PQI – 3303 – Fenômenos de Transporte III
Aula 02

José Luís de Paiva

Departamento de Engenharia Química da EPUSP

1. Fluxos Difusivos e Globais

- Considere um fluido (meio contínuo) constituído de **N componentes** (multicomponente). Admite-se que o meio é a superposição de N componentes. Caracteriza-se o escoamento pela velocidade, $\vec{v}$, do centro de massa.

  Equação da continuidade
  (de conservação) da espécie química i

$$\rho \frac{D x_i}{D t} = \frac{\partial \rho x_i}{\partial t} + \operatorname{div} \rho x_i \vec{v} = -\operatorname{div} \vec{J}_i + \dot{r}_i$$

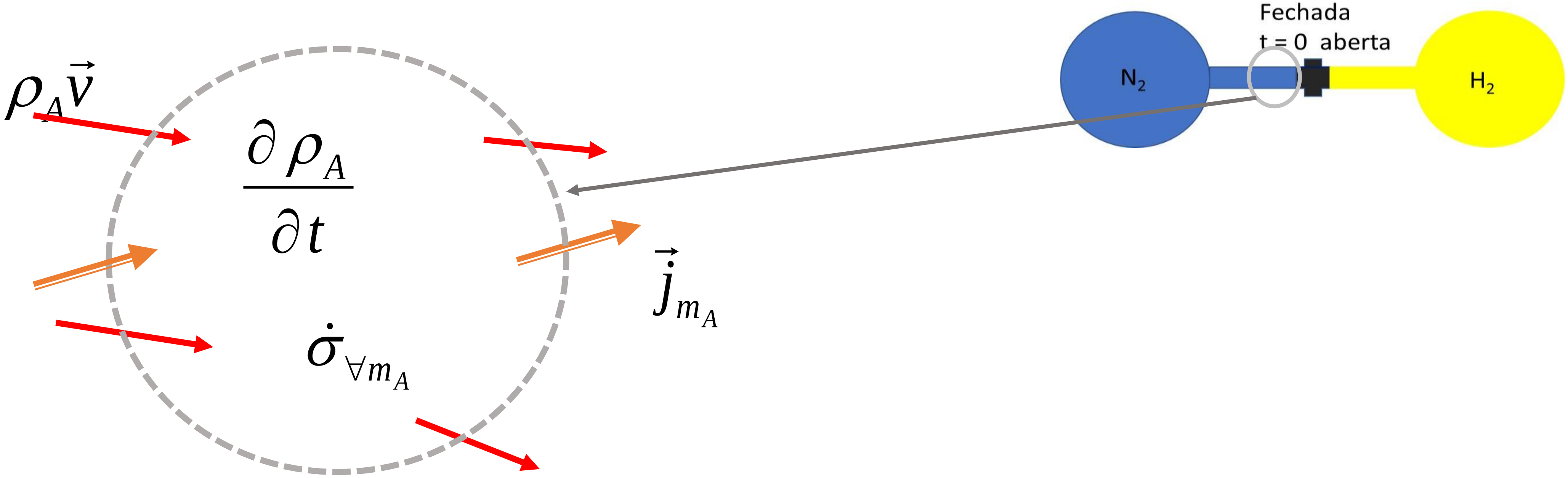
- Observação de Lagrange

$$\rho \frac{D x_i}{D t} = -\operatorname{div} \vec{J}_i + \dot{r}_i$$

- Observação de Euler

$$\frac{\partial \rho x_i}{\partial t} = -\operatorname{div} \underbrace{\left(\rho x_i \vec{v} + \vec{J}_i\right)}_{\vec{n}_i} + \dot{r}_i$$

Equação da Continuidade para a espécie A



$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = -\,\mathrm{div}\vec{n}_A + \dot{r}_{\forall A}$$

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{n}_A &= \rho_A \vec{v} + \vec{j}_A \\ \vec{n}_A &= \omega_A \vec{n} + \vec{j}_A \end{aligned}}$$

Fluxo mássico

- O fluxo mássico global de i (kg de i/m^2.s) = transporte (convectivo + difusivo) de i:

$$\vec{n}_i = \rho \vec{\mathrm{v}} x_i + \vec{J}_i = \rho_i \vec{\mathrm{v}} + \vec{J}_i$$

$$\vec{n}_i = \rho_i \vec{\mathrm{v}}_i$$

- Fluxo mássico global

(todos os componentes)

$$\vec{n} = \sum_i^N \vec{n}_i = \sum_i^N \rho_i \vec{\mathrm{v}}_i = \rho \vec{\mathrm{v}}$$

Velocidade do centro de massa

Velocidade do centro de massa

- Velocidade do centro de massa:

$$\vec{n} = \sum_{i}^{N} \vec{n}_i = \sum_{i}^{N} \rho_i \, \vec{\mathrm{v}}_i = \rho \, \vec{\mathrm{v}}$$

$$\vec{\mathrm{v}} = \frac{1}{\rho} \sum_{i}^{N} \rho_i \, \vec{\mathrm{v}}_i = \sum_{i}^{N} \frac{\rho_i}{\rho} \vec{\mathrm{v}}_i = \sum_{i}^{N} x_i \, \vec{\mathrm{v}}_i$$

- Fluxo mássico global

$$\vec{n}_i = \vec{n} \, x_i + \vec{J}_i$$

$$\rho_i \vec{v}_i = \rho_i \vec{v} + \vec{J}_i$$

Fluxo mássico difusivo

De: $$\rho_i \vec{v}_i = \rho_i \vec{v} + \vec{J}_i$$

fluxo mássico difusivo: $$\vec{J}_i = \rho_i \left(\vec{v}_i - \vec{v} \right)$$

$$\sum_i^N \vec{J}_i = \sum_i^N \rho_i \left(\vec{v}_i - \vec{v} \right) = \sum_i^N \rho_i \vec{v}_i + \sum_i^N \rho_i \vec{v} = \rho \vec{v} + \vec{v} \sum_i^N \rho_i = 0$$

$$\boxed{\sum_i^N \vec{J}_i = 0}$$

Caso binário (A/B)

$$\sum_{i}^{N} \vec{J}_i = \vec{J}_A + \vec{J}_B = 0 \Rightarrow \vec{J}_A = -\vec{J}_B$$

- Aplicando-se a “lei” de Fick, dada por:

$$\vec{J}_\mathrm{A} = -\rho\, \mathrm{D}_\mathrm{AB}\ \mathrm{gr\vec{a}d}\, x_\mathrm{A} \qquad \vec{J}_B = -\rho\, \mathrm{D}_\mathrm{BA}\ \mathrm{gr\vec{a}d}\, x_B$$

$$-\rho\, \mathrm{D}_\mathrm{AB}\ \mathrm{gr\vec{a}d}\, x_\mathrm{A} - \rho\, \mathrm{D}_\mathrm{BA}\ \mathrm{gr\vec{a}d}\, x_B = 0$$

$$-\rho\, \mathrm{D}_\mathrm{AB}\ \mathrm{gr\vec{a}d}\, x_\mathrm{A} - \rho\, \mathrm{D}_\mathrm{BA}\ \mathrm{gr\vec{a}d}\left(1 - x_A\right) = 0$$

$$-\rho\, \mathrm{D}_\mathrm{AB}\ \mathrm{gr\vec{a}d}\, x_\mathrm{A} + \rho\, \mathrm{D}_\mathrm{BA}\ \mathrm{gr\vec{a}d}\, x_A = 0$$

$$\boxed{\mathrm{D}_\mathrm{AB} = \mathrm{D}_\mathrm{BA}}$$

Equação de continuidade (molar) da espécie química i

$$\rho \frac{D\tilde{x}_i}{Dt} = \frac{\partial \rho \tilde{x}_i}{\partial t} + \operatorname{div} \tilde{\rho}\,\vec{\tilde{v}}\,\tilde{x}_i = -\operatorname{div} \vec{\tilde{I}}_i + \dot{\tilde{R}}_i$$

Velocidade do centro de massa

$$\frac{\partial \rho \tilde{x}_i}{\partial t} + \operatorname{div}(\tilde{\rho}\,\vec{\tilde{v}}\,\tilde{x}_i + \vec{\tilde{I}}_i) = \dot{\tilde{R}}_i$$

Velocidade do centro molar

- Fluxo molar total do componente i

$$\vec{\tilde{N}}_i = \tilde{\rho}_i \, \vec{\mathrm{v}}_i = \frac{\rho_i}{M_i} \vec{\mathrm{v}}_i = \frac{\vec{n}_i}{M_i}$$

- Fluxo molar total

$$\sum_i^N \vec{\tilde{N}}_i = \sum_i^N \tilde{\rho}_i \, \vec{\mathrm{v}}_i = \vec{\tilde{N}} = \tilde{\rho} \vec{\tilde{\mathrm{v}}}$$

- Velocidade do centro molar

$$\vec{\tilde{\mathrm{v}}} = \sum_i^N \frac{\tilde{\rho}_i}{\tilde{\rho}} \vec{\mathrm{v}}_i = \sum_i^N \tilde{x}_i \, \vec{\mathrm{v}}_i$$

Fluxos molares difusivos e totais

- Fluxo molar difusivo $$\vec{\tilde{I}}_i = \tilde{\rho}_i\left(\vec{v}_i - \vec{\tilde{v}}\right)$$

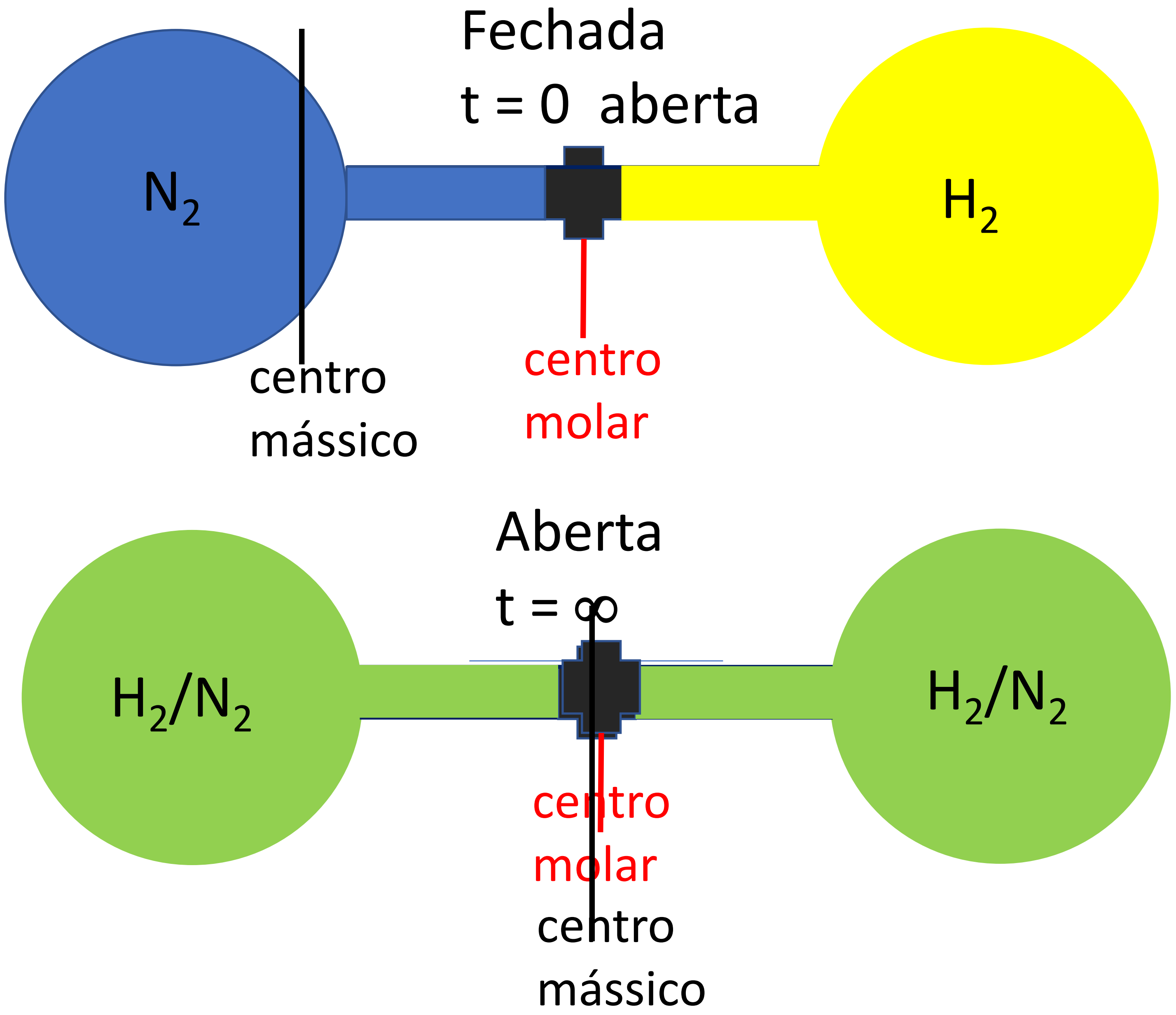
- Fluxo molar total $$\vec{\tilde{N}}_i = \tilde{x}_i\vec{\tilde{N}} + \vec{\tilde{I}}_i$$

$$\boxed{\sum_i^N \vec{\tilde{I}}_i = 0}$$

Relação entre os fluxos difusivos e totais

Velocidade de referência	Fluxo mássico (kg de A/m²s)	Fluxo molar (gmol de A/m²s)
Nula	$\vec{n}_i = \rho_i \vec{v}_i$	$\vec{\tilde{N}}_i = \tilde{\rho}_i \vec{v}_i$
centro de massa	$\vec{J}_i = \rho_i \left(\vec{v}_i - \vec{v}\right)$	$\vec{\tilde{J}}_i = \tilde{\rho}_i \left(\vec{v}_i - \vec{v}\right)$
centro molar	$\vec{I}_i = \rho_i \left(\vec{v}_i - \vec{\tilde{v}}\right)$	$\vec{\tilde{I}}_i = \tilde{\rho}_i \left(\vec{v}_i - \vec{\tilde{v}}\right)$

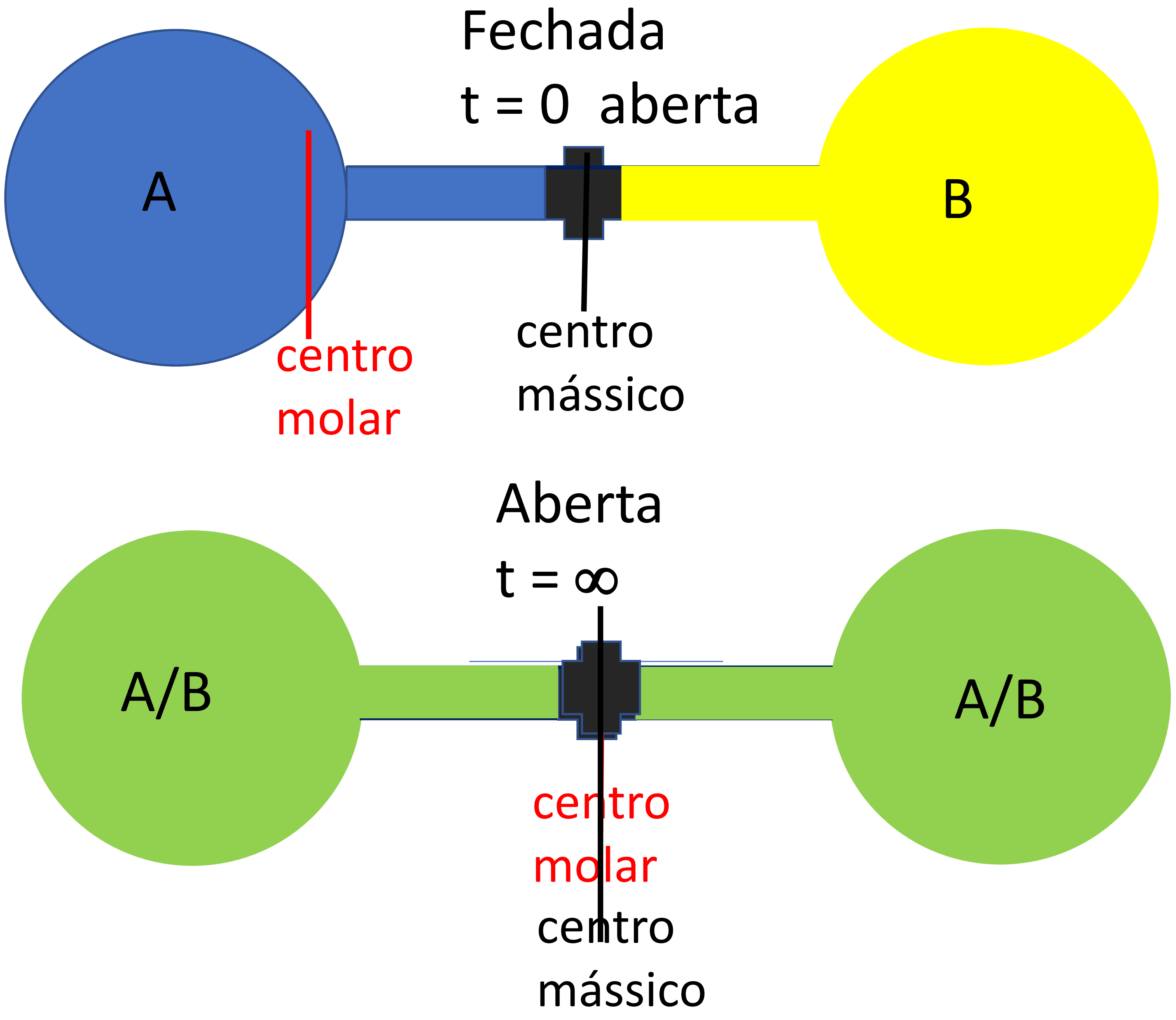
DIFUSÃO DE MASSA - GÁS



P e T constantes

$V_{esquerdo} = V_{direito}$

DIFUSÃO DE MASSA – LÍQUIDO – densidades ~ iguais

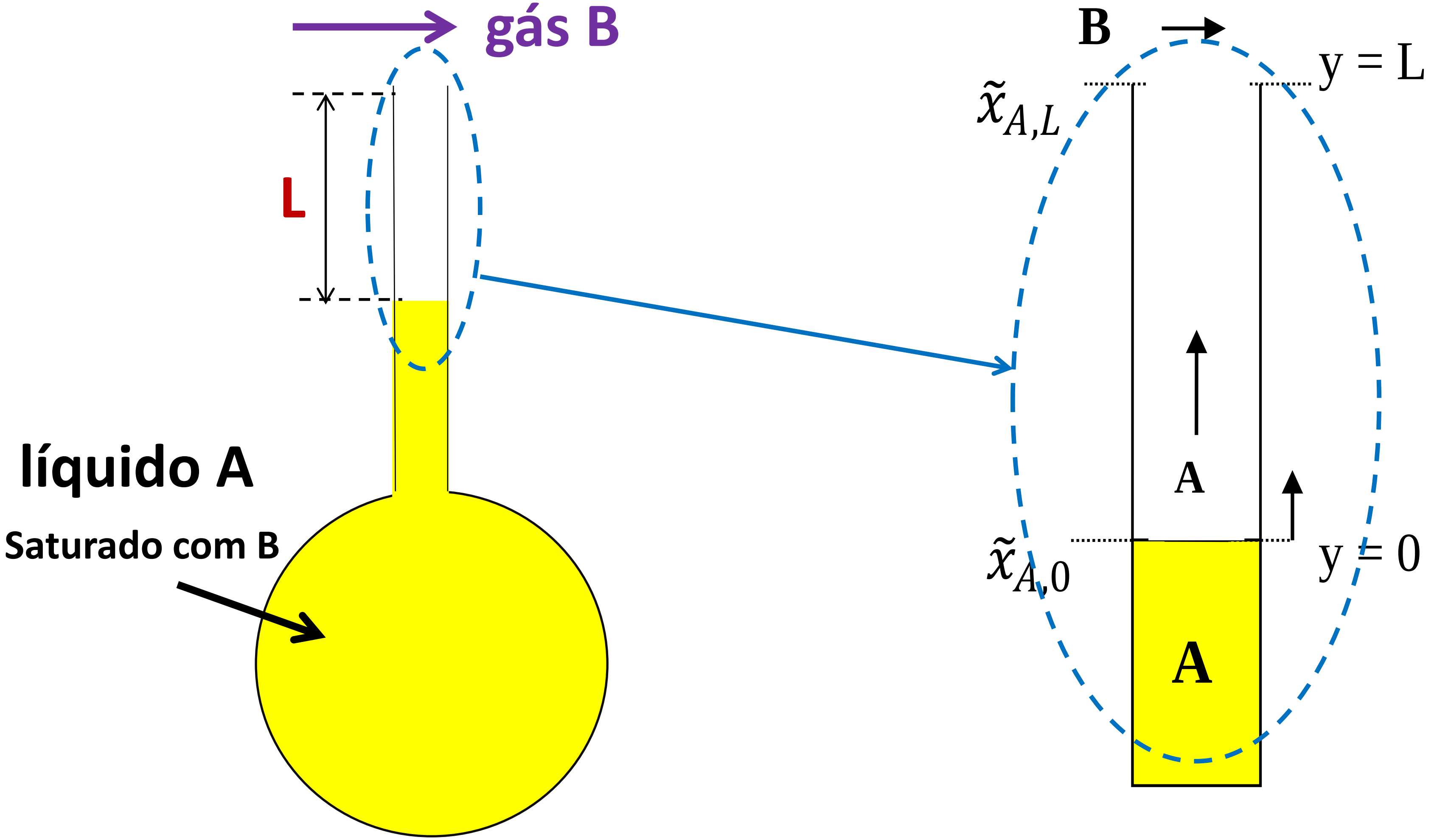


P e T constantes

$V_{esquerdo} = V_{direito}$

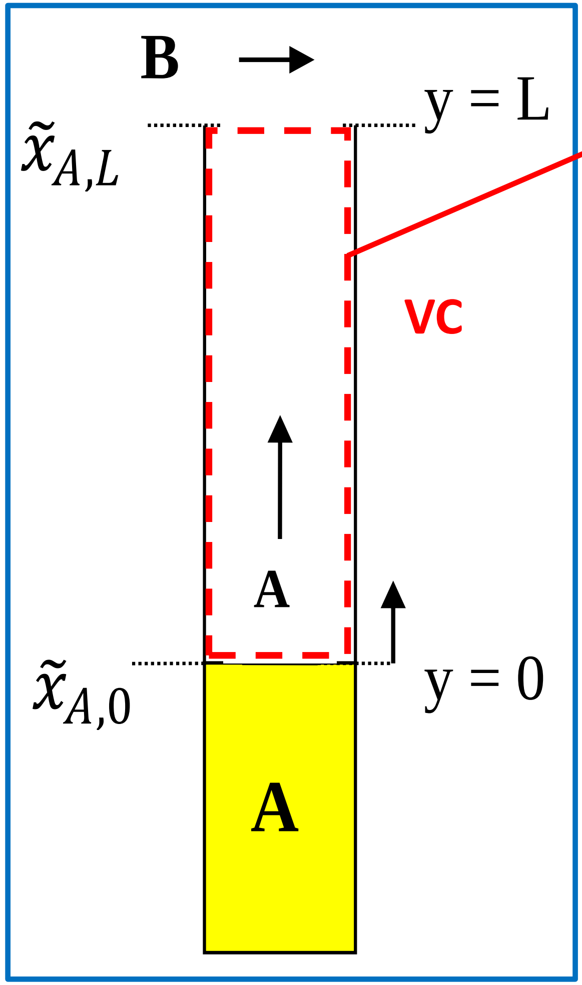
2. Difusão de A em B parado (Stefan)

- interface – nível cte
- Unidimensional
- A saturado com B
- Temperatura cte
- Pressão cte
- Regime permanente
- Sem reação química



2. Difusão de A em B parado (Stefan)

- interface – nível cte
- Unidimensional
- A saturado com B
- Temperatura cte
- Pressão cte
- Regime permanente
- Sem reação química



$$\cancel{\frac{\partial \tilde{\rho}\,\tilde{x}_A}{\partial t}} + \operatorname{div}(\tilde{\rho}\,\vec{\tilde{v}}\,\tilde{x}_A + \vec{\tilde{I}}_A) = \cancel{\dot{\tilde{R}}_A}$$

$$\operatorname{div}(\tilde{\rho}\,\vec{\tilde{v}}\,\tilde{x}_A + \vec{\tilde{I}}_A) = \operatorname{div}\vec{\tilde{N}}_A = 0$$

$$\operatorname{div}\vec{\tilde{N}}_A = 0 \Rightarrow \frac{d\tilde{N}_{A,y}}{dy} = 0 \Rightarrow \tilde{N}_{A,y} = cte$$

$$\operatorname{div}(\tilde{\rho}\,\vec{\tilde{v}}\,\tilde{x}_B + \vec{\tilde{I}}_B) = \operatorname{div}\vec{\tilde{N}}_B = 0$$

$$\tilde{N}_{B,y} = 0$$

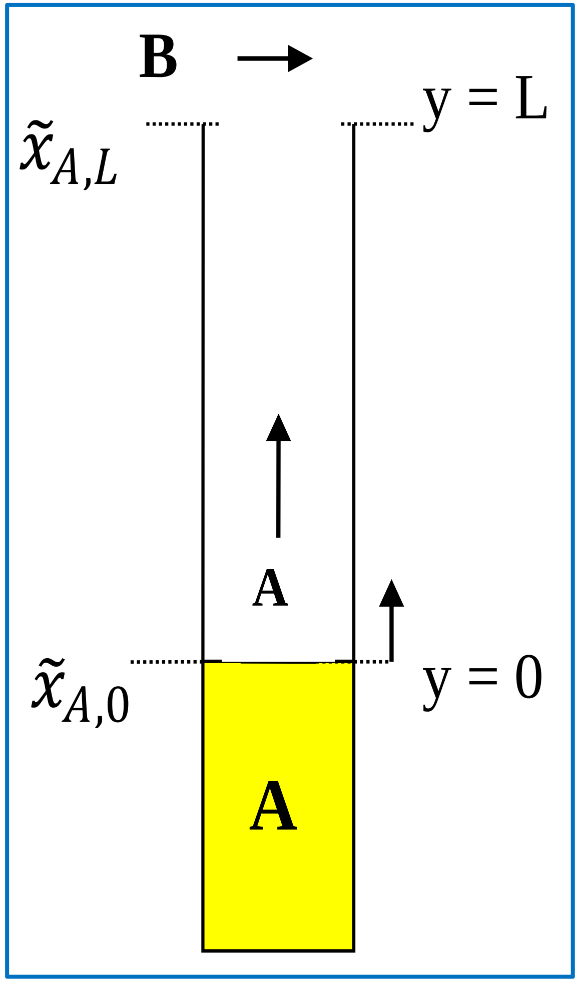
2. Difusão de A em B parado (Stefan)

$$\tilde{N}_{A,y} = cte \qquad \tilde{N}_{B,y} = 0$$

$$\tilde{N}_A = \tilde{x}_A \tilde{N} + \tilde{I}_A = \tilde{x}_A \left(\tilde{N}_A + \underbrace{\tilde{N}_B}_{0} \right) + \vec{\tilde{I}}_A$$

$$\tilde{N}_A = \frac{\vec{\tilde{I}}_A}{\left(1 - \tilde{x}_A\right)} = cte$$

$$\int_0^L \tilde{N}_A dy = -\int_{\tilde{x}_{A0}}^{\tilde{x}_{AL}} \tilde{\rho}\, D_{AB} \frac{d\tilde{x}_A}{\left(1 - \tilde{x}_A\right)}$$

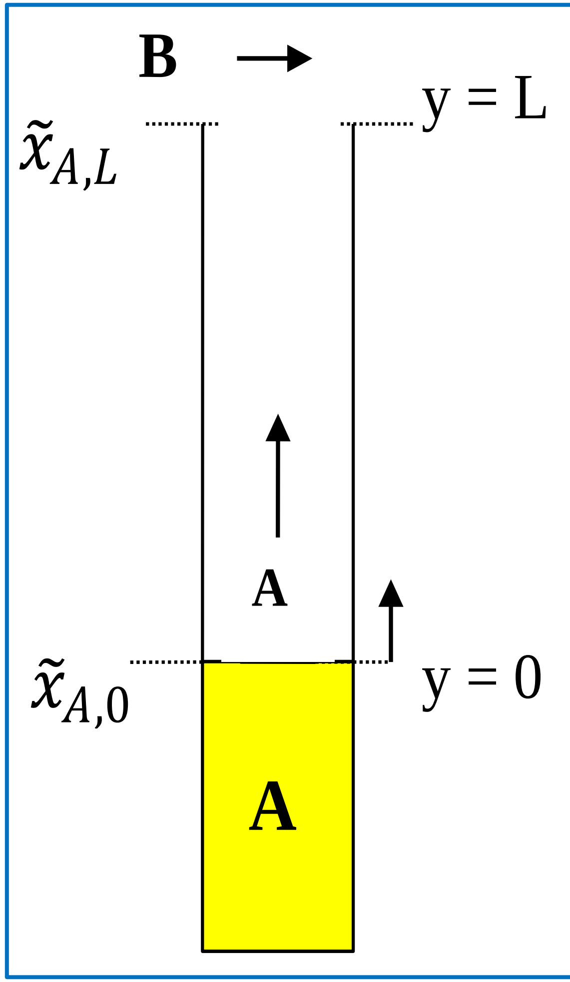


2. Difusão de A em B parado (Stefan)

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

$$\boxed{\tilde{N}_A = \frac{\tilde{\rho}\, D_{AB}}{L} \ln\left(\frac{1-\tilde{x}_{A,L}}{1-\tilde{x}_{A,0}}\right)}$$

$$\tilde{N}_A = \frac{\tilde{\rho}\, D_{AB}}{L} \ln\left(\frac{\tilde{x}_{B,L}}{\tilde{x}_{B,0}}\right)$$



2. Difusão de A em B parado (Stefan)

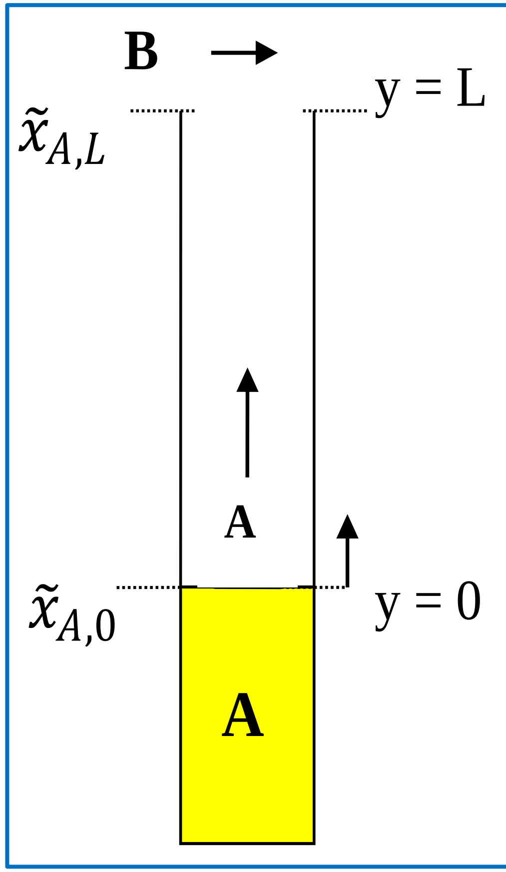
$$\tilde{N}_A = \frac{\tilde{\rho}\, D_{AB}}{L} \ln\left(\frac{\tilde{x}_{B,L}}{\tilde{x}_{B,0}}\right)$$

$$\tilde{x}_{A,0} + \tilde{x}_{B,0} = \tilde{x}_{A,\mathrm{L}} + \tilde{x}_{B,L} = 1$$

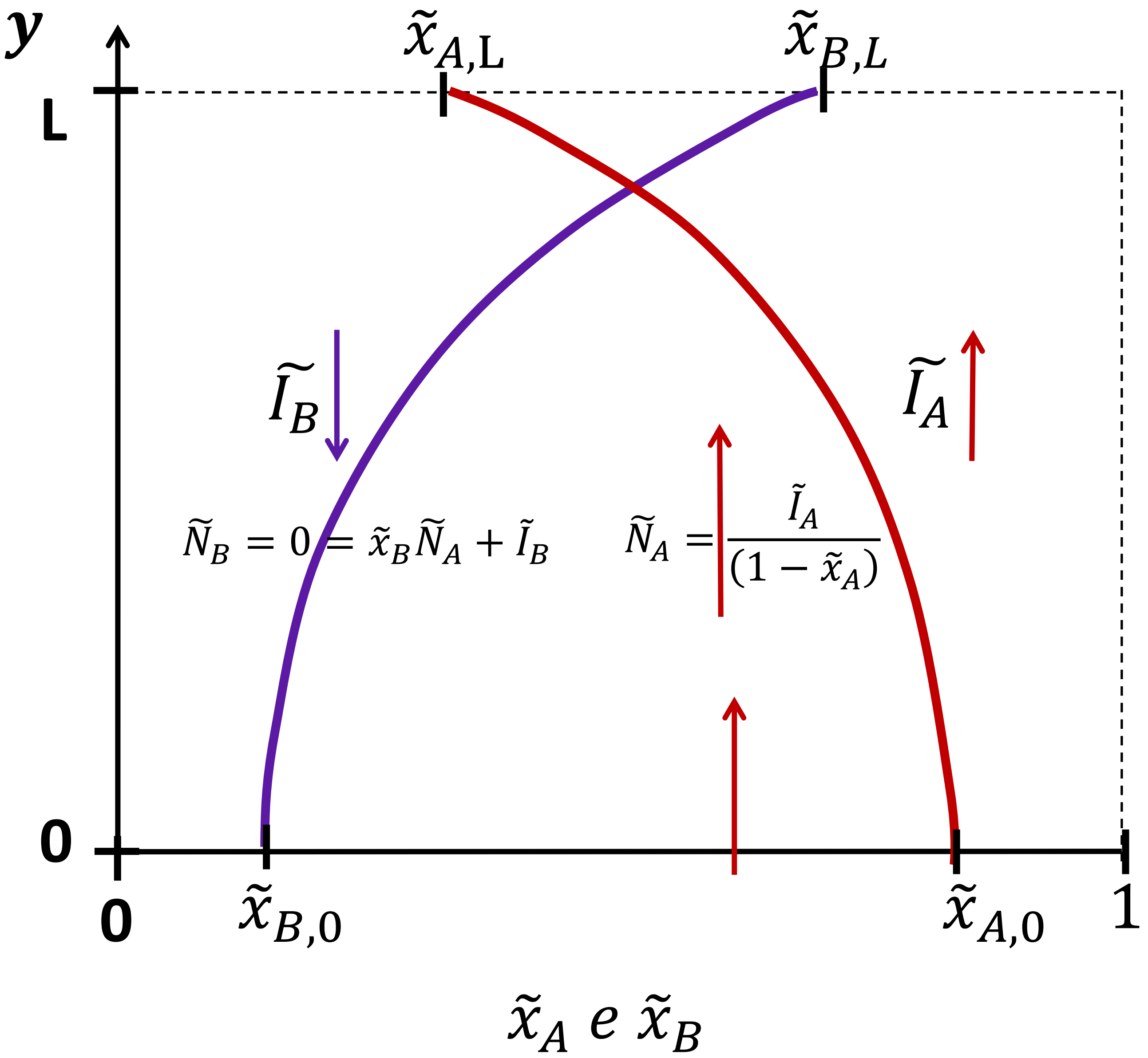
$$\tilde{N}_A = \frac{\tilde{\rho}\, D_{AB}}{L} \left(\frac{\tilde{x}_{A,0} - \tilde{x}_{A,L}}{\tilde{x}_{B,L} - \tilde{x}_{B,0}}\right) \ln\left(\frac{\tilde{x}_{B,L}}{\tilde{x}_{B,0}}\right)$$

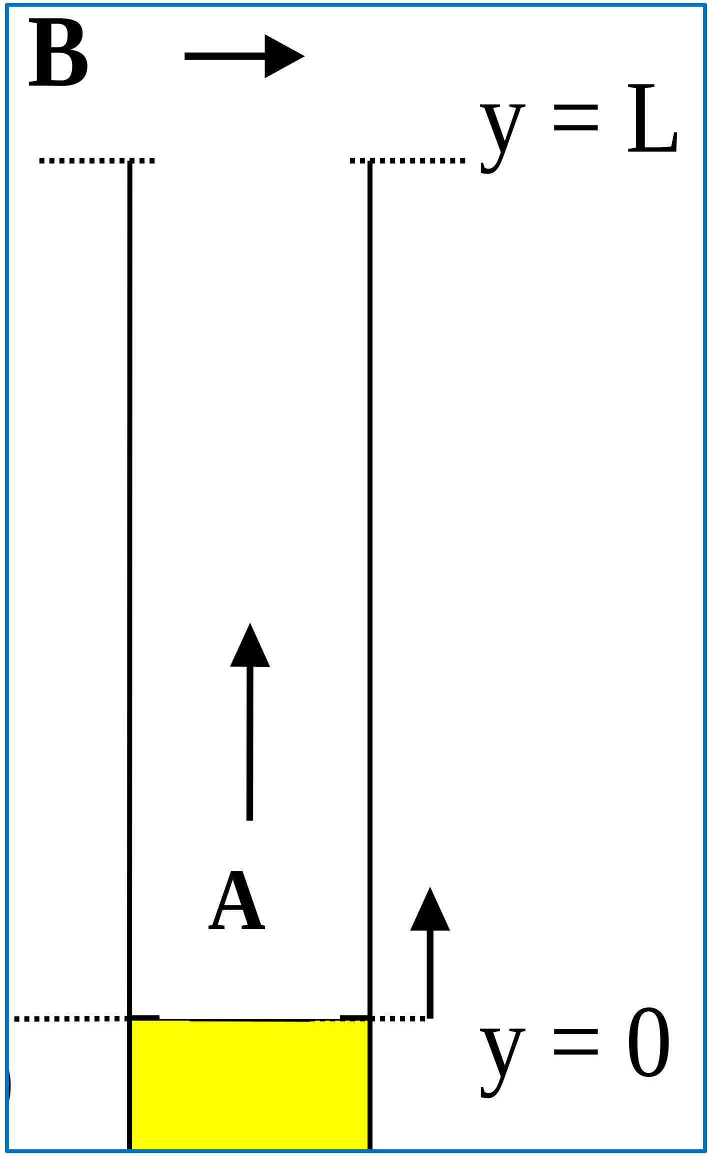
$$\tilde{x}_{BLN} = \frac{\tilde{x}_{B,L} - \tilde{x}_{B,0}}{\ln\left(\tilde{x}_{B,L} / \tilde{x}_{B,0}\right)}$$

$$\boxed{\tilde{N}_A = \frac{\tilde{\rho}\, D_{AB}}{L\, \tilde{x}_{BLN}} \left(\tilde{x}_{A,0} - \tilde{x}_{A,L}\right)}$$



2. Difusão de A em B parado (Stefan)





Bibliografia

- Bennett & Myers - Fenômenos de Transporte, 2ª ed. 1978 – Mc
Graw Hill