Equações da Continuidade em Transferência de Massa

Fenômenos de Transportes 3 (ZEA0764)

Prof. Responsável
Paulo José do Amaral Sobral

Março de 2024

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

Capítulo 3 do Livro Texto (Cremasco):**

Estudar todos os subcapítulos, com exceção do 3.5.3.

E, relembrar da primeira aula os conceitos de:

- Concentrações: C_i, ρ_i, w_i, x_i e y_i.

- Velocidades médias: $\overrightarrow{vi}$ e $\overrightarrow{V}$.

- E de fluxo: $\overrightarrow{n_i}$, $\overrightarrow{N_i}$, $\vec{j_i}$, $\overrightarrow{J_i}$, $\overrightarrow{j_i^*}$ e $\overrightarrow{J_i^*}$.

Em sistemas binários, i = A e B.

** Disponível em https://fdocumentos.tips/document/fundamentos-de-transferencia-de-massa-cremasco.html

Tópicos:

I. Equação da continuidade mássica de um soluto A;

II. Equação da continuidade de sistema binário;

III. Equação da continuidade do soluto A em termos da lei ordinária da difusão;

IV. Simplificações da equação da continuidade;

V. Condições de contorno;

VI. Exercícios.

I. Equação da continuidade mássica de um soluto A

- A Equação da continuidade de massa de um soluto (A) deriva do balanço de taxa de massa, que em termos gerais é:

- $$\underbrace{\iint_{SC} \rho \, (\vec{v} \, . \, \vec{n} \,) dA}_{\text{Taxa de efluxo mássico}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} \rho \, dV}_{\text{Taxa de acúmulo de massa}} = 0$$

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

- Em termos literal:

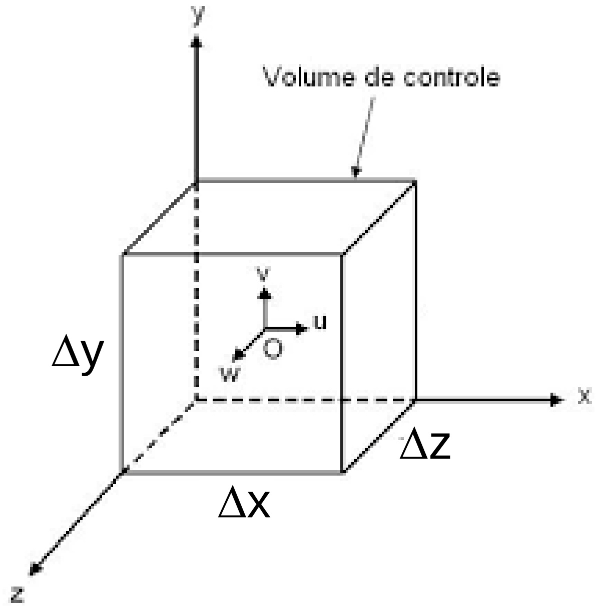
$$\left(\begin{array}{c}\text{taxa de massa}\\ \text{que entra}\\ \text{no VC}\end{array}\right) - \left(\begin{array}{c}\text{taxa de massa}\\ \text{que sai}\\ \text{do VC}\end{array}\right) \pm \left(\begin{array}{c}\text{taxa de}\\ \text{perda/acúmu-}\\ \text{lo no VC}\end{array}\right) \pm \left(\begin{array}{c}\text{taxa de}\\ \text{produção/}\\ \text{perda no VC}\end{array}\right) = 0$$

- Em termos literal:

$$\left(\begin{array}{c}\text{taxa de massa}\\ \text{que entra}\\ \text{no VC}\end{array}\right) - \left(\begin{array}{c}\text{taxa de massa}\\ \text{que sai}\\ \text{do VC}\end{array}\right) \pm \left(\begin{array}{c}\text{taxa de}\\ \text{perda/acúmu-}\\ \text{lo no VC}\end{array}\right) \pm \left(\begin{array}{c}\text{taxa de}\\ \text{produção/}\\ \text{perda no VC}\end{array}\right) = 0$$

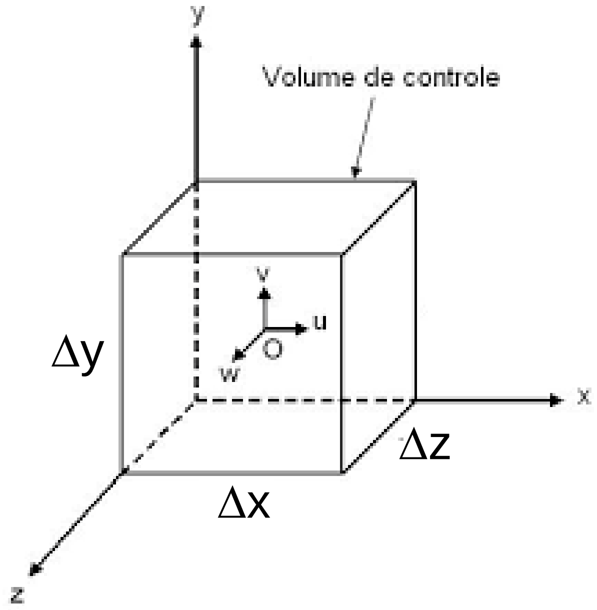
Reação química

- Considerando o seguinte elemento de volume:



FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

- Considerando o seguinte elemento de volume:



- E que $\vec{n}_A = \rho_A \, \vec{v}_A$, portanto as taxas (vazão) podem ser calculadas: $\vec{n}_A$A$_i$

FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

- Assim, a taxa líquida de efluxo (entra - sai) no VC será:

- Em X: $\vec{n}_{A,x}\,\Delta y \Delta z|_{x+\Delta x} - \vec{n}_{A,x}\,\Delta y \Delta z|_{x}$ (1)

- Assim, a taxa líquida de efluxo (entra - sai) no VC será:

- Em X: $\vec{n}_{A,x}\,\Delta y \Delta z|_{x+\Delta x} - \vec{n}_{A,x}\,\Delta y \Delta z|_{x}$ (1)

- Em Y: $\vec{n}_{A,y}\,\Delta x \Delta z|_{y+\Delta y} - \vec{n}_{A,y}\,\Delta x \Delta z|_{y}$ (2)

- Assim, a taxa líquida de efluxo (entra - sai) no VC será:

- Em X: $\vec{n}_{A,x}\, \Delta y \Delta z|_{x+\Delta x} - \vec{n}_{A,x}\, \Delta y \Delta z|_{x}$ (1)

- Em Y: $\vec{n}_{A,y}\, \Delta x \Delta z|_{y+\Delta y} - \vec{n}_{A,y}\, \Delta x \Delta z|_{y}$ (2)

- Em Z: $\vec{n}_{A,z}\, \Delta x \Delta y|_{z+\Delta z} - \vec{n}_{A,z}\, \Delta x \Delta y|_{z}$ (3)

- A taxa de acúmulo/perda pode ser calculada pela taxa de variação da concentração mássica de A no tempo.
- $$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} \qquad (4)$$

- A taxa de acúmulo/perda pode ser calculada pela taxa de variação da concentração mássica de A no tempo. Como isso dará kg/m³h, para calcular a vazão temos que multiplicar pelo volume do VC (m³):

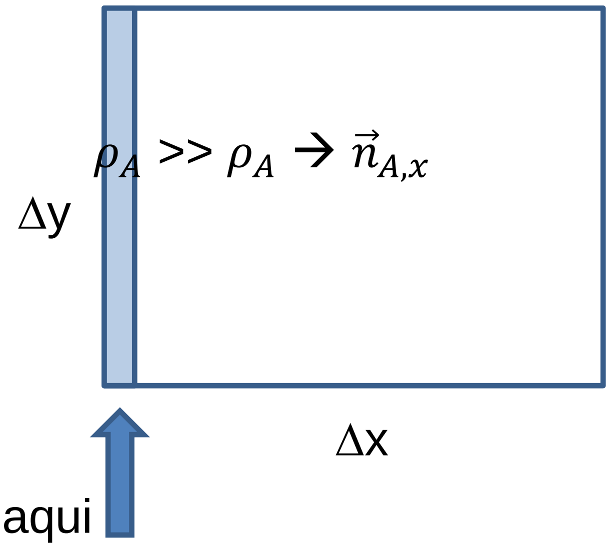
- $$\frac{\partial \rho_A}{\partial t}\,\Delta x \Delta y \Delta z \qquad (4)$$

- E a taxa de produção/perda é dada também como kg/m^{3}h, ou seja, também tem que ser multiplicada pelo volume do VC (m^3):

- $$r_A''' \Delta x \Delta y \Delta z \qquad (5)$$

- Onde r_A''' é a taxa de produção/perda de A por reação química.

Essa modelagem só é valida para o caso onde a reação ocorre em todo VC, homogeneamente. Senão, vejamos o que ocorre, na transversal de ΔZ:



Se r_A''' ocorresse apenas aqui

- Aplicando as equações 1 a 5 na equação da conservação de massa:

$$\vec{n}_{A,x}\,\Delta y\Delta z|_{x+\Delta x} - \vec{n}_{A,x}\,\Delta y\Delta z|_{x} +$$
$$\vec{n}_{A,y}\,\Delta x\Delta z|_{y+\Delta y} - \vec{n}_{A,y}\,\Delta x\Delta z|_{y} +$$
$$\vec{n}_{A,z}\,\Delta x\Delta y|_{z+\Delta z} - \vec{n}_{A,z}\,\Delta x\Delta y|_{z}$$

- Aplicando as equações 1 a 5 na equação da conservação de massa:

$$\vec{n}_{A,x}\,\Delta y\Delta z|_{x+\Delta x}-\vec{n}_{A,x}\,\Delta y\Delta z|_{x}+$$
$$\vec{n}_{A,y}\,\Delta x\Delta z|_{y+\Delta y}-\vec{n}_{A,y}\,\Delta x\Delta z|_{y}+$$
$$\vec{n}_{A,z}\,\Delta x\Delta y|_{z+\Delta z}-\vec{n}_{A,z}\,\Delta x\Delta y|_{z}+\frac{\partial\rho_A}{\partial t}\,\Delta x\Delta y\Delta z$$

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

- Aplicando as equações 1 a 5 na equação da conservação de massa:

$$\vec{n}_{A,x}\,\Delta y\Delta z|_{x+\Delta x} - \vec{n}_{A,x}\,\Delta y\Delta z|_{x} +$$
$$\vec{n}_{A,y}\,\Delta x\Delta z|_{y+\Delta y} - \vec{n}_{A,y}\,\Delta x\Delta z|_{y} +$$
$$\vec{n}_{A,z}\,\Delta x\Delta y|_{z+\Delta z} - \vec{n}_{A,z}\,\Delta x\Delta y|_{z} + \frac{\partial \rho_A}{\partial t}\,\Delta x\Delta y\Delta z$$
$$- r_A'''\Delta x\Delta y\Delta z = 0 \quad (6)$$

- Dividindo essa equação 6 pelo volume de VC:

(VC = ΔxΔyΔz)

$$\frac{\vec{n}_{A,x}\big|_{x+\Delta x} - \vec{n}_{A,x}\big|_{x}}{\Delta x} + \frac{\vec{n}_{A,y}\big|_{y+\Delta y} - \vec{n}_{A,y}\big|_{y}}{\Delta y} + \frac{\vec{n}_{A,z}\big|_{z+\Delta z} - \vec{n}_{A,z}\big|_{z}}{\Delta z} + \frac{\partial \rho_A}{\partial t} - r_A''' = 0 \quad (7)$$

FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS

FZEA USP

- E, finalmente, tomando o limite $\Delta \rightarrow 0$:

$$\frac{\partial \vec{n}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{n}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{n}_{A,z}}{\partial z} + \frac{\partial \rho_A}{\partial t} - r_A''' = 0 \quad (8)$$

- E, finalmente, tomando o limite $\Delta \rightarrow 0$:

$$\underbrace{\frac{\partial \vec{n}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{n}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{n}_{A,z}}{\partial z}}_{} + \frac{\partial \rho_A}{\partial t} - r_A''' = 0 \quad (8)$$

Mas,

$$\frac{\partial \vec{n}_{A,x}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{n}_{A,y}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{n}_{A,z}}{\partial z} = \vec{\nabla} \vec{n}_A \qquad (9)$$

Onde $\vec{\nabla}$ é o operador **Divergente**.

- Logo, a Equação da continuidade de A fica:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \vec{\nabla}\vec{n}_A = r_A''' \quad (10)$$

Ou em termos molar:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \vec{\nabla}\vec{N}_A = R_A''' \quad (11)$$

Onde R_A''' é molar: moles/m³h.

- As equações da continuidade nas coordenadas retangulares:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \left[\frac{\partial \left(n_{A,x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(n_{A,y} \right)}{\partial y} + \frac{\partial n_{A,z}}{\partial z} \right] = r_A''' \qquad (12)$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left[\frac{\partial \left(N_{A,x} \right)}{\partial x} + \frac{\partial \left(N_{A,y} \right)}{\partial y} + \frac{\partial N_{A,z}}{\partial z} \right] = R_A''' \qquad (13)$$

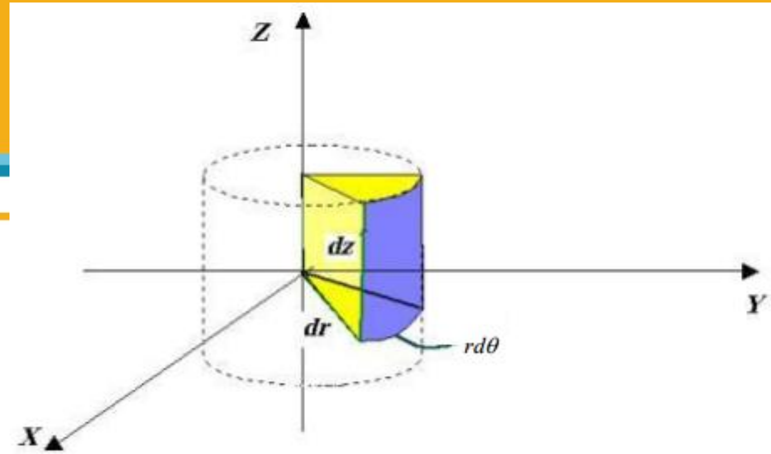
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

- Em coordenadas cilíndricas:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t}+\left[\frac{1}{r}\frac{\partial\left(r n_{A,r}\right)}{\partial r}+\frac{1}{rsen\theta}\frac{\partial\left(n_{A,\theta}\right)}{\partial \theta}+\frac{\partial n_{A,z}}{\partial z}\right]=r_A''' \qquad (14)$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t}+\left[\frac{1}{r}\frac{\partial\left(r N_{A,r}\right)}{\partial r}+\frac{1}{rsen\theta}\frac{\partial\left(N_{A,\theta}\right)}{\partial \theta}+\frac{\partial N_{A,z}}{\partial z}\right]=R_A''' \qquad (15)$$

- Em coordenadas cilíndricas:



$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t}+\left[\frac{1}{r}\frac{\partial\left(r n_{A,r}\right)}{\partial r}+\cancel{\frac{1}{r sen\theta}\frac{\partial\left(n_{A,\theta}\right)}{\partial \theta}}+\frac{\partial n_{A,z}}{\partial z}\right]=r_A'''$$

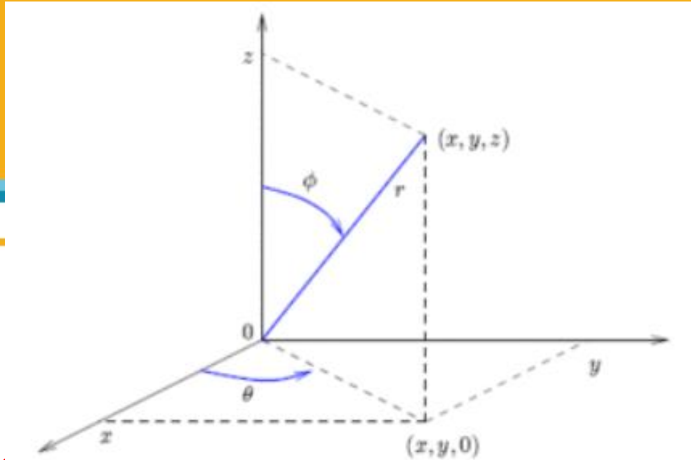
$$\frac{\partial C_A}{\partial t}+\left[\frac{1}{r}\frac{\partial\left(r N_{A,r}\right)}{\partial r}+\cancel{\frac{1}{r sen\theta}\frac{\partial\left(N_{A,\theta}\right)}{\partial \theta}}+\frac{\partial N_{A,z}}{\partial z}\right]=R_A'''$$

- Em coordenadas esféricas:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial \left(r^2 n_{A,r} \right)}{\partial r} + \frac{1}{r sen\theta} \frac{\partial \left(sen\theta n_{A,\theta} \right)}{\partial \theta} + \frac{1}{r sen\theta} \frac{\partial n_{A,\phi}}{\partial \phi} \right] = r_A''' \qquad 6)$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial \left(r^2 N_{A,r} \right)}{\partial r} + \frac{1}{r sen\theta} \frac{\partial \left(sen\theta N_{A,\theta} \right)}{\partial \theta} + \frac{1}{r sen\theta} \frac{\partial N_{A,\phi}}{\partial \phi} \right] = R_A''' \qquad (17)$$

- Em coordenadas esféricas



$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t}+\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial\left(r^2 n_{A,r}\right)}{\partial r}+\cancel{\frac{1}{rsen\theta}\frac{\partial\left(sen\theta n_{A,\theta}\right)}{\partial \theta}}+\cancel{\frac{1}{rsen\theta}\frac{\partial n_{A,\phi}}{\partial \phi}}\right]=r_A'''$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t}+\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial\left(r^2 N_{A,r}\right)}{\partial r}+\cancel{\frac{1}{rsen\theta}\frac{\partial\left(sen\theta N_{A,\theta}\right)}{\partial \theta}}+\cancel{\frac{1}{rsen\theta}\frac{\partial N_{A,\phi}}{\partial \phi}}\right]=R_A'''$$

FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS

FZEA USP

- Para o componente B, a abordagem é a mesma, e portanto, a sua equação da continuidade é:

$$\frac{\partial \rho_B}{\partial t} + \vec{\nabla}\vec{n}_B = r_B''' \qquad (18)$$

Ou

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} + \vec{\nabla}\vec{N}_B = R_B''' \qquad (19)$$

II. Equação da continuidade de sistema binário

- Agora, vamos trabalhar com sistema binário [ex.: solução formada por soluto (A) e solvente (B)]. A respectiva EC será obtida pela soma das EC de cada componente:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \frac{\partial \rho_B}{\partial t} + \vec{\nabla}\vec{n}_A + \vec{\nabla}\vec{n}_B = r_A''' + r_B''' \quad (20)$$

II. Equação da continuidade de sistema binário

- Agora, vamos trabalhar com sistema binário [ex.: solução formada por soluto (A) e solvente (B)]. A respectiva EC será obtida pela soma das EC de cada componente:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \frac{\partial \rho_B}{\partial t} + \vec{\nabla}\vec{n}_A + \vec{\nabla}\vec{n}_B = r_A''' + r_B''' \quad (20)$$

- Como a soma das derivadas é a derivada da soma:

$$\frac{\partial (\rho_A + \rho_B)}{\partial t} + \vec{\nabla}(\vec{n}_A + \vec{n}_B) = r_A''' + r_B''' \quad (21)$$

FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

- Vimos na primeira aula que: $\rho_A + \rho_B = \rho$

FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

- Vimos na primeira aula que: $\rho_A + \rho_B = \rho$
- Mas, e $\vec{\nabla}(\vec{n}_A + \vec{n}_B)$?

- Vimos na primeira aula que: $\rho_A + \rho_B = \rho$
- Mas, e $\vec{\nabla}(\vec{n}_A + \vec{n}_B)$?
- Vimos também que:

$$\vec{n}_A + \vec{n}_B = \rho_A \overrightarrow{v_A} + \rho_B \overrightarrow{v_B} \quad (22)$$

- Vimos na primeira aula que: $\rho_A + \rho_B = \rho$
- Mas, e $\vec{\nabla}(\vec{n}_A + \vec{n}_B)$?
- Vimos também que:

$$\vec{n}_A + \vec{n}_B = \rho_A \overrightarrow{v_A} + \rho_B \overrightarrow{v_B} \quad (22)$$

E, que do conceito da velocidade média mássica, temos:

$$\vec{v} = \frac{\rho_A \overrightarrow{v_A} + \rho_B \overrightarrow{v_B}}{\rho_A + \rho_B} \quad (23)$$

- Portanto:

$$\rho\vec{v} = \rho_A\overrightarrow{v_A} + \rho_B\overrightarrow{v_B} = \vec{n} \qquad (24)$$

- Portanto:

$$\rho\vec{v} = \rho_A\overrightarrow{v_A} + \rho_B\overrightarrow{v_B} = \vec{n} \qquad (24)$$

E, então, a equação 20 fica, com $\underline{r_A''' = -r_B'''}$:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\vec{n} = 0 \qquad (25) \qquad \text{ou}$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho\vec{v}) = 0 \qquad (26)$$

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

- Fazendo uma análise vetorial na equação 26:

$$\vec{\nabla}(\rho\vec{v}) = \vec{v}.\vec{\nabla}\rho + \rho\vec{\nabla}\vec{v} \qquad (27)$$

- Fazendo uma análise vetorial na equação 26:

$$\vec{\nabla}(\rho\vec{v}) = \vec{v}.\vec{\nabla}\rho + \rho\vec{\nabla}\vec{v} \qquad (27)$$

E, substituindo essa equação 27 na equação 26:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{v}.\vec{\nabla}\rho + \rho\vec{\nabla}\vec{v} = 0 \qquad (28)$$

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

Da definição da derivada substantiva (de um escalar):

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{v}.\vec{\nabla}\rho \qquad (29)$$

Da definição da derivada substantiva (de um escalar):

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v}.\vec{\nabla}\rho \qquad (29)$$

Logo, a equação 28 pode ser apresentada assim:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho.\vec{\nabla}\vec{v} = 0 \quad (30)$$

FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS

FZEA USP

- Quando as EC forem escritas em molar, as respectivas equações 25 e 26, ficam assim:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{\nabla}\,\vec{N} = R_A''' + R_B''' \quad (31)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{\nabla}(C\vec{V}) = R_A''' + R_B''' \quad (32)$$

Porque $R_A''' \neq -R_B'''$

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

III. Equação da continuidade do soluto A em termos da lei ordinária da difusão

- **EC de A em termos de Difusão**

Recordando: a equação da difusão é conhecida como a **Lei de Fick**:

$$\overrightarrow{n_A} = -\rho D_{AB}\vec{\nabla} w_A = -D_{AB}\vec{\nabla}\rho_A \quad (33)$$

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS

FZEA USP

III. Equação da continuidade do soluto A em termos da lei ordinária da difusão

- **EC de A em termos de Difusão**

Recordando: a equação da difusão é conhecida como a **Lei de Fick**:

$$\overrightarrow{n_A} = -\rho D_{AB}\vec{\nabla} w_A = -D_{AB}\vec{\nabla}\rho_A \quad (33)$$

Ou **Equação de Fick Generalizada**:

$$\overrightarrow{n_A} = -\rho D_{AB}\vec{\nabla} w_A + w_A(\overrightarrow{n_A} + \overrightarrow{n_B}) \quad (34)$$

Trabalhando o termo da direita da equação 34 $[w_A(\overrightarrow{n_A} + \overrightarrow{n_B})]$ com o conceito da velocidade média mássica verificamos que a soma dos fluxos $\overrightarrow{n_A} + \overrightarrow{n_B}$=$\rho\vec{v}$.

Trabalhando o termo da direita da equação 34 $[w_A(\overrightarrow{n_A} + \overrightarrow{n_B})]$ com o conceito da velocidade média mássica verificamos que a soma dos fluxos $\overrightarrow{n_A} + \overrightarrow{n_B} = \rho\vec{v}$.

Então, a equação 34 pode ficar assim:

$$\overrightarrow{n_A} = -\rho D_{AB}\vec{\nabla} w_A + \rho_A\vec{v} \quad (35)$$

Pois, $w_A\rho = \rho_A$

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

Então, substituindo a equação 35 na equação 10, temos:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \vec{\nabla}(-\rho D_{AB}\vec{\nabla} w_A + \rho_A \vec{v}) = r_A''' \quad (36)$$

Que pode ser reapresentada da seguinte forma:

- Em termos mássico:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho_A \vec{v}) = \vec{\nabla}\left(\rho D_{AB} \vec{\nabla} w_A\right) + r_A''' \quad (37)$$

- Em termos molar:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \vec{\nabla}\left(C_A \vec{V}\right) = \vec{\nabla}\left(C D_{AB} \vec{\nabla} x_A\right) + R_A''' \quad (38)$$

- Descrevendo as contribuições:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho_A \vec{v}) = \vec{\nabla}\left(\rho D_{AB} \vec{\nabla} w_A\right) + r_A'''$$

- Em termos molar:

$$\underbrace{\frac{\partial C_A}{\partial t}}_{\text{Acúmulo}} + \underbrace{\vec{\nabla}\left(C_A \vec{V}\right)}_{\substack{\text{Contribuição} \\ \text{convectiva}}} = \underbrace{\vec{\nabla}\left(C D_{AB} \vec{\nabla} x_A\right)}_{\substack{\text{Contribuição} \\ \text{difusiva}}} + \underbrace{R_A'''}_{\substack{\text{Produção} \\ \text{ou perda}}}$$

FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS

FZEA USP

IV. Simplificações da equação da continuidade

- **Simplificações da EC: Primeiro caso -** Regime transiente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade constante, e sem reação química.

Então $\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho_A \vec{v}) = \vec{\nabla}\left(D_{AB}\vec{\nabla}\rho_A\right) + \cancel{r_A'''}$

IV. Simplificações da equação da continuidade

- **Simplificações da EC: Primeiro caso -** Regime transiente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade constante, e sem reação química.

Então $$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho_A \vec{v}) = \vec{\nabla}\left(D_{AB}\vec{\nabla}\rho_A\right) + \cancel{r_A'''}$$

Portanto:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \vec{v}.\vec{\nabla}\rho_A = \overbrace{D_{AB}}^{\text{constante}}\vec{\nabla}\left(\vec{\nabla}\rho_A\right) \quad (39)$$

- Como $\vec{\nabla}.\vec{\nabla} = \nabla^2$, conhecido como **Laplaciano**, a equação 39 pode ser apresentada assim:

$$\boxed{\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \vec{v}.\vec{\nabla}(\rho_A) = D_{AB}\nabla^2\rho_A} \quad (40)$$

Essa equação deve ser usada se quiser estudar a difusão do sal para dentro do rio Amazonas, por exemplo.

Segundo caso - Regime transiente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade nula (TM em sólidos ou meios imobilizado), e sem reação química.

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \vec{\nabla}.\left(C_A\vec{V}\right) = \vec{\nabla}\left(D_{AB}\vec{\nabla}C_A\right) + \cancel{R_A'''}$$

FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS

FZEA USP

Segundo caso - Regime transiente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade nula (TM em sólidos ou meios imobilizado), e sem reação química.

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \vec{\nabla}.\left(\cancel{C_A}\vec{V}\right) = \vec{\nabla}\left(D_{AB}\vec{\nabla}C_A\right) + \cancel{R_A'''}$$

FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

Segundo caso - Regime transiente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade nula (TM em sólidos ou meios imobilizado), e sem reação química.

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \vec{\nabla}.\left(\cancel{C_A}\vec{V}\right) = \vec{\nabla}\left(D_{AB}\vec{\nabla}C_A\right) + \cancel{R_A'''}$$

Portanto

$$\boxed{\frac{\partial c_A}{\partial t} = D_{AB}\nabla^2 C_A} \quad (41)$$

Conhecida como **equação da difusão**.

Terceiro caso - Regime permanente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade constante, e sem reação química.

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \vec{\nabla}\left(C_A\vec{V}\right) = \vec{\nabla}\left(D_{AB}\vec{\nabla}C_A\right) + \cancel{R_A'''}$$

Terceiro caso - Regime permanente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade constante, e sem reação química.

$$\cancel{\frac{\partial C_A}{\partial t}} + \vec{\nabla}\left(C_A\vec{V}\right) = \vec{\nabla}\left(D_{AB}\vec{\nabla}C_A\right) + \cancel{R_A'''}$$

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

Terceiro caso - Regime permanente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade constante, e sem reação química.

$$\cancel{\frac{\partial C_A}{\partial t}} + \vec{\nabla}(C_A\vec{V}) = \vec{\nabla}(D_{AB}\vec{\nabla}C_A) + \cancel{R_A'''}$$

Portanto :

constantes

$$\boxed{\vec{V}.\vec{\nabla}C_A = D_{AB}\nabla^2 C_A} \quad (42)$$

Essa equação será útil no estudo da camada limite.

Quarto caso - Regime permanente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade nula (TM em sólidos ou meios imobilizado), e sem reação química.

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho_A \vec{v}) = \vec{\nabla}\left(D_{AB} \vec{\nabla} \rho_A\right) + \cancel{r_A'''}$$

Quarto caso - Regime permanente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade nula (TM em sólidos ou meios imobilizado), e sem reação química.

$$\cancel{\frac{\partial \rho_A}{\partial t}} + \vec{\nabla}(\rho_A \vec{v}) = \vec{\nabla}\left(D_{AB} \vec{\nabla} \rho_A\right) + \cancel{r_A'''}$$

Quarto caso - Regime permanente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade nula (TM em sólidos ou meios imobilizado), e sem reação química.

$$\cancel{\frac{\partial \rho_A}{\partial t}} + \vec{\nabla}(\cancel{\rho_A \vec{v}}) = \vec{\nabla}\left(D_{AB}\vec{\nabla}\rho_A\right) + \cancel{r_A'''}$$

Quarto caso - Regime permanente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade nula (TM em sólidos ou meios imobilizado), e sem reação química.

$$\cancel{\frac{\partial \rho_A}{\partial t}} + \vec{\nabla}(\cancel{\rho_A \vec{v}}) = \vec{\nabla}\left(D_{AB}\vec{\nabla}\rho_A\right) + \cancel{r_A'''}$$

Portanto: $D_{AB}\nabla^2\rho_A = 0$

Quarto caso - Regime permanente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade nula (TM em sólidos ou meios imobilizado), e sem reação química.

$$\cancel{\frac{\partial \rho_A}{\partial t}} + \vec{\nabla}(\cancel{\rho_A \vec{v}}) = \vec{\nabla}\left(D_{AB}\vec{\nabla}\rho_A\right) + \cancel{r_A'''}$$

Portanto: $D_{AB}\nabla^2\rho_A = 0$, logo $\boxed{\nabla^2\rho_A = 0}$ (43)

Pois $D_{AB} \neq 0$

Quarto caso - Regime permanente, temperatura e pressão constantes no meio onde ocorre a TM, com velocidade nula (TM em sólidos ou meios imobilizado), e sem reação química.

$$\cancel{\frac{\partial \rho_A}{\partial t}} + \vec{\nabla}(\cancel{\rho_A \vec{v}}) = \vec{\nabla}\left(D_{AB}\vec{\nabla}\rho_A\right) + \cancel{r_A'''}$$

Portanto: $D_{AB}\nabla^2\rho_A = 0$, logo $\boxed{\nabla^2\rho_A = 0}$ (43)

Conhecida como **Equação de Laplace**.

Uma outra abordagem desse último caso, que será motivo das próximas aulas, considera a EC como as equações 10 e 11:

$$\cancel{\frac{\partial \rho_A}{\partial t}} + \vec{\nabla}\,\vec{n}_A = \cancel{r_A'''} \quad \text{ou} \quad \cancel{\frac{\partial C_A}{\partial t}} + \vec{\nabla}\,\vec{N}_A = \cancel{R_A'''}$$

Que se apresentam assim:

$$\vec{\nabla}\,\vec{n}_A = 0 \quad \text{ou} \quad \vec{\nabla}\,\vec{N}_A = 0 \quad (43a)$$

Nesse caso, serão necessárias **simplificações da equação generalizada de Fick**.

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

Um olhar especial na equação 10:

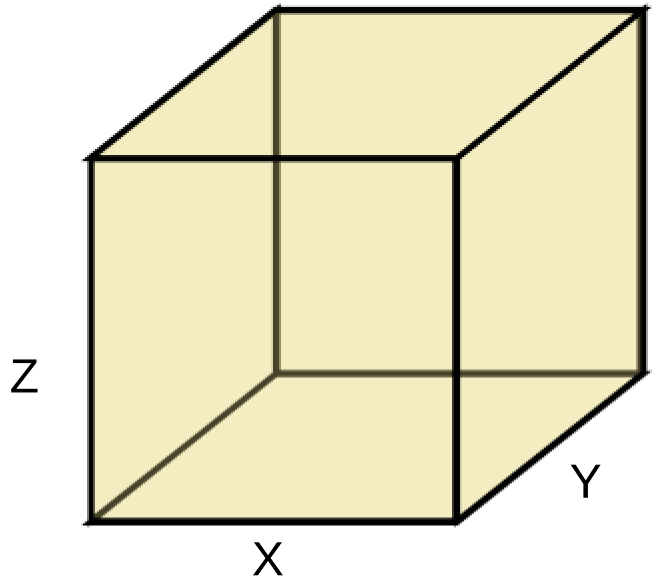
$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = D_{AB}\nabla^2 C_A$$

Ou

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D_{AB}\nabla^2 \rho_A$$

Equação da difusão em coordenadas retangulares:

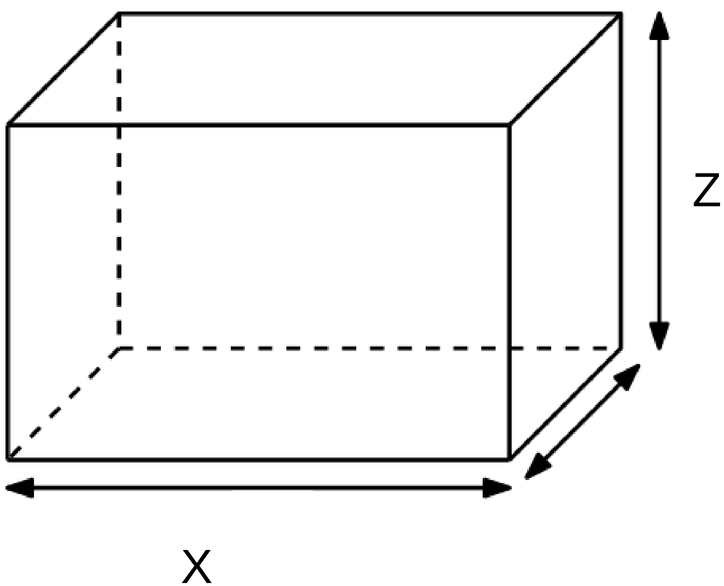
$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D_{AB}\left(\frac{\partial^2 \rho_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial z^2}\right) \quad (44a)$$



$Z \approx X \approx Y$

Equação da difusão em coordenadas retangulares:

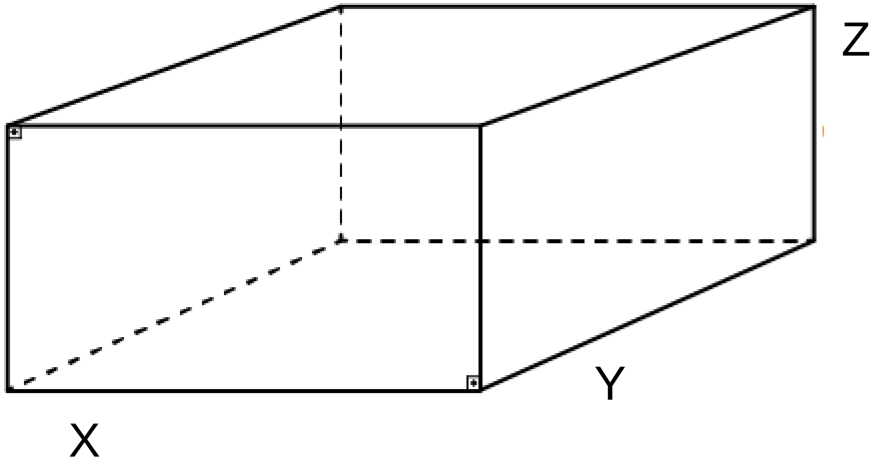
$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D_{AB}\left(\frac{\partial^2 \rho_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial z^2}\right) \quad (44b)$$



X > Z ≈ Y

Equação da difusão em coordenadas retangulares:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D_{AB} \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial z^2} \quad (44c)$$

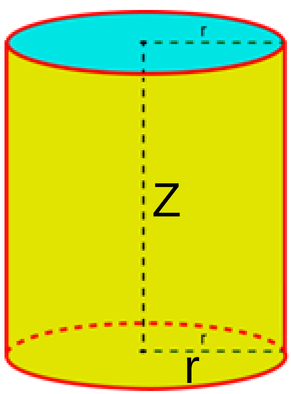


Z << Y ≈ Z

Placa Plana

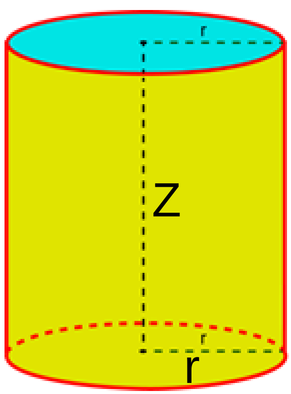
Equação da difusão em coordenadas cilíndricas:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D_{AB}\left(\frac{\partial^2 \rho_A}{\partial z^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial \rho_A}{\partial r} + \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial \rho_A}{\partial \theta}\right) \quad (45a)$$



Equação da difusão em coordenadas cilíndricas:

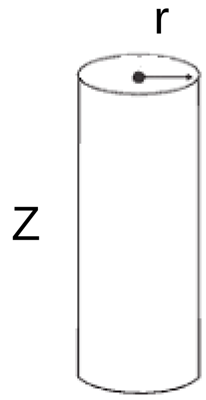
$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D_{AB}\left(\frac{\partial^2 \rho_A}{\partial z^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial \rho_A}{\partial r} + \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\cancel{\frac{\partial \rho_A}{\partial \theta}}\right) \quad (45a)$$



Z ≈ r

Equação da difusão em coordenadas cilíndricas:

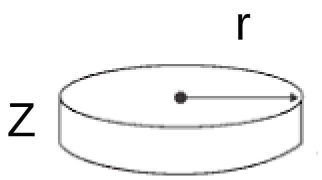
$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D_{AB}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \rho_A}{\partial r} + \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial r^2}\right) \quad (45b)$$



Z >> r (10x)

Equação da difusão em coordenadas cilíndricas:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D_{AB}\frac{\partial^2 \rho_A}{\partial z^2} \qquad (45c = 44c)$$



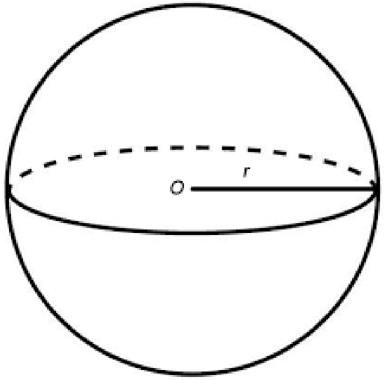
Z << r   Placa Plana

Equação da difusão em coordenadas esféricas:

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D_{AB}[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial \rho_A}{\partial r})$$

$$\cancel{+\frac{1}{r^2 sen\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(sen\theta\frac{\partial \rho_A}{\partial \theta}\right)} + \cancel{\frac{1}{r^2 sen\theta}\frac{\partial^2 \rho_A}{\partial \phi^2}}] \qquad (46a)$$

$$\rightarrow \frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D_{AB}[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial \rho_A}{\partial r})] \qquad (46b)$$



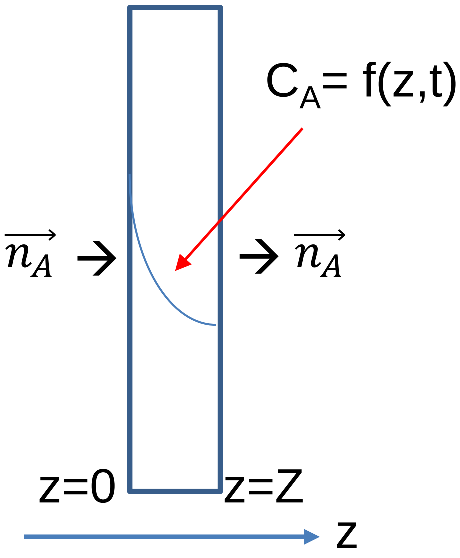
FZEA USP

- **Condições de contorno:**

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D_{AB}\frac{\partial^2 \rho_A}{\partial z^2} \qquad (45c)$$

Ou

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = D_{AB}\frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \qquad (46)$$



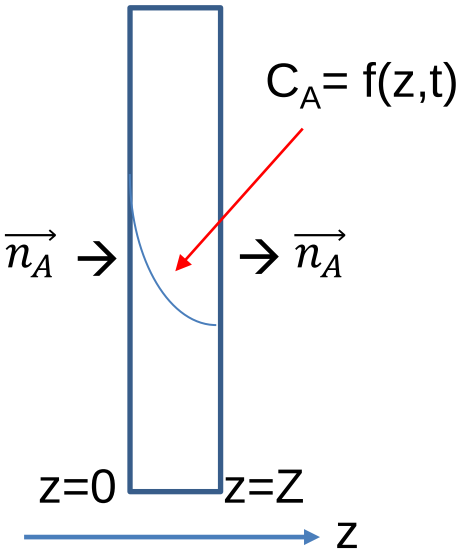
V. Condições de contorno

- **Condições de contorno:**

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D_{AB}\frac{\partial^2 \rho_A}{\partial z^2} \quad (45c)$$

Ou

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = D_{AB}\frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \quad (46)$$



1 condição – condição inicial

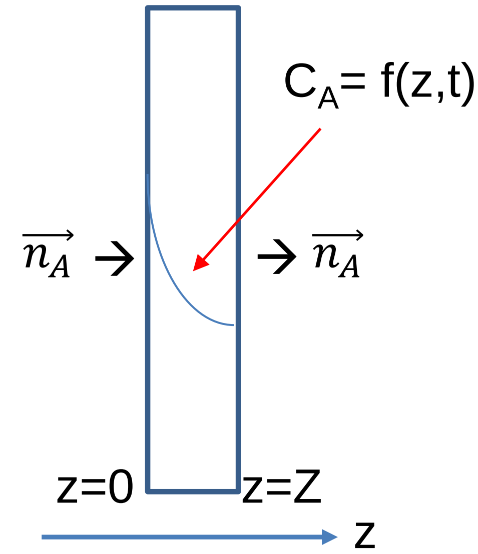
V. Condições de contorno

- **Condições de contorno:**

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = D_{AB}\frac{\partial^2 \rho_A}{\partial z^2} \qquad (45c)$$

Ou

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = D_{AB}\frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \qquad (46)$$



2 condições – condição de superfície, ou de simetria (no centro do meio onde ocorre a difusão)

1 condição – condição inicial

- **Condição inicial**

É necessário se conhecer o valor da concentração de A no meio onde ocorre a difusão.

Em t < 0 não ocorre difusão, portanto, em t = 0 a concentração deve ser constante e homogênea no meio.

Se escreve assim:

CI: $t = 0 \rightarrow C_A = C_{A0}$

ou $t = 0 \rightarrow \rho_A = \rho_{A0}$

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

- **Condição de contorno 1**

É necessário se conhecer o valor da concentração de A na superfície externa do meio, por onde A está entrando ou saindo.

a) Quando se conhece o valor experimentalmente, ou pela literatura:

CC1: em $\boxed{z = Z \rightarrow C_A = C_{AS}}$

ou $\boxed{r = R \rightarrow C_A = C_{AS}}$

p/ gases $\boxed{z = Z \rightarrow y_A = y_{AS}}$

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS
FZEA USP

b) Quando se pode calcular o valor da concentração por modelos termodinâmicos:

- Para sistemas gasosos:

em $\boxed{z = Z \rightarrow y_A = y_{AS} = p_A/P}$

Onde p_A é a pressão parcial de A e P= pressão total

b) Quando se pode calcular o valor da concentração por modelos termodinâmicos:

- Para sistemas gasosos:

em $\boxed{z = Z \rightarrow y_A = y_{AS} = p_A/P}$

Onde p_A é a pressão parcial de A e P= pressão total

- Para sistema líquido, solução ideal:

em $\boxed{z = Z \rightarrow x_A = x_{AS} = p_{AS}/p^o}$

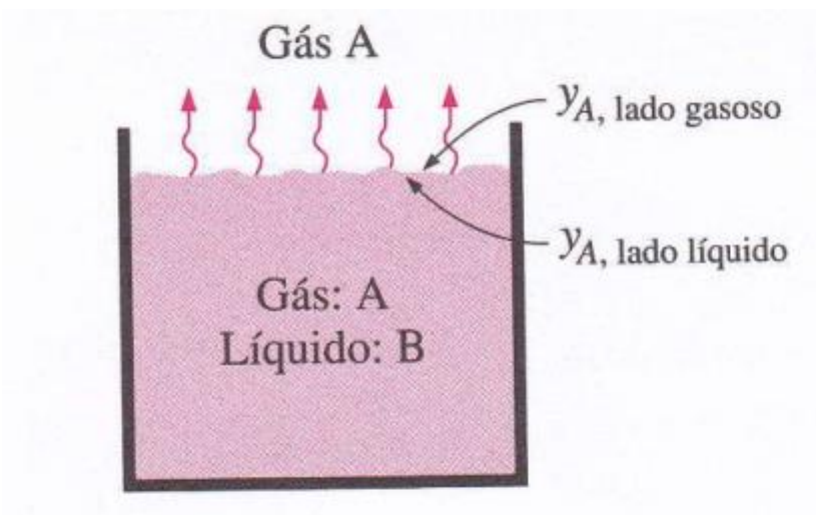
Onde p_{AS} é a pressão de vapor da solução e p^o é a pressão de saturação (do solvente puro)

- Para fronteira em sistema liquido-gasoso:

Utilizar correlações envolvendo Leis de Raoult, de Dalton, dos Gases Ideais, etc, que correlacionem x_A com y_A.

- Para fronteira em sistema liquido-gasoso:

Utilizar correlações envolvendo Leis de Raoult, de Dalton, dos Gases Ideais, etc, que correlacionem x_A com y_A.



$$y_{A,\text{ lado gasoso}} \propto y_{A,\text{ lado líquido}}$$

ou

$$\frac{P_{A,\text{ lado gasoso}}}{P} \propto y_{A,\text{ lado líquido}}$$

ou

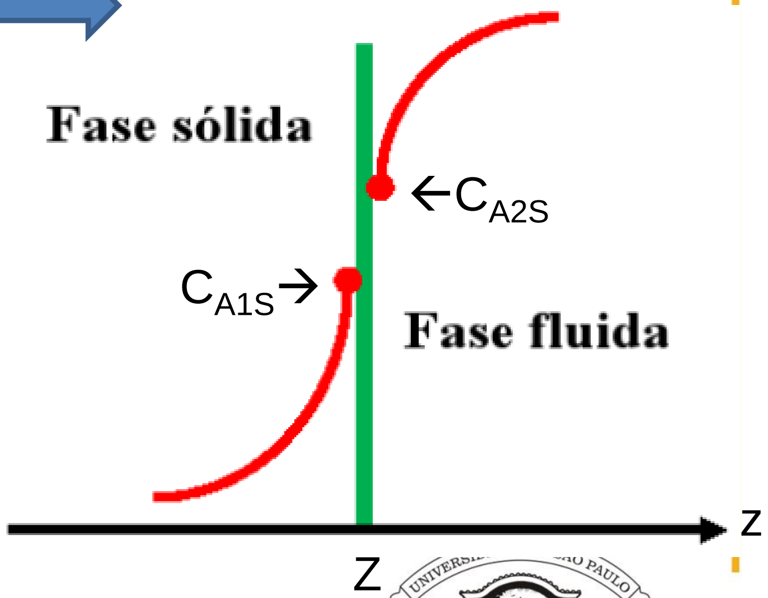
$$P_{A,\text{ lado gasoso}} = H y_{A,\text{ lado líquido}}$$

TABELA 14–6

Constante de Henry H (em bar) para gases selecionados em água para pressões baixas a moderadas (para o gás i, $H = P_{i,\text{lado gasoso}} / y_{i,\text{lado líquido}}$) (de Mills, 1995; Tabela A.21)

Soluto	290 K	300 K	310 K	320 K	330 K	340 K
H_2S	440	560	700	830	980	1140
CO_2	1280	1710	2170	2720	3220	—
O_2	38000	45000	52000	57000	61000	65000
H_2	67000	72000	75000	76000	77000	76000
CO	51000	60000	67000	74000	80000	84000
Ar	62000	74000	84000	92000	99000	104000
N_2	76000	89000	101000	110000	118000	124000

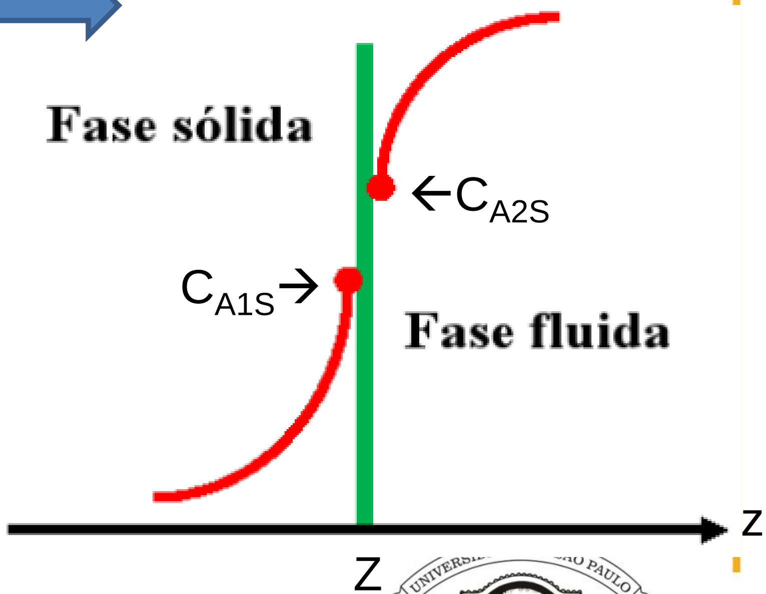
- Para fronteira em sistemas sólido-fluido:



- Para fronteira em sistemas sólido-fluido:

$$\boxed{\text{Em } z = Z \rightarrow C_{A1S} = Kp\, C_{A2S}}$$

Onde Kp é o coeficiente de partição, ou de distribuição.



c) Quando não se tem condições de determinar e nem calcular a concentração de A, mas se conhece o fluxo na fronteira (em z = Z) de um sistema sólido-fluido, por exemplo.

Condição de fluxo:

- Fluxo entrando/saindo do meio de difusão (in):

$$\left.\overrightarrow{N_A}\right|_{z=Z} = -D_{ap}\left.\frac{\partial C_A}{\partial z}\right|_{z=Z} \quad (47)$$

c) Quando não se tem condições de determinar e nem calcular a concentração de A, mas se conhece o fluxo na fronteira (em z = Z) de um sistema sólido-fluido, por exemplo.

Condição de fluxo:

- Fluxo entrando/saindo do meio de difusão (in):

$$\overrightarrow{N_A}\Big|_{z=Z} = -D_{ap}\frac{\partial c_A}{\partial z}\Big|_{z=Z} \quad (47)$$

- Fluxo saindo/entrando no meio de difusão (out):

$$\overrightarrow{N_A} = k_m(CA_{2s} - CA_{2\infty}) \quad (48)$$

Igualando as equações 48 e 49:

$$-D_{ap}\left.\frac{\partial C_A}{\partial z}\right|_{z=Z} = k_m(C_{A2s} - C_{A2\infty}) \quad (49)$$

Igualando as equações 48 e 49:

$$-D_{ap}\left.\frac{\partial c_A}{\partial z}\right|_{z=Z} = k_m(C_{A2s} - C_{A2\infty}) \quad (49)$$

Sabendo que $C_{A1S} = Kp\ C_{A2S} \rightarrow C_{A2S} = C_{A1S}/Kp$, então

Igualando as equações 48 e 49:

$$-D_{ap}\left.\frac{\partial C_A}{\partial z}\right|_{z=Z} = k_m(C_{A2s} - C_{A2\infty}) \quad (49)$$

Sabendo que $C_{A1S} = Kp\, C_{A2S} \rightarrow C_{A2S} = C_{A1S}/Kp$, então

$$-D_{ap}\left.\frac{\partial C_A}{\partial z}\right|_{z=Z} = k_m(C_{A1S}/Kp - C_{A2\infty}) \quad (50)$$

Igualando as equações 48 e 49:

$$-D_{ap}\left.\frac{\partial C_A}{\partial z}\right|_{z=Z} = k_m(C_{A2s} - C_{A2\infty}) \quad (49)$$

Sabendo que $C_{A1S} = Kp\ C_{A2S} \rightarrow C_{A2S} = C_{A1S}/Kp$, então

$$-D_{ap}\left.\frac{\partial C_A}{\partial z}\right|_{z=Z} = k_m(C_{A1S}/Kp - C_{A2\infty}) \quad (50)$$

que fica

$$-D_{ap}\left.\frac{\partial C_A}{\partial z}\right|_{z=Z} = \frac{k_m}{Kp}\ (C_{A1S} - Kp\ C_{A2\infty}) \quad (51)$$

Rearranjando a equação 51:

$$\left.\frac{\partial C_A}{\partial z}\right|_{z=Z} = \frac{k_m}{D_{ap}Kp}\left(\mathrm{C}^*_{\mathrm{A1}} - C_{A1S}\right) \quad (52)$$

Onde $\mathrm{C}^*_{\mathrm{A1}} = \mathrm{Kp}\, C_{A2\infty}$.

Rearranjando a equação 51:

$$\left.\frac{\partial C_A}{\partial z}\right|_{z=Z} = \frac{k_m}{D_{ap}Kp}\left(\mathrm{C}^*_{\mathrm{A1}} - C_{A1S}\right) \quad (52)$$

Onde $\mathrm{C}^*_{\mathrm{A1}} = \mathrm{Kp}\, C_{A2\infty}$. Multiplicando a equação 52 pela semi-espessura (s) do meio de difusão:

$$\boxed{\left.\frac{\partial C_A}{\partial z'}\right|_{z'=1} = Bi_M \left(\mathrm{C}^*_{\mathrm{A1}} - C_{A1S}\right)} \quad (53)$$

Onde Bi_M é número de Biot de massa:

$$Bi_M = \frac{s\, k_m}{D_{ap}Kp}$$

Recordando:

$$Bi_M = \frac{s/D_{ap}}{Kp/k_m}$$

Ou seja

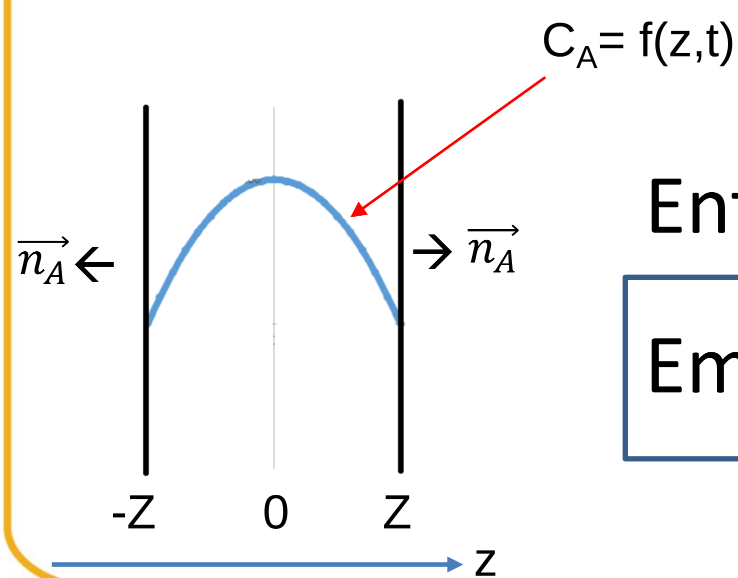
Bi_M = Resistência interna/resistência externa

- **Condição de contorno 2**

Considerando uma placa plana, a segunda superfície pode ser o meio da placa. E, dado que os fluxos em ambas as faces sejam iguais, o meio da placa constitui um ponto de simetria.

Condição de contorno 2

Considerando uma placa plana, a segunda superfície pode ser o meio da placa. E, dado que os fluxos em ambas as faces sejam iguais, o meio da placa constitui um ponto de simetria.



Então, nessa situação:

$$\boxed{\text{Em } z = 0 \rightarrow \frac{\partial C_A}{\partial z} = 0}$$

Para coordenadas radiais (esfera ou cilindro):

Em r = 0 → $\dfrac{Lim(C_A)}{r \to 0}$ = finito

FACULDADE DE ZOOTECNIA E ENGENHARIA DE ALIMENTOS

FZEA USP

Então, poderemos agora, resolver as equações diferenciais para poder calcular o fluxo ou o perfil de concentração de A no espaço e no tempo e da concentração média no tempo :

$$[C_A = f(z,t) \rightarrow \overline{C}_A = f(t)].$$

VI. Exercícios

- Para exercitarem:

1) Demonstrem detalhadamente a equação 35 a partir da equação 34 (último termo da direita).
2) Demonstrem que as equações da difusão em coordenadas radiais são similares na esfera e no cilindro.
3) Reflitam sobre a relação entre Bi_M e Re.

- Boa semana a todos e a todas...