



PQI 3221:
CINÉTICA QUÍMICA E PROCESSOS AMBIENTAIS

AULA 02

CONCEITOS INTRODUTÓRIOS

MÉTODO DE SELEÇÃO DE BASES DE CÁLCULO

Uma forma cartesiana, ordenada, e objetiva de selecionar a base de cálculo consiste de responder as seguintes perguntas:

- 1) O que quero determinar com esses cálculos (ou seja: com o balanço material)?
- 2) Para quais condições pretendo realizar as estimativas?
- 3) Preciso estabelecer uma referência (= Base de Cálculo) para fazer isso?
- 4) Que quantidade será mais conveniente para quantificá-la?
- 5) Onde é mais adequado colocar a Base de Cálculo?
- 6) Qual deve ser sua unidade?

3

MÉTODO DE SELEÇÃO DE BASES DE CÁLCULO

Uma forma cartesiana, ordenada, e objetiva de selecionar a base de cálculo consiste de responder as seguintes perguntas:

- 1) O que quero determinar com esses cálculos (ou seja: com o balanço material)?
- 2) Para quais condições pretendo realizar as estimativas?
- 3) Preciso estabelecer uma referência (= Base de Cálculo) para fazer isso?
- 4) Que quantidade será mais conveniente para quantificá-la?
- 5) Onde é mais adequado colocar a Base de Cálculo?
- 6) Qual deve ser sua unidade?

4

CONCEITOS PRELIMINARES: MASSA MOLAR

A MASSA MOLAR de uma amostra é determinada pela relação entre sua massa (**m**, medida em g, kg, etc.) e quantidade de matéria (**N**, medida em mols, kmols, etc.).

Ou, de outra forma,

A MASSA MOLAR é a massa de **1,0 mol** de substância (elemento, íons), ou sejam de **6,02x10²³** moléculas (átomos, íons) da substância

Os valores de **m** e **N** devem ser quantificados em unidades concordantes (ou seja, de mesmas **magnitudes**)!

Assim:

Massa Molar do Carbono: C = 12,01 g/mol (ou kg/kmol, ou lb/lbmol)

Massa Molar da Água: H₂O = 18,016 g/mol (ou kg/kmol, ou lb/lbmol)

De maneira geral, se a MASSA MOLECULAR de uma SUBSTÂNCIA for **m**, sua MASSA MOLAR será **m**

Da mesma forma que, caso a MASSA ATÔMICA de um ELEMENTO QUÍMICO seja **m**, sua MASSA MOLAR será **m**

5

CONCEITOS PRELIMINARES: COMPOSIÇÃO

A expressão da COMPOSIÇÃO de certo material pode ocorrer de diferentes formas:

Fração Mássica: $f_i = \frac{m_i}{\sum_{i=1}^k m_i}$

% Mássica: $f_i(\%) = \frac{m_i}{\sum_{i=1}^k m_i} \cdot 100\%$

Fração Volumétrica: $\Phi_i = \frac{V_i}{\sum_{i=1}^k V_i}$

% Volume: $\Phi_i(\%) = \frac{V_i}{\sum_{i=1}^k V_i} \cdot 100\%$

Fração de Quantidade de Matéria: $x_i = \frac{N_i}{\sum_{i=1}^k N_i}$

% Quantidade de Matéria: $x_i(\%) = \frac{N_i}{\sum_{i=1}^k N_i} \cdot 100\%$

6

CONCEITOS PRELIMINARES: RAZÃO

Em algumas situações é conveniente expressar a composição de uma mistura segundo a RAZÃO entre seus componentes

Para que seja determinada a razão deve-se de início estabelecer um COMPONENTE BASE (também chamado de COMPONENTE DE REFERÊNCIA), a partir do qual será expressos os demais constituintes da mistura

$$\text{Razão em Massa: } F_i = \frac{\text{Massa do componente (i)}}{\text{Massa do componente Base (= referência)}}$$

$$\text{Razão em Quantidade de Matéria: } X_i = \frac{\text{Quantidade de Matéria do componente (i)}}{\text{Quantidade de Matéria do componente Base (= referência)}}$$

7

BASE DE CÁLCULO

Problema:

A razão entre Carbono e Hidrogênio (C/H) ajuda a caracterizar a composição de uma família de combustíveis. Se a gasolina tipo 'A' for constituída de 80% em massa de Carbono, e 20% em massa de Hidrogênio, qual será a razão (C/H) desta mesma família quando expressa em termos de quantidade de matéria?

8

SOLUÇÃO

Esse problema tem muitas formas de solução. Vejamos uma opção (digamos) mais didática!

Dado que C e H são quantificados em termos de frações mássicas (%), ajudaria bastante na solução do problema:

- estabelecer uma base de cálculo para passar a trabalhar com quantidades absolutas
- Selecionar um valor que descomplique o problema

Para atender a esses requisitos, uma boa alternativa seria fixar:

Base de Cálculo: **BC = 100 kg**

Dessa forma,

Componente	quantidade (kg)	PM (kg/kmol)	Nº. de mols (Mols)
Carbono (C)	$100 \times \frac{80}{100} = 80$	12,0	$\frac{80}{12} = 6,67$
Hidrogênio (H)	$100 \times \frac{20}{100} = 20$	1,00	$\frac{20}{1,0} = 20,0$

Consequentemente, a relação (C/H) em base molar será

$$\left(\frac{C}{H}\right) = \left(\frac{6,67}{20}\right) = 0,33$$

9

CONCEITOS PRELIMINARES: CONCENTRAÇÃO

O termo **CONCENTRAÇÃO** define a quantidade de certa substância (denominada **soluto**) distribuída (= dispersa, solubilizada, suspensão) em certa quantidade de material a qual será expressa em base volumétrica.

O volume total da solução compreende o conjunto das espécies envolvidas (**solutos + solvente**)

A quantidade de soluto pode ser expressa em massa, volume ou quantidade de matéria. Consequentemente, é possível falar em três tipos de concentração:

$$\text{Concentração em Massa: } \alpha_i = \frac{m_i}{V_{\text{solução}}}$$

$$\text{Concentração em Volume: } \varphi_i = \frac{V_i}{V_{\text{solução}}}$$

A Concentração em Volume é chamada nesse caso de **FRAÇÃO VOLUMÉTRICA**

$$\text{Concentração em Quantidade de Matéria: } c_i = \frac{N_i}{V_{\text{solução}}}$$

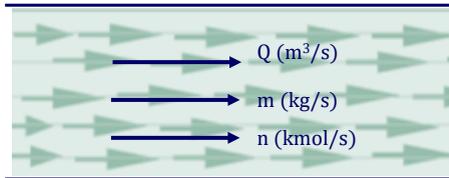
10

CONCEITOS PRELIMINARES: VAZÃO vs. FLUXO

Chama-se de VAZÃO à quantidade de uma substância transportada ou escoada por unidade de tempo, via tubulação ou outra via/forma de distribuição

As vazões podem, em geral, ser de três procedências a partir das propriedades da matéria: MÁSSICA, VOLUMÉTRICA, de QUANTIDADE DE MATÉRIA (= MOLAR)

Unidade no SI: kg/s



Essas vazões não são independentes.

Ao contrário, estão sempre relacionadas entre si por propriedade a matéria tais como:

- Massa específica: ρ (kg/m³)
- massa molar: M (kg/kmol)
- volume molar: V_m (m³/kmol)

11

CONCEITOS PRELIMINARES: VAZÃO vs. FLUXO

Por outro lado, dá-se o nome de FLUXO à quantidade de uma substância que é transportada ou escoada por unidade de área perpendicular a este mesmo escoamento.

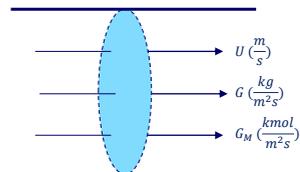
Os fluxos podem ser MÁSSICA, VOLUMÉTRICA, de QUANTIDADE DE MATÉRIA (ou MOLAR).

Assim:

$$\text{Fluxo Volumétrico} = \frac{\text{vazão volumétrica}}{\text{área transversal}} = \frac{Q \left(\frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right)}{A \text{ (m}^2\text{)}} = U \left(\frac{\text{m}}{\text{s}}\right)$$

$$\text{Fluxo Mássico} = \frac{\text{vazão mássica}}{\text{área transversal}} = \frac{w \left(\frac{\text{kg}}{\text{s}}\right)}{A \text{ (m}^2\text{)}} = G \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^2\text{s}}\right)$$

$$\text{Fluxo Molar} = \frac{\text{vazão molar}}{\text{área transversal}} = \frac{N \left(\frac{\text{kmol}}{\text{s}}\right)}{A \text{ (m}^2\text{)}} = G_m \left(\frac{\text{kmol}}{\text{m}^2\text{s}}\right)$$



12

SISTEMA, VIZINHANÇA, FRONTEIRAS E CORRENTES

O termo SISTEMA pode ser entendido como a porção do espaço na qual se dá o fenômeno em estudo. Portanto, denomina-se VIZINHANÇA a quaisquer outras partes do universo que não correspondam ao sistema.

O sistema é separado da vizinhança por limites físicos ou **virtuais**, conhecidos como FRONTEIRAS. Por outro lado, em um BALANÇO MATERIAL são denominadas CORRENTES, às quantidades (que em geral, são descritas em termos de **vazões**) de MATÉRIA que circulam entre o sistema e a vizinhança.

A classificação do sentido das correntes (entrada ou saída) é feita tendo em conta o sistema como referência.

15

SISTEMA, VIZINHANÇA, FRONTEIRAS E CORRENTES



16

REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DO FENÔMENO EM ESTUDO: ELABORAÇÃO DE FLUXOGRAMAS

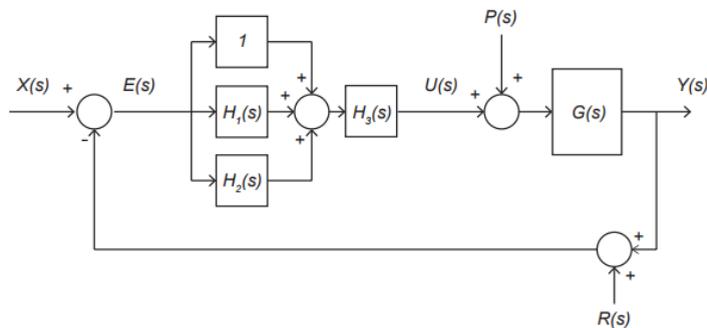
17

DIAGRAMA DE BLOCOS vs. FLUXOGRAMA

Quando for solicitado a você que faça estimativas (ou determinações) envolvendo Balanços Material, é essencial organizar as ideias antes de abordar o(s) problema(s)

Para isso vale a pena usar de recursos gráficos para descrever a situação em análise, pelo fato deles serem (exatamente) visuais e intuitivos. Suas modalidades mais frequentes são o DIAGRAMA DE BLOCOS, forma de descrição simplificada, e o FLUXOGRAMA que dispõe de mais recursos que o anterior, mas que exige conhecimentos técnicos prévios para sua elaboração

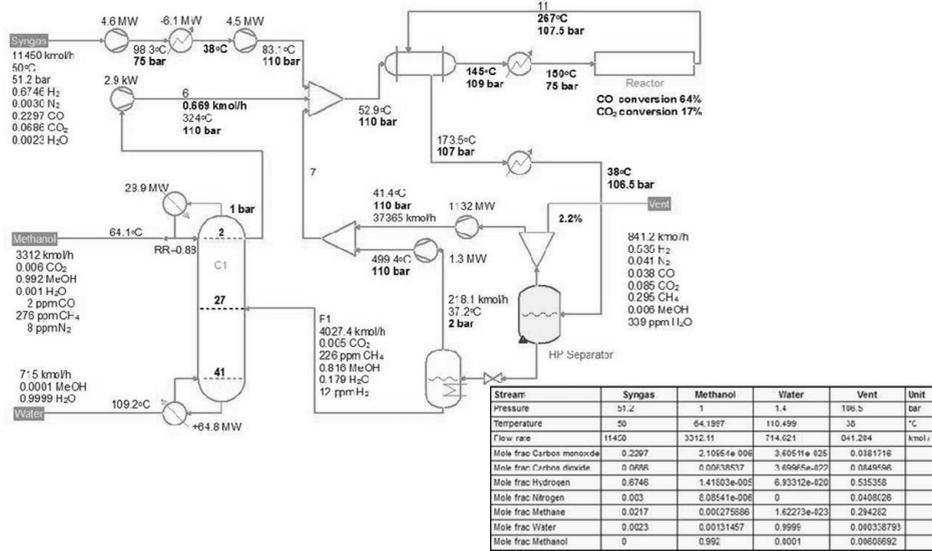
Diagrama de Blocos: exemplo: Circuito elétrico



18

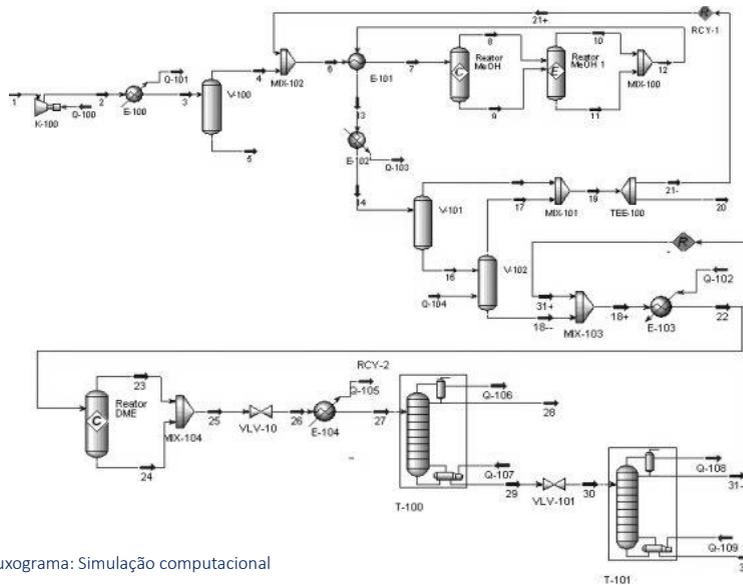
DIAGRAMA DE BLOCOS vs. FLUXOGRAMA

Fluxograma: exemplo: processo químico



19

DIAGRAMA DE BLOCOS vs. FLUXOGRAMA

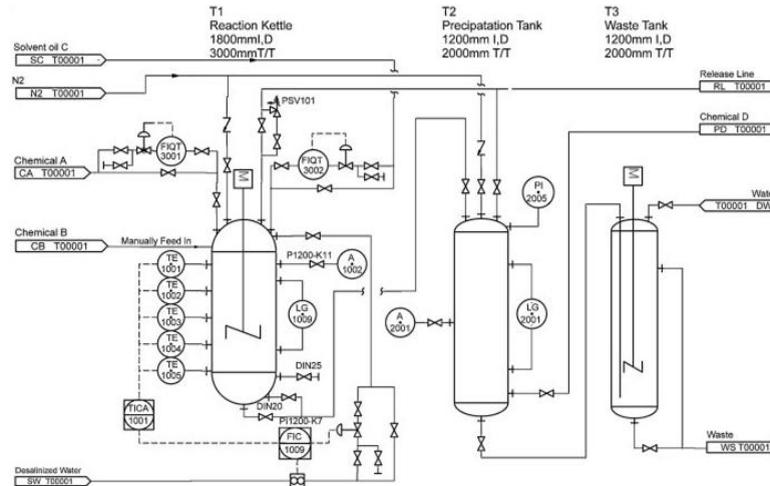


Fluxograma: Simulação computacional

20

DIAGRAMA DE BLOCOS vs. FLUXOGRAMA

Fluxograma: Instrumentação de processo



21

REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DO FENÔMENO EM ESTUDO: FLUXOGRAMA DE PROCESSO

Problema

Suponha que 1000 mol O_2 do ar são colocados em contato com 100 mol propano (C_3H_8) em uma câmara de combustão que opera segundo processo de batelada.

O_2 e C_3H_8 reagem entre si no interior desse compartimento, consumindo 25% da quantidade total de oxigênio alimentado ao sistema, mas apenas uma parte do C_3H_8 . Além de energia, essa interação gera também CO_2 e H_2O como subprodutos materiais.

Para que o gás carbônico possa ser aproveitado em outro processo, ele precisa ser separado da água. Para tanto, a corrente emanada do reator alimenta um condensador. O equipamento foi projetado para que os gases de combustão circulem em seu interior por tempo suficiente para que toda a água passe para a fase líquida. Nessas condições, ela é então recolhida em um compartimento interno do condensador, de onde será drenada para o ambiente.

Pede-se:

A) Construir o fluxograma que representa o processo em questão indicando valores e condições que descrevam seu funcionamento.

22