições por Autor

A resenha sobre o artigo em referência e a inclusão de observações são de Hellen Ferreira da Silva.

Conflito de interesse

Não há conflito de interesses.

Agradecimentos

Ao grupo PET-Química/IQ/UnB, à Secretaria de Educação Superior do Ministério da Educação (SeSU/MEC) e ao Decanato de Ensino de Graduação (DEG/UnB) pelo apoio ao Programa de Educação Tutorial pela bolsa concedida. Ao Instituto de Química (IQ/UnB) e à Universidade de Brasília pelo suporte e espaço fornecidos.

Notas e referências

- 1 Kurtz, B. E. Homogeneous kinetics of methyl chloride chlorination. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 1972, **11**, 332–338.
- 2 Raman, V. et al. Effect of feed-stream configuration on gas-phase chlorination reactor performance. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2003, **42**, 2544–2557.
- 3 Luyben, W. L. *Process modeling, simulation, and control for chemical engineers*. 1996, **2**.
- 4 Guerreiro, H. M.; Fonseca Júnior, E. Q.; Rossi, A. S. Modelagem matemática e simulação computacional da produção de clorofórmio em reator químico de estado estacionário. *Revista Observatorio de la Economía Latinoamericana*, 2025, **23**.
- 5 Fogler, H. S. *Elementos das reações químicas*, 2009, **4**.
- 6 Li, W. et al. Multicomponent diffusion of F, Cl and OH in apatite with application to magma ascent rates. *Earth and Planetary Science Letters*, 2020, **550**.
- 7 Boyce, W. E.; DiPrima, R. C. Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno. *10 ed. Rio de Janeiro: LTC*, 2015, **10**.
- 8 Windholz, M. et al. The Merck Index. *10. ed. Rahway: Merck*, 1983.
- 9 Brunetti, F. Mecânica dos fluidos. *2. ed. São Paulo: Pearson*, 2008.
- 10 Cremasco, M. A. Fundamentos de transferência de massa. *2. ed. São Paulo: Blucher*, 2016.
- 11 Dantas, J. H. A. Síntese de catalisadores e concepção de reator para reações de cloração do gás natural. *Natal: UFRN*, 2005.