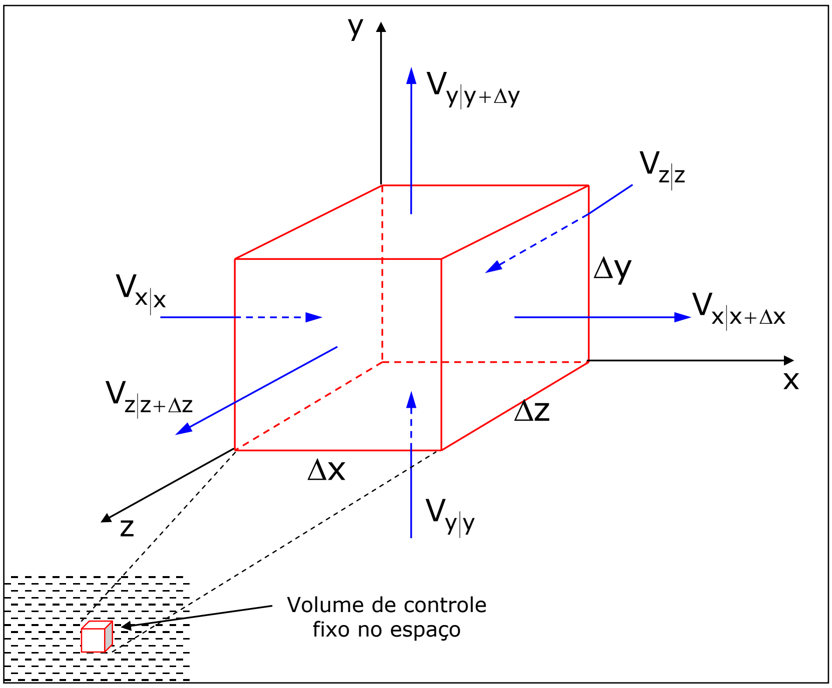
2 - Equação de Conservação da Massa

Procuramos uma equação que descreva a distribuição de concentração (massa) de uma espécie em função do tempo e da posição em um meio material.

2.1 - Equação da Continuidade

A equação da continuidade é obtida quando aplicamos o princípio da conservação da massa em um volume infinitesimal fixo o espaço, através do qual um fluido escoa.



Para um sistema com um único componente, fluido puro, e desprezando-se geração/consumo, temos:

Variação da massa	=	Massa que entra	-	Massa que sai

A variação da massa, ou acúmulo, no elemento de volume é dada por:

$$\boxed{\frac{\partial m}{\partial t} = \Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial \rho}{\partial t}}$$

ρ é a densidade do fluido

Aplicando-se o conceito da conservação da massa:

$$\rho V_{x|x} \Delta y \Delta z + \rho V_{y|y} \Delta x \Delta z + \rho V_{z|z} \Delta x \Delta y =$$

$$= \rho V_{x|x+\Delta x} \Delta y \Delta z + \rho V_{y|y+\Delta y} \Delta x \Delta z + \rho V_{z|z+\Delta z} \Delta x \Delta y + \Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

Dividindo-se a expressão acima pelo volume $\Delta x \Delta y \Delta z$, e tomando-se o limite quando Δx, Δy e Δz tendem a zero, temos:

$$\boxed{\frac{\partial(\rho V_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho V_z)}{\partial z} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0}$$

Forma diferencial da equação da continuidade

Aplicando-se a regra do produto nas derivadas acima:

$$\frac{\partial(\rho V_x)}{\partial x} = \rho \frac{\partial V_x}{\partial x} + V_x \frac{\partial \rho}{\partial x} \qquad \frac{\partial(\rho V_y)}{\partial y} = \rho \frac{\partial V_y}{\partial y} + V_y \frac{\partial \rho}{\partial y}$$

$$\frac{\partial(\rho V_z)}{\partial z} = \rho \frac{\partial V_z}{\partial z} + V_z \frac{\partial \rho}{\partial z}$$

Assim:

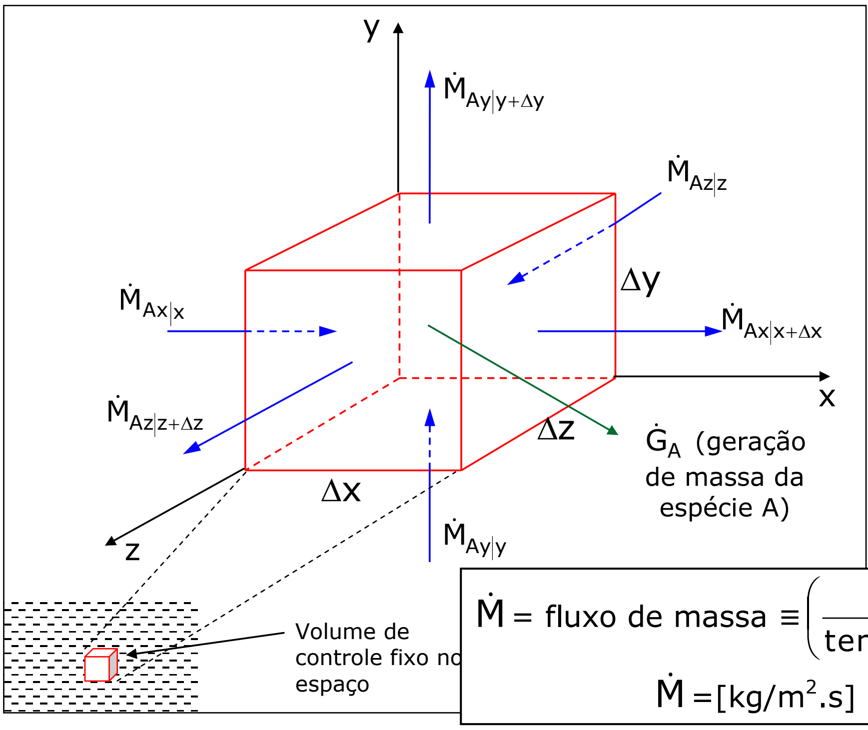
$$\rho\left(\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z}\right) + \left(V_x \frac{\partial \rho}{\partial x} + V_y \frac{\partial \rho}{\partial y} + V_z \frac{\partial \rho}{\partial z}\right) + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

Para um escoamento incompressível (ρ=cte), em regime permanente:

$$\left(\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z}\right) = 0$$

2.2 - Conservação da Massa de um Componente A da Mistura

O princípio da conservação da massa aplicado a um composto (soluto) contido no elemento de fluido (mistura).



$$\dot{M} = \text{fluxo de massa} \equiv \left(\frac{\text{massa}}{\text{tempo x área}}\right)$$

$$\dot{M} = [\text{kg/m}^2.\text{s}]$$

Esquematicamente:

Variação da massa	=	Massa que entra	-	Massa que sai	+	Massa gerada / consumida

A variação da massa, ou acúmulo, no elemento de volume é dada por:

$$\boxed{\frac{\partial m_A}{\partial t} = \Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial C_A}{\partial t}}$$

C_A= concentração de A (massa/volume)

A massa gerada ou consumida (reações químicas) é representada por $\dot{G}_A$ e dependerá da cinética da reação.

$\dot{G}_A$ = geração de massa por unidade de tempo;

$\dot{G}_A = \dot{g}_A \Delta x \Delta y \Delta z$

$\dot{g}_A$ = geração de massa por unidade de tempo e volume.

Aplicando o conceito da conservação da massa:

$$\dot{M}_{Ax|x}\Delta y\Delta z + \dot{M}_{Ay|y}\Delta x\Delta z + \dot{M}_{Az|z}\Delta x\Delta y + \dot{g}_A\Delta x\Delta y\Delta z =$$
$$= \dot{M}_{Ax|x+\Delta x}\Delta y\Delta z + \dot{M}_{Ay|y+\Delta y}\Delta x\Delta z + \dot{M}_{Az|z+\Delta z}\Delta x\Delta y +$$
$$+ \Delta x\Delta y\Delta z\frac{\partial C_A}{\partial t}$$

Dividindo-se a expressão acima pelo volume $\Delta x\Delta y\Delta z$, e tomando-se o limite quando Δx, Δy e Δz tendem a zero, temos:

$$\boxed{\frac{\partial \dot{M}_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial \dot{M}_{Ay}}{\partial y} + \frac{\partial \dot{M}_{Az}}{\partial z} + \frac{\partial C_A}{\partial t} - \dot{g}_A = 0}$$

O fluxo de massa, $\dot{M}_A$, acontece devido a dois mecanismos: a difusão molecular e um mecanismo envolvendo o movimento geral do fluido (convecção), sendo $(V.C_A)$ [kg/m^{2}s], assim:

$$\boxed{\dot{M}_A = \underbrace{\dot{j}_A}_{\text{Difusão}} + \underbrace{VC_A}_{\text{Convecção}}}$$

V = velocidade do fluido.

A lei de Fick da difusão molecular:

$$\dot{j}_A = -D\left(\frac{\partial C_A}{\partial s}\right)$$

D = difusividade
s = direção característica

Assim:

$$\dot{M}_A = -D\left(\frac{\partial C_A}{\partial s}\right) + VC_A$$

Usualmente, a equação da conservação é apresentada em termos da concentração volumétrica do composto:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(V_x C_A - D_x \frac{\partial C_A}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(V_y C_A - D_y \frac{\partial C_A}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(V_z C_A - D_z \frac{\partial C_A}{\partial z}\right) + \frac{\partial C_A}{\partial t} - \dot{g}_A = 0$$

Considerando-se que as difusividades apresentem o mesmo valor nas três direções coordenadas (meio isotrópico), temos:

$$C_A\left(\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z}\right) + V_x \frac{\partial C_A}{\partial x} + V_y \frac{\partial C_A}{\partial y} + V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} + \frac{\partial C_A}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}\right) + \dot{g}_A$$

Se a densidade da mistura é constante (ρ=cte), fluido incompressível:

$$\left(\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z}\right) = 0$$

Assim:

$$\boxed{\frac{\partial C_A}{\partial t} + V_x \frac{\partial C_A}{\partial x} + V_y \frac{\partial C_A}{\partial y} + V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}\right) + \dot{g}_A}$$

Significado físico:

1º termo: variação temporal da concentração no elemento de volume;
2º , 3º, 4º termos: variação da concentração ao longo das coordenadas espaciais provocada pelo movimento do fluido;
5º termo: difusão de massa nas direções coordenadas;
6º termo: taxa de produção de massa no elemento de volume.

Cada termo desta equação tem a unidade de $kg/s.m^3$, que representa massa por unidade de tempo por unidade de volume. Se o fluido está em repouso:

$$\boxed{\frac{\partial C_A}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}\right) + \dot{g}_A}$$

Se não há geração/consumo de massa, $\dot{g}_A = 0$, e para regime permanente:

Equação de Laplace

$$\boxed{\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}\right) = 0}$$

Equação da Continuidade e Balanço Diferencial para um Componente A (D=cte)

Coordenadas cilíndricas (r, θ, z):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial(\rho r V_r)}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial(\rho V_\theta)}{\partial \theta} + \frac{\partial(\rho V_z)}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + V_r\frac{\partial C_A}{\partial r} + \frac{V_\theta}{r}\frac{\partial C_A}{\partial \theta} + V_z\frac{\partial C_A}{\partial z} = D\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C_A}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}\right) + \dot{g}_A$$

Coordenadas esféricas (r, θ, Φ):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial(\rho r^2 V_r)}{\partial r} + \frac{1}{r\,\mathrm{sen}\theta}\frac{\partial(\rho V_\theta \mathrm{sen}\theta)}{\partial \theta} + \frac{1}{r\,\mathrm{sen}\theta}\frac{\partial(\rho V_\phi)}{\partial \phi} = 0$$

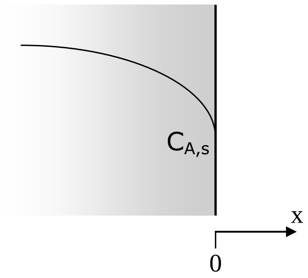
$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left(V_r\frac{\partial C_A}{\partial r} + \frac{V_\theta}{r}\frac{\partial C_A}{\partial \theta} + \frac{V_\phi}{r\,\mathrm{sen}\theta}\frac{\partial C_A}{\partial \phi}\right) =$$

$$= D\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial C_A}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\mathrm{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\mathrm{sen}\theta\frac{\partial C_A}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2\mathrm{sen}^2\theta}\frac{\partial^2 C_A}{\partial \phi^2}\right) + \dot{g}_A$$

Tipos de Condições de Contorno

Analogamente, como vimos para o caso da energia, as condições de contorno são necessárias para a solução das equações governantes. Para um caso unidirecional.

a) - Concentração da superfície especificada:



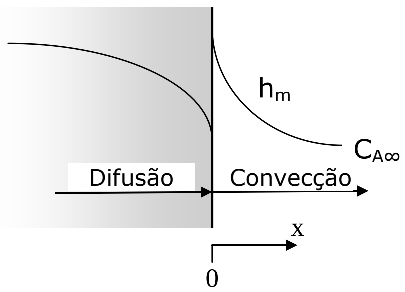
$$C_A\big|_{x=0} = C_{A,s}$$

b) - Fluxo de massa superficial especificado:

$$\underbrace{-D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial x}\bigg|_{x=0}}_{\text{"dentro do sistema"}} = \underbrace{\dot{M}_{A,s}}_{\text{"fora do sistema"}}$$

Superfície impermeável: $-D_{AB}\dfrac{\partial C_A}{\partial x}\bigg|_{x=0} = 0$

Convecção na superfície:

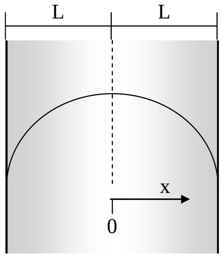


$$\underbrace{-D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial x}\bigg|_{x=0}}_{\text{Difusão}} = \underbrace{h_m\left(C_{A,x=0}^{fluido} - C_{A,x=\infty}^{fluido}\right)}_{\text{Convecção}}$$

h_m = coeficiente de transferência de massa convectivo.

Note que a concentração superficial não é a mesma em ambos os lados da interface do sistema! A relação entre as concentrações superficiais depende das condições de equilíbrio entre fases.

c) Condição de simetria:

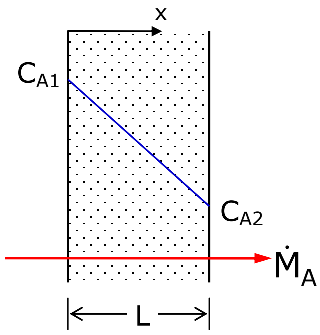


$$\left.\frac{\partial C_A}{\partial x}\right|_{x=0} = 0$$

2.3 - Difusão Unidirecional em Regime Permanente

Considere um sistema com difusão em apenas uma dimensão em estado estacionário.

Placa Plana: as duas superfícies da placa estão com concentrações fixas e uniformes, C_{A1} e C_{A2}. Se não há geração interna de massa, temos:



$$\underbrace{\cancelto{0}{\frac{\partial C_A}{\partial t}}}_{\text{estado estacionário}} + \underbrace{V_x \cancelto{0}{\frac{\partial C_A}{\partial x}}}_{\text{sem convecção}} = D_{AB}\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2}\right) + \underbrace{\cancelto{0}{\dot{g}_A}}_{\text{sem geração}}$$

Portanto:

$$\left(\frac{d^2 C_A}{dx^2}\right) = 0 \rightarrow \left(\frac{dC_A}{dx}\right) = c_1 (\text{uma constante})$$

Integrando:

$$C_A = c_1 x + c_2$$

Para determinação das constantes, c_1 e c_2, precisamos de *condições de contorno*, que neste caso são:

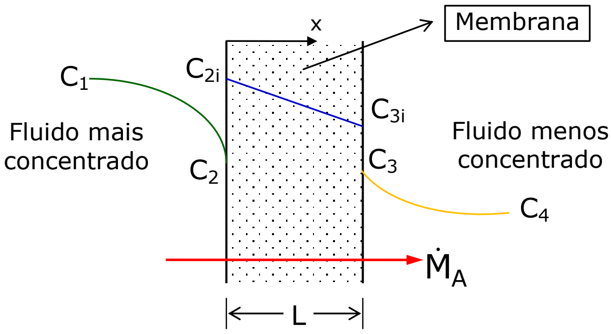
1. $x = 0 \rightarrow C_A = C_{A1}$
2. $x = L \rightarrow C_A = C_{A2}$

$$C_A = \left(\frac{C_{A2} - C_{A1}}{L}\right)x + C_{A1}$$

Podemos determinar o fluxo difusivo:

$$\dot{M}_{A,x} = -D_{AB}\left(\frac{dC_A}{dx}\right) \quad \text{—>} \quad \dot{M}_{A,x} = -D_{AB}\left(\frac{C_{A2} - C_{A1}}{L}\right)$$

Placa Plana Composta: vamos considerar diferentes meios materiais. Note que as concentrações C_{2i} no sólido e C_2 no fluido não são as mesmas.



As concentrações nas interfaces se relacionam pelas constantes de equilíbrio, K_e:

$$\frac{C_{2i}}{C_2} = K_{e1}\,; \quad \frac{C_{3i}}{C_3} = K_{e2} \quad \text{—>} \quad K_{e1} \text{ e } K_{e2} = \text{constantes de equilíbrio}$$

Assumindo $K_{e1} = K_{e2}$, podemos escrever:

$$\dot{M}_{Ax} = h_{m1}(C_1 - C_2)$$
$$\dot{M}_{Ax} = D_{AB}\frac{(C_{2i} - C_{3i})}{L} = D_{AB}\frac{(C_2K_{e1} - C_3K_{e2})}{L} = \frac{D_{AB}K_e}{L}(C_2 - C_3)$$
$$\dot{M}_{Ax} = h_{m2}(C_3 - C_4)$$

Rearranjando:

$$\left.\begin{aligned}(C_1 - C_2) &= \dot{M}_{Ax}\frac{1}{h_{m1}} \\ (C_2 - C_3) &= \dot{M}_{Ax}\frac{L}{D_{AB}K_e} \\ (C_3 - C_4) &= \dot{M}_{Ax}\frac{1}{h_{m2}}\end{aligned}\right\}$$

$$(C_1 - C_4) = \dot{M}_{Ax}\left(\frac{1}{h_{m1}} + \frac{L}{D_{AB}K_e} + \frac{1}{h_{m2}}\right)$$

$$\dot{M}_{Ax} = \frac{(C_1 - C_4)}{\left(\frac{1}{h_{m1}} + \frac{L}{D_{AB}K_e} + \frac{1}{h_{m2}}\right)}$$

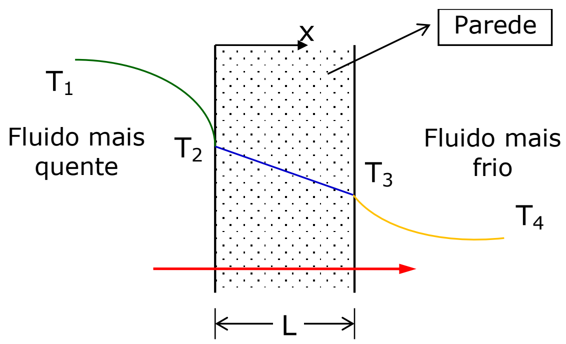
As resistências condutivas e convectivas podem ser agrupadas em um único coeficiente global de transferência de massa:

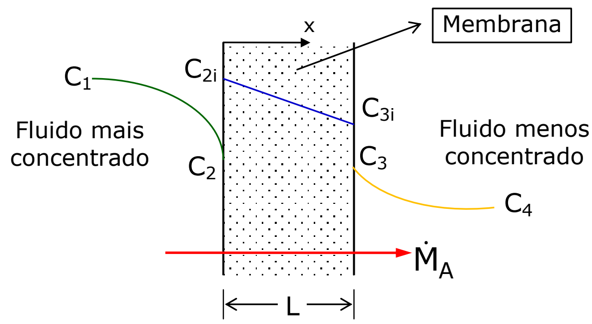
$$\frac{1}{U_m} = \frac{1}{h_{m1}} + \frac{L}{D_{AB}K_e} + \frac{1}{h_{m2}}$$

Assim:

$$\dot{M}_{Ax} = U_m(C_1 - C_4)$$

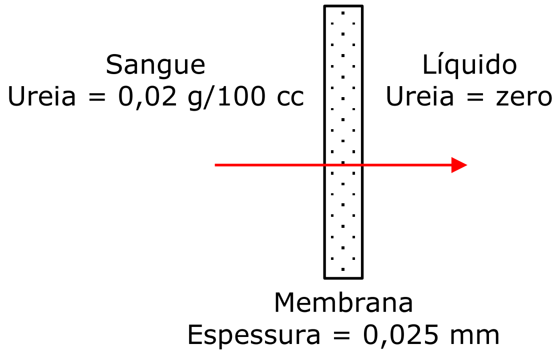
Analogia entre fluxo de massa e fluxo de calor:





Fluxo	Massa	Calor
Convecção no fluido na face esquerda	$\dot{M}_A = \dfrac{C_1 - C_2}{\dfrac{1}{h_{m1}}}$	$\dot{q} = \dfrac{T_1 - T_2}{\dfrac{1}{h_1}}$
Difusão na membrana/parede	$\dot{M}_A = \dfrac{C_{2i} - C_{3i}}{\dfrac{\Delta L}{D_{AB}}} = \dfrac{C_2 - C_3}{\dfrac{\Delta L}{D_{AB}K_e}}$	$\dot{q} = \dfrac{T_2 - T_3}{\dfrac{\Delta L}{K}}$
Convecção no fluido na face direita	$\dot{M}_A = \dfrac{C_3 - C_4}{\dfrac{1}{h_{m2}}}$	$\dot{q} = \dfrac{T_3 - T_4}{\dfrac{1}{h_2}}$

Ex.: Quando os rins de uma pessoa não funcionam, o processo de hemodiálise pode ser usado para remoção de substâncias nocivas do sangue. O sangue escoa no interior de capilares com paredes permeáveis e o líquido de diálise escoa no exterior dos capilares. Estime o fluxo e a taxa de remoção de ureia do sangue. O coeficiente de transferência de massa do lado do sague é h_{m1} = 1,25x10^{-5} m/s e do lado do líquido é h_{m2} = 3,33x10^{-5} m/s. A difusividade da ureia na parede do capilar é D_{AB} = $1x10^{-10}$ m^2/s. A espessura da parede é de 0,025 mm e a área total de troca de massa é de 2 m^2. O coeficiente de distribuição é K=2= concentração de ureia na da membrana/concentração de ureia na solução.



A concentração de ureia no sangue é de 0,02 g/100 cc e no líquido de diálise assume-se zero.

Solução: vamos assumir difusão unidirecional em regime permanente em placa plana composta.

Vamos utilizar a expressão: $\dot{M}_{Ax} = \dfrac{(C_1 - C_4)}{\left(\dfrac{1}{h_{m1}} + \dfrac{L}{D_{AB}K} + \dfrac{1}{h_{m2}}\right)}$

C_1 = 0,02 g/100 cc = 0,0002 g/cm^3 = 0,2 kg/m^3
C_4 = 0
h_{m1} = $1,25x10^{-5}$ m/s
h_{m2} = $3,33x10^{-5}$ m/s
D_{AB} = $1x10^{-10}$ m^2/s
K = 2 (adimensional)
L = $2,5x10^{-5}$ m

O fluxo de massa será:

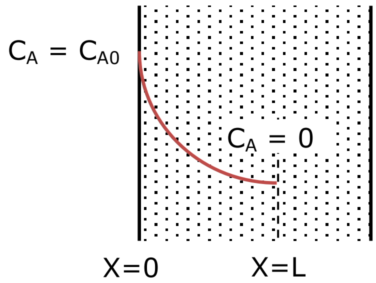
$$\dot{M}_{Ax} = \frac{(0{,}2-0)}{\left(\dfrac{1}{1{,}25x10^{-5}} + \dfrac{2{,}5x10^{-5}}{1x10^{-10}x2} + \dfrac{1}{3{,}33x10^{-5}}\right)}$$

$$\dot{M}_{Ax} = \frac{(0{,}2-0)}{(80.000+125.000+30.030)} = 8{,}51x10^{-7}\ \frac{kg}{m^2 s}$$

A taxa de transferência de massa considerando uma área de troca de 2 m²:

$$\dot{m}_{Ax} = 2x8{,}51x10^{-7} = 1{,}7x10^{-6}\frac{kg}{s} = 6{,}13x10^{-3}\frac{kg}{h}$$

Placa Plana com Reação Química: reações químicas podem ocorrer simultaneamente com a difusão, como por exemplo, o consumo de determinada espécie A. Para a difusão com reação de consumo de primeira ordem, temos:



$$\underbrace{\cancel{\frac{\partial C_A}{\partial t}}^{\,0}}_{\text{estado estacionário}} + \underbrace{\cancel{V_x \frac{\partial C_A}{\partial x}}^{\,0}}_{\text{sem convecção}} = D_{AB}\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2}\right) - k'' C_A$$

Portanto:

$$\frac{d^2 C_A}{dx^2} - \frac{k''}{D_{AB}} C_A = 0$$

Neste caso, as condições de contorno são:

1. $x = 0 \rightarrow C_A = C_{A0}$
2. $x = L \rightarrow C_A = 0$ (L é a distância na qual a concentração se anula)

A solução é dada por:

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{-e^{-mL}}{e^{mL} - e^{-mL}}\left(e^{mx} - e^{-mx}\right) + e^{-mx}$$

Sendo: $m = \sqrt{\frac{k''}{D_{AB}}}$

Se L for "muito grande", a solução se simplifica para:

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = e^{-mx}$$

O fluxo de massa na superfície pode ser calculado:

$$\dot{M}_{Ax} = -D_{AB} \left. \frac{dC_A}{dx} \right|_{x=0} \quad \rightarrow \quad \dot{M}_{Ax} = \frac{C_{A0} D_{AB}}{L} mL \frac{e^{mL} + e^{-mL}}{e^{mL} - e^{-mL}}$$

2.4 - Difusão Unidirecional em Regime Transiente.

Neste item consideraremos situações de transferência de massa por difusão nas quais a concentração é função da posição e do tempo, sem geração interna.

Nosso sistema será um corpo no qual a difusão prevalece sobre os demais mecanismos de transferência. A equação geral da difusão, com D_{AB}=cte, torna-se:

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

O laplaciano ($\Delta = \nabla^2 = \nabla . \nabla$) é a soma de todas as derivadas parciais simples de segunda ordem. O caso particular em $\mathbf{R}^3$, onde as componentes são denotadas por **x**, **y** e **z**, temos:

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

Para um sistema unidirecional, a equação geral se reduz (coordenadas retangulares):

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{AB} \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} \right)$$

Muitas soluções da equação acima foram obtidas para diferentes condições iniciais e de contorno.

Sistemas com resistência interna desprezível: em alguns casos podemos admitir que a resistência interna do corpo à difusão de massa é pequena se comparada à resistência externa (meio circundante/fluido).

Assim, a variação da concentração em qualquer ponto no interior do sistema pode ser negligenciada. A transferência de massa convectiva entre o fluido e o corpo pode ser escrita:

$$\underbrace{-m\Delta x_A}_{\boxed{\text{Variação interna da massa de A durante } \Delta t}} = \underbrace{h_m A(C_A - C_{A\infty})\Delta t}_{\boxed{\text{Massa de A trocada com o meio durante } \Delta t}}$$

Em que:

m = massa do corpo;

x_A = fração mássica de A;

h_m = coeficiente de transferência de massa;

A = área superficial;

$C_{A\infty}$ = concentração de A no meio;

C_A = concentração de A próxima à superfície (fora do corpo).

Podemos escrever:

$$\frac{\Delta x_A}{\Delta t} = -\frac{h_m A}{m}(C_A - C_{A\infty})$$

Tomando o limite para $\Delta t \rightarrow 0$:

$$\frac{dx_A}{dt} = -\frac{h_m A}{m}(C_A - C_{A\infty})$$

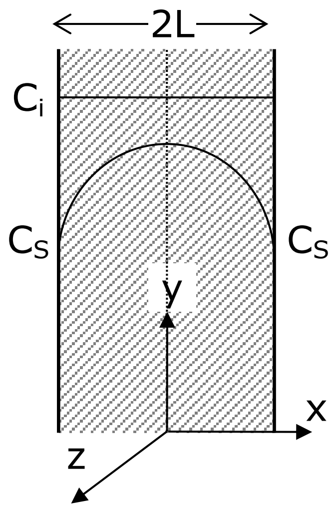
Com condição inicial: $x_A(t=0) = x_{Ai}$. Integrando:

$$\int_{x_{Ai}}^{x_A} dx_A = \int_0^t \underbrace{-\frac{h_m A}{m}(C_A - C_{A\infty})}_{\text{Constante}} dt$$

$$x_A - x_{Ai} = -\frac{h_m A}{m}(C_A - C_{A\infty})t$$

A equação acima indica uma relação linear entre x_A e o tempo. Para a secagem de sólidos muito úmidos, o início da secagem pode ser representada por esta expressão, contudo com o progresso da secagem, a relação acima não é mais válida.

Sistemas com resistência externa desprezível: considere uma placa plana de espessura 2L inicialmente com uma concentração interna C_i e, subitamente, a concentração da superfície torna-se C_S:



Hipóteses:

1 - regime transiente;
2 - difusão unidirecional em x;
3 - D_{AB}, ρ = cte's;
4 - dimensões y e z infinitas;
5 - não há geração interna de massa.

A equação governante para este caso específico torna-se:

$$\frac{dC_A}{dt} = D_{AB}\left(\frac{d^2T}{dx^2}\right) = D_{AB}\frac{d}{dx}\left(\frac{dC_A}{dx}\right)$$

Com as seguintes condições de contorno e inicial:

CI:	$t = 0 \rightarrow C_A = C_{Ai}$	(p/ todo x)	
CC1:	$x = 0 \rightarrow \left.\frac{dC_A}{dx}\right\|_{x=0} = 0$	[p/ t>0]	(condição de simetria)
CC2:	$x = L \rightarrow C_A = C_{AS}$	[p/ t>0]	(concentração especificada na superfície)

Neste caso, a solução para a equação governante pode ser apresentada na forma de uma série:

$$\frac{C-C_S}{C_i-C_S}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{4(-1)^n}{(2n+1)\pi}\cos\frac{(2n+1)\pi x}{2L}\,e^{-D_{AB}\left(\frac{(2n+1)}{2L}\right)^2 t}$$

Podemos escrever de maneira análoga o número de Fourier da transferência de calor:

$$F_O=\frac{D_{AB}t}{L^2}$$

Para h_m muito grande ($h_m \approx \infty$), a grandeza $D_{AB}/h_mL \approx 0$, assim os diagramas de Θ versus ($\alpha t/L^2$) podem ser usados, assim como fizemos nos estudos de transferência de calor.

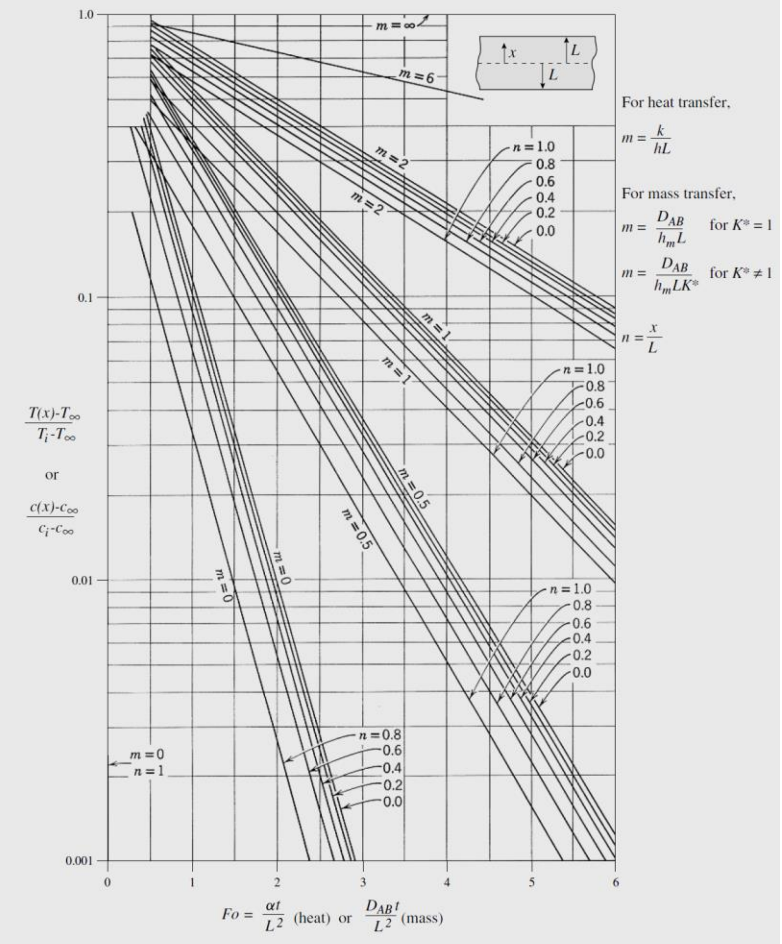


Figure B.1: Unsteady state diffusion in a large slab. Before using in mass transfer for $m \neq 0$, refer to discussion in Section 13.2.5 on page 261. From Principles of unit operations by A.S. Foust et al., © 1960 by John Wiley & Sons, Inc. Reprinted by permission of John Wiley & Sons, Inc.

Difusão transiente em um meio semi-infinito: analogamente ao que fizemos na transferência de calor, uma região semi-infinita é uma idealização para casos em que a transferência de massa ocorre em curtos períodos de tempo e/ou em materiais de grande espessura.

Neste caso as condições de contorno e inicial são:

CI:	$t = 0 \rightarrow C_A = C_{Ai}$	(p/ todo x)
CC1:	$x = 0 \rightarrow C_A = C_{AS}$	[p/ t>0]
CC2:	$x = \infty \rightarrow C_A = C_{Ai}$	[p/ t>0]

A solução para a equação governante:

$$\frac{C_A - C_{Ai}}{C_{AS} - C_{Ai}} = 1 - \mathrm{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D_{AB}t}}\right)$$

O fluxo de massa na superfície pode ser dado por:

$$\dot{M}_{AS} = \sqrt{\frac{D_{AB}}{\pi t}}\left(C_{AS} - C_{Ai}\right)$$

Podemos usar a idealização de meio semi-infinito quando a espessura L do material for maior que:

$$x \geq 4\sqrt{D_{AB}t}$$

Ex. O solo úmido (20% base úmida) começa a secar com a falta de chuvas. Após 30 dias de estiagem, estime a profundidade (em cm) na qual a umidade do solo cai para 20% do valor inicial. Assuma que a umidade superficial do solo neste período caiu para zero. A difusividade da água no solo é de 1×10^{-7} m^2/s. Converta as umidades para base seca:

$$\text{base seca} = \frac{\text{base úmida}}{1 - \text{base úmida}}$$

Vamos assumir meio semi-infinito e adotar a solução:

$$\frac{C_A - C_{Ai}}{C_{AS} - C_{Ai}} = 1 - \mathrm{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D_{AB}t}}\right)$$

C_{Ai} = 0,2/(1-0,2) = 0,25 massa de água/massa de solo seco
C_{AS} = 0,0 massa de água/massa de solo seco
C_A = (20%) x 0,25 = 0,05 massa de água/massa de solo seco

$D_{AB} = 1\text{x}10^{-7}\ m^2/s$
t = 30 dias = 2.592.000 s

$$\frac{0{,}05-0{,}25}{0{,}0-0{,}25} = 1 - \mathrm{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{1\text{x}10^{-7}\text{x}2.592.000}}\right)$$

$$0{,}8 = 1 - \mathrm{erf}\left(\frac{x}{1{,}02}\right) \quad \rightarrow \quad \mathrm{erf}\left(\frac{x}{1{,}02}\right) = 0{,}2$$

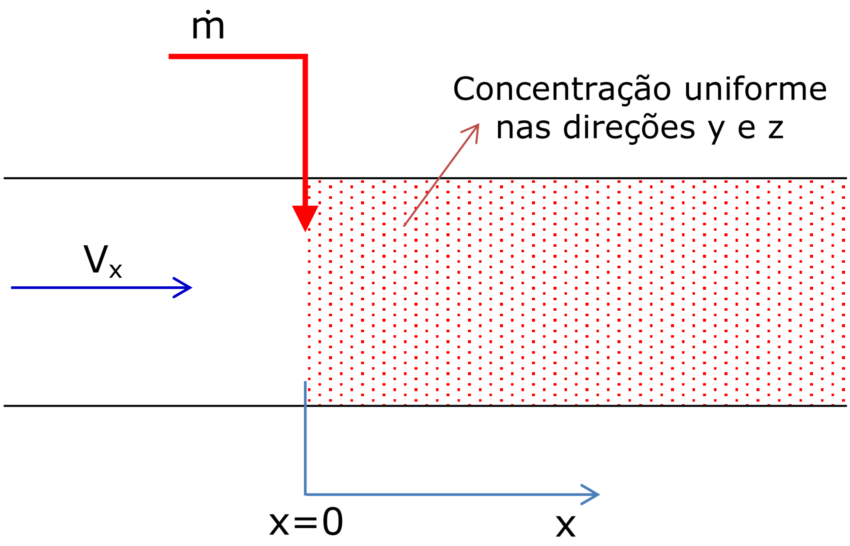
Da tabela função erro:

x/1,02 = 0,179 → x = 0,183 m = 18,3 cm

ϕ	erf(ϕ)
0.000	0.0000
0.025	0.0282
0.050	0.0564
0.075	0.0845
0.100	0.1125
0.125	0.1403
0.150	0.1680
0.175	0.1955
0.200	0.2227

2.5 – Convecção/Dispersão em um Fluido Infinito

Convecção/dispersão unidirecional pode ser uma idealização útil para algumas situações práticas de transporte de massa. Imagine uma corrente de poluente sendo inserida em um rio. Vamos assumir que a concentração do poluente no rio é uniforme a partir do ponto de descarga e que o poluente pode se degradar.



Assim, para a dispersão unidirecional em um meio infinito, com reação química, a equação governante:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + V_x \frac{\partial C_A}{\partial x} = D\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2}\right) - k'' C_A$$

Se o regime é permanente:

$$V_x \frac{dC_A}{dx} = D\left(\frac{d^2 C_A}{dx^2}\right) - k'' C_A$$

Se uma vazão mássica é introduzida em x = 0 (ponto de descarga), as *condições de contorno*, neste caso são:

1. $x = \infty \rightarrow C_A = 0$;
2. $x = -\infty \rightarrow C_A = 0$

A solução geral:

$$C_A = \begin{cases} \dfrac{\dot{m}}{AV_x\psi} e^{\frac{V_x}{2D_{AB}}(1+\psi)x} & p/\ x < 0 \\ \dfrac{\dot{m}}{AV_x\psi} e^{\frac{V_x}{2D_{AB}}(1-\psi)x} & p/\ x > 0 \end{cases}$$

Sendo:

$$\psi = \sqrt{1 + \frac{4D_{AB}K''}{V_x^2}} \geq 1$$

A = área da seção transversal do canal.

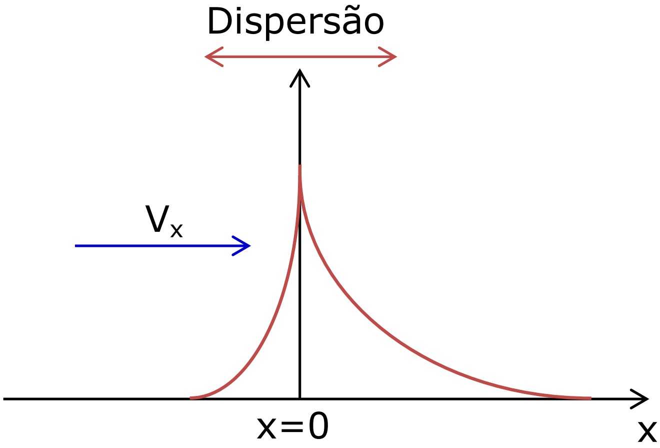
Quando a convecção é o principal mecanismo, o coeficiente de difusão D_{AB} é geralmente pequeno, assim a solução torna-se:

$$C_A = \begin{cases} 0 & p/\ x < 0 \\ \dfrac{\dot{m}}{AV_x} e^{\frac{-k''}{V_x}x} & p/\ x > 0 \end{cases}$$

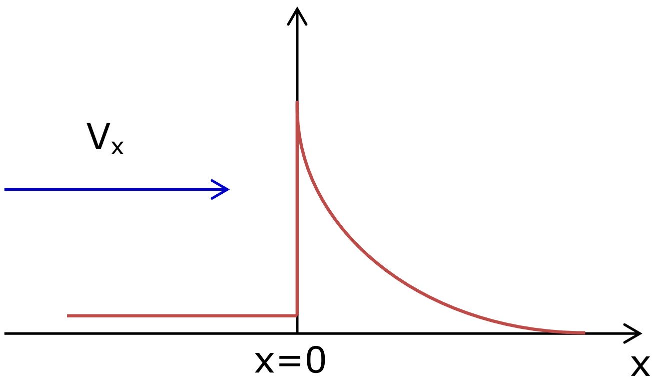
Quando a difusão é o principal mecanismo, a convecção é geralmente pequena ($V_x \approx 0$), assim a solução torna-se:

$$C_A = \begin{cases} \dfrac{\dot{m}}{A\sqrt{4k''D_{AB}}} e^{\left(\sqrt{k''/D_{AB}}\right)x} & p/\ x < 0 \\ \dfrac{\dot{m}}{A\sqrt{4k''D_{AB}}} e^{-\left(\sqrt{k''/D_{AB}}\right)x} & p/\ x > 0 \end{cases}$$

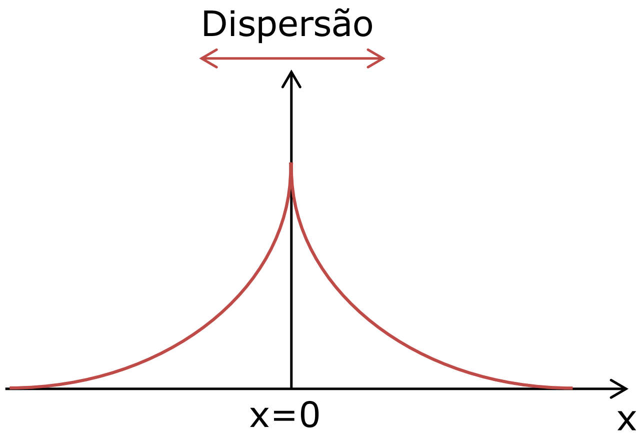
Distribuição da concentração devido a uma fonte estacionária quando a convecção e a difusão estão presentes.



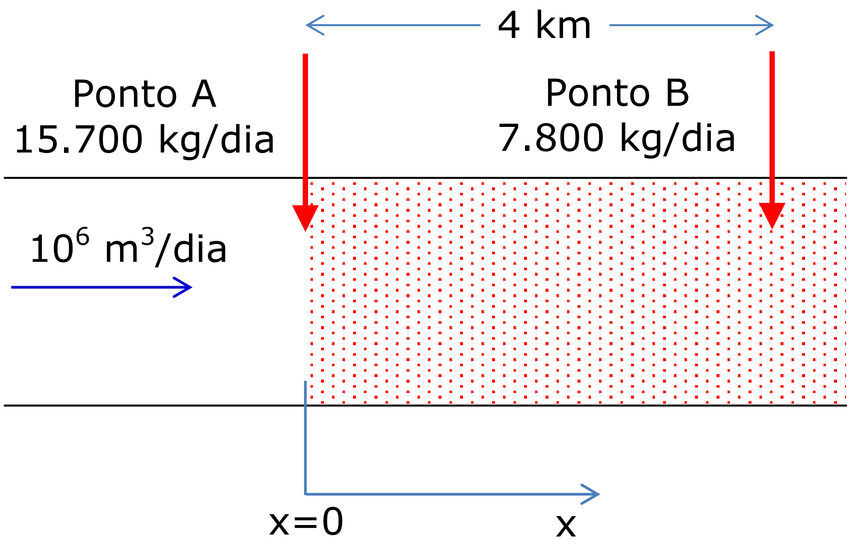
Distribuição da concentração quando apenas a convecção esta presente.



Distribuição da concentração quando apenas a difusão esta presente.



Ex. – Um rio recebe duas correntes de poluentes. Estime o perfil de concentração de DBO (demanda bioquímica de oxigênio) na água do rio. A DBO da água é a quantidade de oxigênio necessária para oxidar a matéria orgânica por decomposição microbiana aeróbia para uma forma inorgânica estável. Assumir que a dispersão é desprezível ($D_{AB} \approx 0$).



	Ponto A	Ponto B
Distancia do ponto A (km)	0	4
k” (constante de reaeração) (dia^{-1})	0,4	0,45
Vazão do rio (10^6 m^3/dia)	2,0	2,3
Velocidade do rio (km/dia)	3,5	3,8
Descarga de DBO (kg/dia)	15.700	7.800
DBO inicial na água do rio (kg/m^3)	3,0x10^{-6}	3,0x10^{-6}

Neste caso, a solução é:

$$C_A = \begin{cases} 0 & p/\ x < 0 \\ \dfrac{\dot{m}}{AV_x} e^{\frac{-k''}{V_x}x} = \dfrac{\dot{m}}{\dot{V}} e^{\frac{-k''}{V_x}x} & p/\ x > 0 \end{cases}$$

Vamos considerar a primeira contribuição:

$C_A = \dfrac{15.700}{2{,}0x10^6} e^{\frac{-0{,}4}{3{,}5}x} = 0{,}00785e^{-0{,}1143x}$	$x > 0$

Segunda contribuição:

$C_A = \dfrac{7.800}{2{,}3x10^6} e^{\frac{-0{,}45}{3{,}8}x} = 0{,}00339e^{-0{,}1184x}$	$x > 4$

A DBO combinada das duas fontes pode ser obtida somando-se os dois perfis de concentração para $x > 0$, juntamente com a DBO inicial do rio de $3x10^{-6}$ kg/m^3. Veja a figura a seguir: