

PQI – 3303 – Fenômenos de Transporte III

Exercícios – Lista 2

José Luís de Paiva

Departamento de Engenharia Química da EPUSP

PQI – 3303 – Fenômenos dos Transportes III – 2020

2ª lista de exercícios

- 1) Uma proveta de 15 cm de altura encerra no fundo um catalisador sólido. A proveta está em um ambiente a 1 atm e 20 ° C , ocupado por um gás A. Este gás ao atingir a superfície do catalisador reage instantaneamente ($A \rightarrow 2B$). a) Calcular o fluxo molar de B, que deixa a proveta. Explícite as hipóteses. O processo reativo é de fato instantâneo? Adote $D_{AB} = 0,1 \text{ cm}^2/\text{s}$. b) Equacione o problema considerando-se que ocorra uma reação na superfície do catalisador, com velocidade superficial de 1ª ordem em relação à composição da A na fase gás junto à interface.

Resposta: a) $3,84 \cdot 10^{-7} \text{ gmol}/(\text{cm}^2/\text{s})$.

- 2) (30.4 B&M) Calcule a velocidade de sublimação de uma esfera de naftaleno de 1 cm de diâmetro a 15 ° C . Assuma que a variação de diâmetro é inicialmente imperceptível. A esfera está envolvida por uma massa de ar infinita e estagnada a 15 ° C e 1 atm. Expresse o resultado em % de massa sublimada por dia. Explícite claramente as hipóteses. Propriedades do naftaleno, a 15 °C: densidade = 1152 kg/m³, pressão de vapor = 4,84 Pa e difusividade em ar = $5,65 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$.

Resposta: 1,3 %.

- 3) (30.13 B&M) Uma experiência de Stefan modificada deve ser empregada para determinação da difusividade de A em B. A difusão ocorre em um tubo fechado com uma pequena camada de catalisador no fundo que promove uma reação de equilíbrio, $A \leftrightarrow 2B$, com constante de "equilíbrio" K_x . O outro extremo do tubo está exposto a um ambiente contendo A . Obtenha a equação que permita o cálculo da difusividade a partir de medidas do fluxo de A. Assuma pressão e temperatura constantes e especifique os demais parâmetros necessários.

- 4) Considere o fluxo difusivo proporcional ao gradiente de potencial químico, conforme equação: $\tilde{I}_A = L_{AB}(d\mu_A/dz)$. A partir da "lei" de Fick, obtenha uma relação entre D_{AB} e o coeficiente fenomenológico L_{AB} . O potencial químico pode ser expresso por, $\mu_A = RT \ln(\gamma_A \tilde{x}_A)$, onde γ_A é o coeficiente de atividade.
- 5) Uma gota de água de 50 μm de diâmetro, com temperatura de 315 K, é inserida numa corrente de ar a 315 K, 105 kPa, e umidade relativa de 50%. Estime o tempo necessário para a evaporação da gota. Considere sistema isotérmico e diluído. Explícite as demais hipóteses. Propriedades da água, 315 K: $P_{\text{vapor}} = 8,1 \text{ kPa}$ e difusividade em ar = $1,97 \cdot 10^{-5} \cdot (P_0/P) \cdot (T/T_0)^{1,685} \text{ m}^2/\text{s}$, $T_0 = 256 \text{ K}$ e $P_0 = 1 \text{ atm}$. Sabe-se que a temperatura da gota durante a evaporação diminui, podendo atingir a temperatura de bulbo úmido, T_{bu} . Resolva o problema, admitindo-se que a temperatura da gota seja $T_{bu} = 305 \text{ K}$ ($P_{\text{vapor}} = 4,7 \text{ kPa}$). *Resposta: 0,42 s e 3,0 s.*
- 6) (30.17 B&M) Dois bulbos de grande capacidade são conectados por um capilar de 2 mm de diâmetro e 30 cm de comprimento. Um dos bulbos é inicialmente cheio com H_2 , puro, e o outro com N_2 , também, puro, ambos a 294 K e 1 atm. $D_{\text{N}_2, \text{H}_2} = 0,763 \text{ cm}^2/\text{s}$. Calcule o fluxo mássico e o sentido do mesmo logo no início do processo difusivo. *Resposta: $27 \cdot 10^{-5} \text{ kg}/(\text{m}^2/\text{s})$, do N_2 para o H_2 .*
- 7) (30.19 B&M) Inicialmente tem-se cloro gás, puro, em um bulbo de 100 mL, que está conectado a um capilar de 2 mm de diâmetro e 10 cm de comprimento aberto para a atmosfera. O sistema é mantido a 20 °C e 1 atm. Qual o tempo necessário para que a fração molar de Cl_2 atinja 0,05 no bulbo? $D_{\text{ar}, \text{Cl}_2} = 0,124 \text{ cm}^2/\text{s}$. Explícite as hipóteses necessárias para a resolução. *Resposta: 214 horas.*

- 8) (Deen - 2-10) Oxigênio é consumido em tecidos do corpo, ou por células in vitro, com uma taxa, geralmente, independente da concentração de O_2 . Como modelo para a região do tecido ou agregado de células, considere a difusão de O_2 em regime permanente em uma esfera de raio r_0 , com velocidade de ordem zero para o consumo de O_2 . Admita que a concentração de O_2 , na superfície externa ($r = r_0$) é mantida constante (C_0). Se r_0 e a velocidade de consumo de O_2 forem suficientemente altas, o O_2 não atingirá o núcleo central, definido por $r < r_c$. No núcleo central a consideração de reação de ordem zero não é mais válida, devido à ausência do mesmo. Tal situação ocorre em certos tumores sólidos, que com o crescimento do mesmo, as células do núcleo morrem devido à ausência de O_2 . a) Determine o perfil de concentração de O_2 (C_{O_2}). b) Obtenha uma expressão de r_c para a existência de uma região do núcleo central sem oxigênio.

$$C_A = C_0 - \frac{k}{6D_{AB}} r_0^2 \left(1 - \frac{r^2}{r_0^2} \right) \quad r_c^2 = r_0^2 - \frac{6D_{AB}C_0}{k}$$

- 9) (Truskey 2004- adaptado) Um remédio é composto de um polímero na forma de uma esfera porosa (raio $R_0 = 0,25$ cm) contendo um fármaco dissolvido. O fármaco difunde-se para o meio líquido externo e assume-se que a sua concentração na superfície externa do polímero é constante $C_F = 10^{-7}$ mol/cm³, e na fase líquida em equilíbrio, $C_{FS} = 10^{-6}$ mol/cm³. A difusividade do fármaco na fase líquida é $D_F = 2 \cdot 10^{-6}$ cm²/s. Na condição de regime permanente, determine a taxa de transferência de fármaco (mol/s). *Resposta: $2,88 \cdot 10^{-5}$ mmol/h.*
- 10) (Truskey 2004- adaptado) No exercício anterior desconsiderou-se o processo de erosão do polímero (dissolução), pois se admitiu a hipótese de que o processo de erosão é muito lento quando comparado à difusão do fármaco no meio externo. Para verificação desta hipótese pretende-se equacionar e calcular a velocidade de dissolução do polímero. A concentração de polímero na forma de esfera porosa é $C_P = 10^{-8}$ mol/cm³, a solubilidade na fase líquida $C_{PS} = 10^{-10}$ mol/cm³ e a difusividade do polímero dissolvido na fase líquida é $D_P = 10^{-10}$ cm²/s. Obtenha uma expressão para a taxa de dissolução do polímero (mol/s). Estime o tempo para a dissolução completa, sabendo-se que o raio inicial é $R_0 = 0,25$ cm. Comente a hipótese de que o processo de erosão é muito lento. *Resposta: $3,6 \cdot 10^5$ dia.*

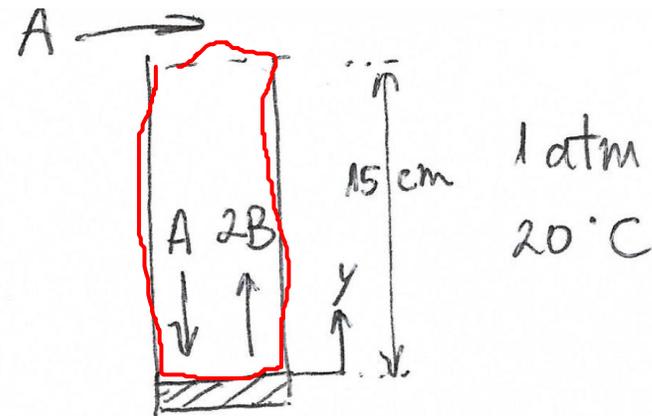
1) Uma proveta de 15 cm de altura encerra no fundo um catalisador sólido. A proveta está em um ambiente a 1 atm e 20 °C, ocupado por um gás A. Este gás ao atingir a superfície do catalisador reage

instantaneamente ($A \rightarrow 2B$). a)

Calcular o fluxo molar de B, que deixa a proveta. Explícite as hipóteses. O processo reativo é de fato instantâneo? Adote $D_{AB} = 0,1 \text{ cm}^2/\text{s}$. b) Equacione o problema considerando-se que ocorra uma reação na superfície do catalisador, com velocidade superficial de 1ª ordem em relação à composição da A na fase gás junto à interface.

Resposta: a) $3,84 \cdot 10^{-7} \text{ gmol}/(\text{cm}^2/\text{s})$.

1-LISTA2



Reação instantânea
em $y=0$ $\tilde{x}_{A0} = 0$ e $\tilde{x}_{B0} = 1$.

$$\frac{N_B}{2} = -\tilde{N}_A \Rightarrow \tilde{N} = \tilde{N}_A + \tilde{N}_B = \tilde{N}_A - 2\tilde{N}_A = -\tilde{N}_A$$

$$\tilde{N}_A = \tilde{I}_A + \tilde{x}_A \tilde{N} \quad \tilde{N} = \tilde{I}_A - \tilde{x}_A \tilde{N}_A$$

$$\tilde{N}_A = \frac{\tilde{I}_A}{(1 + \tilde{x}_A)}$$

$$\tilde{I}_A = -\rho D_{AB} \frac{d\tilde{x}_A}{dy}$$

1) Uma proveta de 15 cm de altura encerra no fundo um catalisador sólido. A proveta está em um ambiente a 1 atm e 20 °C, ocupado por um gás A. Este gás ao atingir a superfície do catalisador reage instantaneamente ($A \rightarrow 2B$). a) Calcular o fluxo molar de B, que deixa a proveta. Explícite as hipóteses. O processo reativo é de fato instantâneo? Adote $D_{AB} = 0,1 \text{ cm}^2/\text{s}$. b) Equacione o problema considerando-se que ocorra uma reação na superfície do catalisador, com velocidade superficial de 1ª ordem em relação à composição da A na fase gás junto à interface.

Resposta: a) $3,84 \cdot 10^{-7} \text{ gmol}/(\text{cm}^2/\text{s})$.

$$\vec{N}_A = -\frac{\vec{\rho} D_{AB}}{(1 + \vec{x}_A)} \frac{d\vec{x}_A}{dy} \Rightarrow \int_0^L \vec{N}_A dy = -\vec{\rho} D_{AB} \int_{\vec{x}_{A0}}^{\vec{x}_{AL}} \frac{d\vec{x}_A}{(1 + \vec{x}_A)}$$

$$\vec{N}_A \cdot L = -\vec{\rho} D_{AB} \ln \left| \frac{1 + \vec{x}_{AL}}{1 + \vec{x}_{A0}} \right|$$

$$\vec{N}_A = -\frac{\vec{\rho} D_{AB}}{L} \ln |1 + \vec{x}_{AL}|$$

$$\vec{\rho} = \frac{P}{RT} = 4,15 \cdot 10^{-2} \text{ gmol}/L = 4,15 \cdot 10^{-5} \text{ gmol}/\text{cm}^3$$

$$\vec{N}_A = -1,92 \cdot 10^{-7} \text{ gmol}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$$

1) Uma proveta de 15 cm de altura encerra no fundo um catalisador sólido. A proveta está em um ambiente a 1 atm e 20 °C, ocupado por um gás A. Este gás ao atingir a superfície do catalisador reage instantaneamente ($A \rightarrow 2B$). a) Calcular o fluxo molar de B, que deixa a proveta. Explícite as hipóteses. O processo reativo é de fato instantâneo? Adote $D_{AB} = 0,1 \text{ cm}^2/\text{s}$. b) Equacione o problema considerando-se que ocorra uma reação na superfície do catalisador, com velocidade superficial de 1ª ordem em relação à composição da A na fase gás junto à interface.

Resposta: a) $3,84 \cdot 10^{-7} \text{ gmol}/(\text{cm}^2/\text{s})$.

No caso de reação interfacial.

Reação de 1ª ordem: $-\vec{N}_A = k C_A$

\uparrow \uparrow
 $\frac{\text{cm}^3}{\text{s} \cdot \text{cm}^2}$ $\frac{\text{gmol}}{\text{cm}^3}$

$C_A = \vec{N}_A \vec{p}$

$$\vec{x}_{A0} = \frac{-\vec{N}_A}{k\vec{p}}$$

$$\int_0^L \vec{N}_A dy = -\vec{p} D_{AB} \int_{\vec{x}_{A0}}^{\vec{x}_{AL}=1} \frac{d\vec{x}_A}{(1+\vec{x}_A)}$$

$\vec{x}_{A0} = \frac{-\vec{N}_A}{k\vec{p}}$

$$\vec{N}_A = -\frac{\vec{p} D_{AB}}{L} \ln\left(\frac{2}{1 - \frac{\vec{N}_A}{k\vec{p}}}\right)$$

1) Uma proveta de 15 cm de altura encerra no fundo um catalisador sólido. A proveta está em um ambiente a 1 atm e 20 °C, ocupado por um gás A. Este gás ao atingir a superfície do catalisador reage instantaneamente ($A \rightarrow 2B$). a) Calcular o fluxo molar de B, que deixa a proveta. Explícite as hipóteses. O processo reativo é de fato instantâneo? Adote $D_{AB} = 0,1 \text{ cm}^2/\text{s}$. b) Equacione o problema considerando-se que ocorra uma reação na superfície do catalisador, com velocidade superficial de 1ª ordem em relação à composição da A na fase gás junto à interface.

Resposta: a) $3,84 \cdot 10^{-7} \text{ gmol}/(\text{cm}^2/\text{s})$.

$$\vec{N}_A = -\frac{\vec{p} D_{AB}}{L} \ln\left(\frac{2}{1 - \frac{\vec{N}_A}{k\vec{p}}}\right)$$

Se $k \gg \frac{-\vec{N}_A}{\vec{p}}$ (reação instantânea)

$$\vec{N}_A = -\frac{\vec{p} D_{AB}}{L} \left[\ln 2 - \ln\left(1 - \frac{\vec{N}_A}{k\vec{p}}\right) \right]$$

$$\vec{N}_A = -\frac{\vec{p} D_{AB}}{L} \ln(2)$$

$$\approx \left(\frac{-\vec{N}_A}{k\vec{p}} \right) \approx 0$$

$$\ln(1+x) \approx x \quad x \rightarrow 0$$

Se $k \gg \frac{-\vec{N}_A}{\vec{p}}$ (reação muito rápida)

$$\vec{N}_A = -\frac{\vec{p} D_{AB}}{L} \left[\ln 2 + \frac{\vec{N}_A}{k\vec{p}} \right]$$

$$\vec{N}_A = -\frac{\vec{p}}{\frac{L}{D_{AB}} + \frac{1}{k}} \ln(2)$$

$$t_{\text{REAÇÃO}} = L/k$$

$$t_{\text{DIFUSÃO}} = L^2/D_{AB}$$

5) Uma gota de água de 50 μm de diâmetro, com temperatura de 315 K, é inserida numa corrente de ar a 315 K, 105 kPa, e umidade relativa de 50%. Estime o tempo necessário para a evaporação da gota. Considere sistema isotérmico e diluído. Explícite as demais hipóteses. Propriedades da água, 315 K: $P_{\text{vapor}} = 8,1 \text{ kPa}$ e difusividade em ar = $1,97 \cdot 10^{-5} \cdot (P_0/P) \cdot (T/T_0)^{1,685} \text{ m}^2/\text{s}$, $T_0 = 256 \text{ K}$ e $P_0 = 1 \text{ atm}$. Sabe-se que a temperatura da gota durante a evaporação diminui, podendo atingir a temperatura de bulbo úmido, T_{bu} . Resolva o problema, admitindo-se que a temperatura da gota seja $T_{\text{bu}} = 305 \text{ K}$ ($P_{\text{vapor}} = 4,7 \text{ kPa}$). Resposta: 0,42 s e 3,0 s.

$$D_{\text{H}_2\text{O}/\text{ar}} = 1,97 \cdot 10^{-5} \left(\frac{P_0}{P}\right) \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1,685} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$T = 315 \text{ K}, T_0 = 256 \text{ K}, P_0 = 101,3 \text{ e } P = 105,0 \text{ kPa}$$

$$D_{\text{H}_2\text{O}/\text{ar}} = 2,695 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$\vec{p} = \frac{P}{RT} = \frac{105}{101,3} \times \frac{1}{0,08206} \cdot \frac{1}{315} = 0,04 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

$$\vec{p}_s = \frac{1}{18} \frac{\text{g mol}}{\text{cm}^3} = 0,0555 \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3}$$

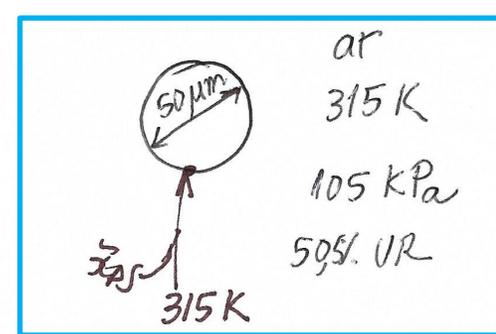
$$\vec{x}_{\text{AS}} = \frac{8,135}{105} = 0,07747$$

$$\vec{x}_{\text{AO}} = 0,505 \times \vec{x}_{\text{AS}} = 0,039125$$

$$\phi \text{ cte}, P \text{ e } T \text{ cte e } \vec{x}_0 \ll 1$$

$$t = \frac{R^2 \vec{p}_s}{2 \vec{p} D_{\text{H}_2\text{O}/\text{ar}} (\vec{x}_{\text{AS}} - \vec{x}_{\text{AO}})} = \frac{(25 \cdot 10^{-6})^2 \cdot 0,0555}{2 \cdot 0,04 \cdot 10^{-3} \cdot 2,695 \cdot 10^{-5} (0,07747 - 0,03912)}$$

$$t = 0,418 \text{ s}$$



5) Uma gota de água de $50 \mu\text{m}$ de diâmetro, com temperatura de 315 K , é inserida numa corrente de ar a 315 K , 105 kPa , e umidade relativa de 50% . Estime o tempo necessário para a evaporação da gota. Considere sistema isotérmico e diluído. Explícite as demais hipóteses. Propriedades da água, 315 K : $P_{\text{vapor}} = 8,1 \text{ kPa}$ e difusividade em ar = $1,97 \cdot 10^{-5} \cdot (P_0/P) \cdot (T/T_0)^{1,685} \text{ m}^2/\text{s}$, $T_0 = 256 \text{ K}$ e $P_0 = 1 \text{ atm}$. Sabe-se que a temperatura da gota durante a evaporação diminui, podendo atingir a temperatura de bulbo úmido, T_{bu} . Resolva o problema, admitindo-se que a temperatura da gota seja $T_{bu} = 305 \text{ K}$ ($P_{\text{vapor}} = 4,7 \text{ kPa}$). Resposta: $0,42 \text{ s}$ e $3,0 \text{ s}$.

Atingindo-se o TBU:
 315 K



$T_{bu} = 305 \text{ K}$
 \bar{x}_{AS}

$$\bar{x}_{AS} = \frac{4,657}{105} = 0,04435$$

$$\bar{x}_{AD} = 0,03915$$

$$t = 3,06 \text{ s}$$

8) (Deen - 2-10) Oxigênio é consumido em tecidos do corpo, ou por células in vitro, com uma taxa, geralmente, independente da concentração de O_2 . Como modelo para a região do tecido ou agregado de células, considere a difusão de O_2 em regime permanente em uma esfera de raio r_0 , com velocidade de ordem zero para o consumo de O_2 . Admita que a concentração de O_2 , na superfície externa ($r = r_0$) é mantida constante (C_0). Se r_0 e a velocidade de consumo de O_2 forem suficientemente altas, o O_2 não atingirá o núcleo central, definido por $r < r_c$. No núcleo central a consideração de reação de ordem zero não é mais válida, devido à ausência do mesmo. Tal situação ocorre em certos tumores sólidos, que com o crescimento do mesmo, as células do núcleo morrem devido à ausência de O_2 . a) Determine o perfil de concentração de O_2 (CO_2). b) Obtenha uma expressão de r_c para a existência de uma região do núcleo central sem oxigênio.

$$C_A = C_0 - \frac{k}{6D_{AB}} r_0^2 \left(1 - \frac{r^2}{r_0^2}\right) \quad r_c^2 = r_0^2 - \frac{6D_{AB}C_0}{k}$$

$$\text{div } \vec{N}_{O_2} = \dot{r}_{O_2} \Rightarrow \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \vec{N}_{O_2}) = -K \right.$$

$$\left. \vec{N}_{O_2} = \vec{I}_{O_2} + \underbrace{\dot{r}_{O_2}}_{\text{ord. deturdo}} \cdot \vec{N} \Rightarrow \vec{I}_{O_2} = -D_{O_2} \frac{dC_{O_2}}{dr}$$

$$\frac{d}{dr} (r^2 \vec{N}_{O_2}) = -K r^2$$

$$r^2 \vec{N}_{O_2} = -\frac{K r^3}{3} + C_1 \Rightarrow \vec{N}_{O_2} = -\frac{K r}{3} + \frac{C_1}{r^2}$$

$$\text{p/simetria p/ } r=0 \rightarrow \vec{N}_{O_2} = 0 \Rightarrow \underline{C_1 = 0}$$

$$\vec{N}_{O_2} = -D_{O_2} \frac{dC_{O_2}}{dr} = -\frac{K r}{3} \Rightarrow \frac{dC_{O_2}}{dr} = \frac{K}{3} \frac{r}{D_{O_2}}$$

$$\boxed{C_{O_2} = \frac{K}{6D_{O_2}} \frac{r^2}{6} + C_2}$$

8) (Deen - 2-10) Oxigênio é consumido em tecidos do corpo, ou por células in vitro, com uma taxa, geralmente, independente da concentração de O_2 . Como modelo para a região do tecido ou agregado de células, considere a difusão de O_2 em regime permanente em uma esfera de raio r_0 , com velocidade de ordem zero para o consumo de O_2 . Admita que a concentração de O_2 , na superfície externa ($r = r_0$) é mantida constante (C_0). Se r_0 e a velocidade de consumo de O_2 forem suficientemente altas, o O_2 não atingirá o núcleo central, definido por $r < r_c$. No núcleo central a consideração de reação de ordem zero não é mais válida, devido à ausência do mesmo. Tal situação ocorre em certos tumores sólidos, que com o crescimento do mesmo, as células do núcleo morrem devido à ausência de O_2 . a) Determine o perfil de concentração de O_2 (C_{O_2}). b) Obtenha uma expressão de r_c para a existência de uma região do núcleo central sem oxigênio.

$$C_A = C_0 - \frac{k}{6D_{AB}} r_0^2 \left(1 - \frac{r^2}{r_0^2}\right) \quad r_c^2 = r_0^2 - \frac{6D_{AB}C_0}{k}$$

$$C_{O_2} = \frac{k}{D_{O_2}} \frac{r^2}{6} + C_2$$

$$p/r = r_0 \Rightarrow C_{O_2} = C_0 \Rightarrow$$

$$C_0 = \frac{k}{D_{O_2}} \frac{r_0^2}{6} + C_2 \Rightarrow C_2 = C_0 - \frac{k}{D_{O_2}} \frac{r_0^2}{6}$$

$$C_{O_2} = C_0 - \frac{k}{6D_{O_2}} (r_0^2 - r^2) \quad p/r \geq r_c$$

$$p/r = r_c \Rightarrow C_{O_2} = 0 \Rightarrow C_0 = \frac{k}{6D_{O_2}} (r_0^2 - r_c^2) \Rightarrow r_c^2 = r_0^2 - \frac{6D_{O_2}C_0}{k}$$

