



PQI 3221:
CINÉTICA QUÍMICA E PROCESSOS AMBIENTAIS

AULA 01

1

OBJETIVOS E EXPECTATIVAS DA PQI 3221

Objetivos de Conhecimento

- Conhecer conceitos associados a balanços de matéria em sistemas antrópicos
- Absorver conteúdos relacionados a atividades cinéticas químicas e biológicas

Objetivos de Habilidades

- Resolver balanços de matérias envolvendo diferentes situações e circunstâncias, níveis de aprofundamento, e regimes de operação
- Identificar aspectos cinéticos associados a cinética biológica, e interpretar efeitos que condicionem seu desenvolvimento
- Formular problemas a partir de dados diversos (e nem sempre organizados) e equacionar a solução dos mesmos

Objetivos de Atitudes

- Incorporar a lógica exercitada para solução de balanço materiais às situações que surjam em outras áreas do conhecimento
- Exercitar o senso crítico, a ótica sistêmica, e o raciocínio analítico

2

PARTE 1 — BALANÇOS MACROSCÓPICOS DE MATÉRIA EM SISTEMAS SEM E COM REAÇÃO QUÍMICA

- Conceitos preliminares: base de cálculo, quantidade de matéria, concentração, fração (ou título) e razão. Vazão vs. Fluxo. Vizinhança, fronteira e volume de controle. Regimes Estacionário e Transiente
- Equações globais de conservação
- Balanços de massa: global e por espécies químicas em processos de mistura e separação. Efeito de *scale-up*
- Conceito de nós. Balanços materiais em sistemas com Reciclo, by-pass e purga
- Fundamentos de estequiometria. Reagentes limitante e em excesso. Grau de conclusão. Conversão Global e por Passe. Rendimento. Seletividade
- Balanços de matéria em sistemas macroscópico com reação química: processos de combustão. Sistemas com reciclo. Conceitos de Conversão Global e de Conversão por Passe

3

PARTE 2 — CINÉTICA QUÍMICA E BALANÇOS MICROSCÓPICOS EM SISTEMAS REACIONAIS IDEAIS

- Cinética Química: Revisão de Fundamentos: Velocidade de reação. Reações de 1ª. e 2ª. Ordem. Reações de Ordem Zero. Tempo de meia-vida
- Efeitos físicos e químicos sobre a velocidade de reação. Equação de Arrhenius
- Reatores ideais. Conceitos preliminares: conversão. Concentração molar. Vazão (ou velocidade) molar. Conversão para processos contínuos. Tipos de Reatores: *Batch*, Mistura Contínua (*CSTR*), e Tubular (*PFR*). Balanços de matéria.
- Balanços de massa microscópicos em reatores ideais: *Batch*, *CSTR* e *PFR*. Princípios e condições de contorno
- Diluição em sistemas contínuos e descontínuos. Conceito e Balanços de massa

4

PARTE 3 – MECANISMOS DE REAÇÃO E CINÉTICA ENZIMÁTICA

- Sistemas multireacionais: Mecanismos de Reação
- Cinética Enzimática: Sistema Unirreacional Simples
- Biodigestão enzimática: modelos enzima-substrato. Ordem de reação em sistemas biocatalisados
- Modelo de Michaelis-Menten: conceito, condições de contorno. Métodos de Linearização.
- Número de Renovação e Constante de Especificidade
- Efeitos físico-químicos sobre a Biodigestão de substratos: temperatura, pH, agentes externos
- Inibição enzimática: Tipos. Mecanismos de ação. Métodos de Linearização.

5

BIBLIOGRAFIA

- HIMMELBLAU, DM. Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering (International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences) 8th Ed. Pearson, 2018. 953p.
- FELDER RM, ROUSSEAU RW. Elementary Principles of Chemical Processes, 4th Ed. Wiley, 2020, 704p.
- REKLAITIS GV. Introduction to material and Energy Balances. 1st Ed. Wiley, 1983. 704p.
- FOGLER HS. Elements of Chemical Reaction Engineering (International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences) 6th Ed. Pearson, 2020. 1088 p.
- LEVENSPIEL O. Engenharia das Reações Químicas, 3^a. Ed. Blücher, 2000. 584p.
- BAILEY JE, OLLIS DF. Biochemical Engineering Fundamentals, 2nd Ed. McGraw-Hill, 1986. 928p.
- RATLEDGE C, KRISTIANSEN B. Basic Biotechnology, 3rd Ed. Cambridge, 2006. 679p.
- Notas de aula

6

MECANISMO DE AVALIAÇÃO

A edição atual da PQI 3221 aplicará avaliações individuais para medir o aproveitamento dos estudantes

02 (dois) provas (curso seriado)

P_1 : Balanços Macroscópicos de Matéria em Sistemas Físicos e com Reação e Fundamentos de Cinética Química

P_2 : Balanços de Massa em Reatores Ideais, Mecanismos de Reação e Cinética Enzimática

As Datas e Horários dos exames seguem o calendário estabelecido pelo Biênio. São elas:

Prova	Data	Horário	Local
P_1	17.05.2023	15h40 – 17h40	
P_2	07.07.2023	10h00 – 12h00	Locais a serem definidos futuramente
P_s	14.07.2023	10h00 – 12h00	
REC	21.07.2023	10h00 – 12h00	

7

CRITÉRIOS PARA APROVAÇÃO

Média (M):

$$M = \left[\frac{(2P_1 + 3P_2)}{5} \right]$$

Onde:

P_i = Notas obtidas nas provas regulares da disciplina

Prova Substitutiva:

A disciplina proporciona a todos os estudante **não** aprovados com resultados das P_1 e P_2 a realização de uma Prova Substitutiva (P_s)

A (P_s) repõe o resultado de qualquer das avaliações anteriores usando como critério de substituição o de proporcionar a melhor média acumulada de aproveitamento

Frequência (F):

Serão considerados suficientes em termos de frequência, os estudantes cuja assiduidade às aulas for $F \geq 70\%$

8

CONCEITOS INTRODUTÓRIOS

9

CONCEITOS PRELIMINARES: BASES DE CÁLCULO

BASE DE CÁLCULO: referência **arbitrária** a partir da qual são realizados cálculos e determinações necessários à solução de um problema (por exemplo, de engenharia)

Quanto ao conteúdo, a base de cálculo pode ser, por exemplo, um INTERVALO DE TEMPO (expresso em **horas**, **segundos**, etc.). Outra possibilidade, inclusive mais convencional é de adotar-se certa QUANTIDADE DE MATÉRIA (definida em **kg**, **mols**, etc.) de uma espécie química

Exemplo 1:

Fixar uma base de cálculo temporal de **t = 1h**, significa que as quantidades envolvidas no fenômeno em estudo (consumos, coprodutos, emissões, etc.) de matéria e energia serão estimados para um período de duração de **1h**

Exemplo 2:

Ter uma base de cálculo de quantidade de massa correspondente a produção de **100 kg A**, significa que as demais quantidades envolvidas no fenômeno (mais uma vez, sob a forma de consumos, emissões, produtos, etc.) serão estimadas para que sejam obtidos **100 kg do produto A**

10

MÉTODO DE SELEÇÃO DE BASES DE CÁLCULO

A escolha de uma base de cálculo adequada tende a simplificar a solução do problema. Este processo compreende as seguintes ações:

- i. Definição de uma quantidade;
- ii. Seleção de um agente envolvido no processo (p.e: corrente de matéria ou energia, que entra ou sai de um sistema; reagente, ou produto de certa transformação; índice de desempenho que se deseja determinar) para o qual a quantidade definida em (i) será atribuída;
- iii. Expressão da base de cálculo segundo uma unidade conveniente (p.e.: litros, mols, kg, seg., etc.), de forma que esta possa ser harmônica com outros parâmetros do sistema, processo, ou mesmo do equipamento em análise
- iv. Importante: **não** é conveniente, muito embora seja possível, estabelecer mais do que uma Base de Cálculo para a especificação/solução de um problema

11

MÉTODO DE SELEÇÃO DE BASES DE CÁLCULO

Algumas vezes, pode ser mais proveitoso e efetivo empregar uma base de cálculo UNITÁRIA (expressa de forma adequada e conveniente em termos de unidades): **1,0 kg, 1,0 m³, 1,0 mol, 1h**

Outra alternativa, também de uso frequente, consiste em aplicar bases de cálculo CENTESIMAIS: **100 t, 100 mol**, ou mesmo, 90% de eficiência

Não é uma regra geral, mas sim, convenção,

- a) Adotar bases de cálculo em termos **mássicos** (kg, lb, ...) para **sistemas líquidos e/ou sólidos**
- b) Expressar a base de em termos de **quantidade de matéria** (mol, lb-mol) ou de pressão (atm, bar) para **sistemas gasosos**
- c) Propor a base de cálculo em termos de **quantidade de matéria** para sistemas envolvendo **reações químicas**

Essas opções se justificam no fato de que as FRAÇÕES ou PERCENTAGENS resultantes da análise se igualam automaticamente ao número de quilos e libras (caso a), e de mols (casos b e c) economizando uma etapa de cálculos e coibindo erros

12