

Derivadas no tempo- Observações

- MEIO CONTÍNUO – CAMPO

PROPRIEDADE : $\varphi (\vec{r}(t), t)$

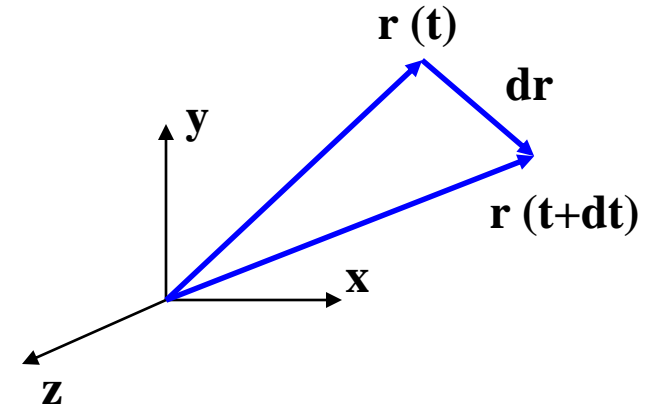
$$d\varphi = \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)_{\vec{r}} dt + \left(\frac{d\varphi}{d\vec{r}} \right)_t d\vec{r}$$

$$d\varphi = \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)_{\vec{r}} dt + \text{grad } \varphi \bullet d\vec{r}$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) + \text{grad } \varphi \bullet \vec{w}$$

$$\vec{w} = \frac{d\vec{r}}{dt}$$

Velocidade de observação



Derivadas no tempo- Observações

- EULER
 - Equacionamento usual em meios contínuos
 - Definição do regime: permanente /transiente
- LAGRANGE:
 - **Modelo Físico** – Equações Constitutivas
 - Equacionamento – Alguns sistemas multifásicos

Derivadas no tempo- Observações

| | | |
|------------------------|--------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Observação | Observação | $\left(\frac{d \varphi}{dt} \right)$ |
| $\vec{w} = \mathbf{0}$ | EULER VARIACÃO LOCAL | $\left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)_{\vec{r}}$ |
| $\vec{w} = \vec{v}$ | LAGRANGE MATERIAL OU SUBSTANTIVA | $\left(\frac{D \varphi}{Dt} \right) = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad} \varphi$ |
| \vec{w} | TOTAL | $\left(\frac{d \varphi}{dt} \right) = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \vec{w} \cdot \text{grad} \varphi$ |
| $\vec{w} = \vec{v}_k$ | SUBSTANTIVA Em relação ao componente k | $\left(\frac{d^k \varphi}{dt} \right) = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \vec{v}_k \cdot \text{grad} \varphi$ |

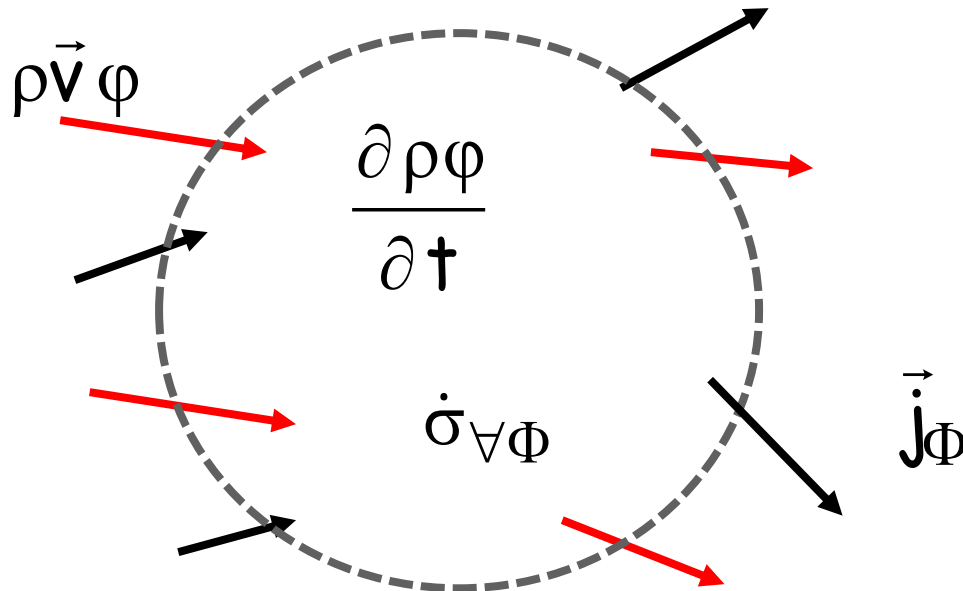
- * Lagrange (Substantiva - molar): $\left(\frac{D^* \varphi}{Dt} \right) = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \vec{v}^* \cdot \text{grad} \varphi$

OPERADOR

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad}$$

Equação de Conservação

$$\rho \frac{D\varphi}{Dt} = \frac{\partial \rho\varphi}{\partial t} + \text{div} \rho \vec{v} \varphi = -\text{div} \vec{j}_\Phi + \dot{\sigma}_{\nabla\Phi}$$



$$\varphi = \frac{\partial \Phi}{\partial m} \Rightarrow \Phi = \int \varphi dm = \Phi = \int \varphi \rho dV$$

Equação de Conservação

$$\varphi = \frac{\partial \Phi}{\partial m} \Rightarrow \Phi = \int \varphi dm = \Phi = \int \varphi \rho dV$$

$$\rho \frac{D\varphi}{Dt} = \frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} + \text{div } \rho \vec{v} \varphi = -\text{div } \vec{j}_\Phi + \dot{\sigma}_{\nabla \Phi}$$

| propriedade | Φ | unidades | φ | unidades |
|-----------------------------|---------------------------|----------------------|-------------------------|-------------------|
| carga elétrica | Σ | C | ε | C/kg |
| entropia | S | J/K | S | J/(K.kg) |
| massa de um constituinte i | m_i | kg de i | ω_i | kgi/kg |
| massa total | $m = \sum m_i$ | kg | 1 | - |
| quantidade de movimento | $m \vec{v}$ | kg.m/s | \vec{v} | m/s |
| momentum angular | $m \vec{r} \cdot \vec{v}$ | kg.m ² /s | $\vec{r} \cdot \vec{v}$ | m ² /s |
| energia cinética | E_c | J | e_c | J/kg |
| energia potencial | E_p | J | e_p | J/kg |
| energia interna | U | J | u | J/kg |
| Entalpia ~ C _p T | ~ mC _p T | J | C _p T | J/kg |

Equação da Continuidade

Princípio da conservação da massa

$$\Phi = m \Rightarrow \varphi = \frac{\partial \Phi}{\partial m} = \frac{\partial \Phi}{\partial \rho V} = 1$$

$$\rho \frac{D1}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{v} = -\operatorname{div} \vec{j}_m + \dot{\sigma}_{V,m} = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{v} = 0$$

Equação da Continuidade

Princípio da conservação da massa

EULER:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{v} = 0$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \cdot \operatorname{grad} \rho = -\operatorname{div} \rho \vec{v} + \vec{v} \cdot \operatorname{grad} \rho$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \operatorname{div} \vec{v} - \vec{v} \cdot \operatorname{grad} \rho + \vec{v} \cdot \operatorname{grad} \rho = -\rho \operatorname{div} \vec{v}$$

LAGRANGE:

Derivada material

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \operatorname{div} \vec{v}$$

Equação da Continuidade

Compressível e Incompressível

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \operatorname{div} \vec{v}$$

Observando-se uma massa *m constante* – *Lagrange* - em um volume *V*:

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{D(m/V)}{Dt} = -\frac{m}{V^2} \frac{DV}{Dt} = -\rho \frac{1}{V} \frac{DV}{Dt} \Rightarrow -\frac{1}{V} \frac{DV}{Dt} = \operatorname{div} \vec{v}$$

Definição de Escoamento incompressível:

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0 \Rightarrow \operatorname{div} \vec{v} = 0$$

ρ constante ?

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{v} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \operatorname{div} \vec{v} + \vec{v} \cdot \operatorname{grad} \rho = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{v} \cdot \operatorname{grad} \rho = 0$$

BALANÇO LOCAL DA PROPRIEDADE ϕ

Derivada material de ϕ $\left[\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad}\phi \right] \times \rho$ (1)

Continuidade $0 = \left[\frac{\partial\rho}{\partial t} + \text{div}\rho\vec{v} \right] \times \phi$ (2)

(2) +(1):

$$\rho \frac{D\phi}{Dt} = \underbrace{\rho \frac{\partial\phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial\rho}{\partial t}}_{\frac{\partial\rho\phi}{\partial t}} + \underbrace{\rho \vec{v} \cdot \text{grad}\phi + \phi \text{div}\rho\vec{v}}_{\text{div}\rho\phi\vec{v}} = \frac{\partial\rho\phi}{\partial t} + \text{div}\rho\phi\vec{v}$$

Balanço microscópico de ϕ :

$$\rho \frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\rho\phi}{\partial t} + \text{div}(\rho\phi\vec{v}) = -\text{div}\vec{j}_\phi + \dot{\sigma}_{v\phi}$$

Balanço microscópico de φ :

LAGRANGE **EULER** **CONVECÇÃO** **DIFUSÃO** **PRODUÇÃO**

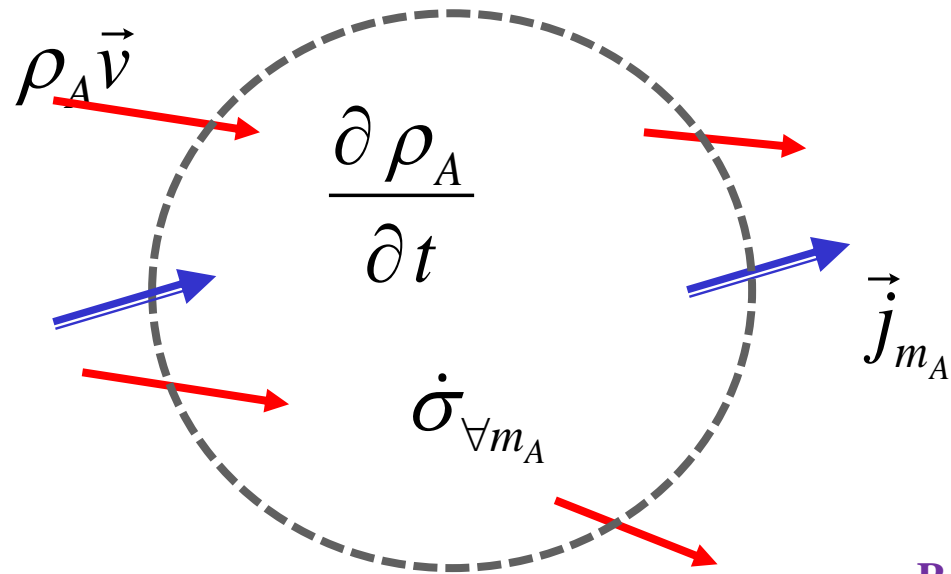
$$\rho \frac{D\varphi}{Dt} = \frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{v} \varphi = -\operatorname{div} \vec{j}_{\Phi} + \dot{\sigma}_{\nabla \Phi}$$

VARIAÇÃO TEMPORAL **ESCOAMENTO** **"LEIS" E MODELOS**

$$\rho \frac{D\varphi}{Dt} = \rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \underbrace{\varphi \frac{\partial \rho}{\partial t} + \varphi \operatorname{div} \rho \vec{v}}_{=0, \text{continuidade}} + \rho \vec{v} \cdot \operatorname{grad} \varphi = -\operatorname{div} \vec{j}_{\Phi} + \dot{\sigma}_{\nabla \Phi}$$

$$\rho \frac{D\varphi}{Dt} = \rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \operatorname{grad} \varphi = -\operatorname{div} \vec{j}_{\Phi} + \dot{\sigma}_{\nabla \Phi}$$

Equação da Continuidade para a espécie A



$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = - \text{div} \vec{n}_A + \dot{r}_{\nabla A}$$

Reação química kg A/(m³ s)

Fluxo mássico total de A (kg A/(m² s)), convecção + difusão:

$$\vec{n}_A = \rho_A \vec{v} + \vec{j}_A$$

$$\vec{n}_A = \omega_A \vec{n} + \vec{j}_A$$

Fluxo mássico total

Equação da Continuidade para a espécie A

$$\Phi = m_A \Rightarrow \varphi = \frac{\partial \Phi}{\partial m} = \omega_A \quad \text{Fração mássica de A}$$

$$\rho_A = \rho \omega_A$$

$$\rho \frac{D\omega_A}{Dt} = \frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \operatorname{div} \rho_A \vec{v} = - \operatorname{div} \vec{j}_A + \dot{\sigma}_{\nabla A}$$

difusão reação química

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = - \operatorname{div} \underbrace{(\rho_A \vec{v} + \vec{j}_A)}_{\vec{n}_A} + \dot{r}_{\nabla A}$$

Fluxo mássico total de A (kg A/(m² s)), convecção + difusão:

$$\vec{n}_A = \rho_A \vec{v} + \vec{j}_A$$

$$\vec{n} = \rho \vec{v}$$

$$\vec{n}_A = \frac{\rho_A}{\rho} \vec{n} + \vec{j}_A = \omega_A \vec{n} + \vec{j}_A$$

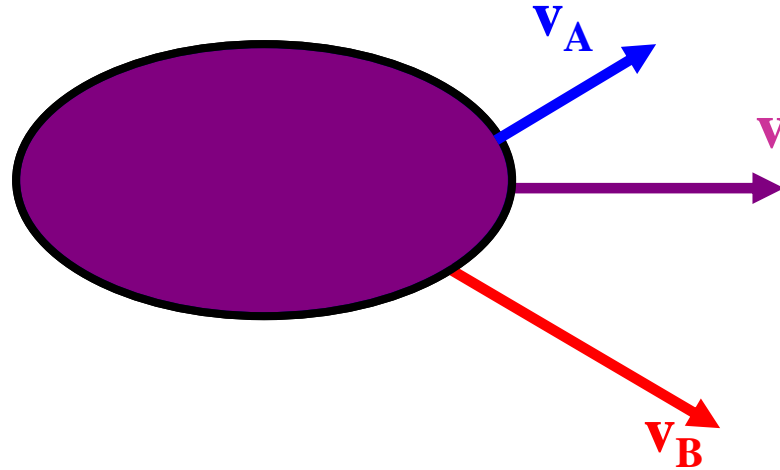
FLUXOS MÁSSICOS: DIFUSIVOS E CONVECTIVOS

Sistema Binário

ρ_A - kg A/m³

$$\vec{v}_A = \frac{\vec{n}_A}{\rho_A}$$

$$\vec{v}_B = \frac{\vec{n}_B}{\rho_B}$$



DIFUSÃO (Definição)

Fluxo (difusivo) em relação ao centro mássico

$$\vec{n}_A = \rho_A \vec{v}_A = \rho_A \vec{v} + \vec{j}_A \Rightarrow \boxed{\vec{j}_A = \rho_A (\vec{v}_A - \vec{v})} \quad \text{kg A/(m}^2 \text{ s)}$$

VELOCIDADE DO CENTRO DE MASSA

$$\vec{n} = \rho \vec{v} = \rho_A \vec{v}_A + \rho_B \vec{v}_B \Rightarrow \boxed{\vec{v} = \omega_A \vec{v}_A + \omega_B \vec{v}_B}$$

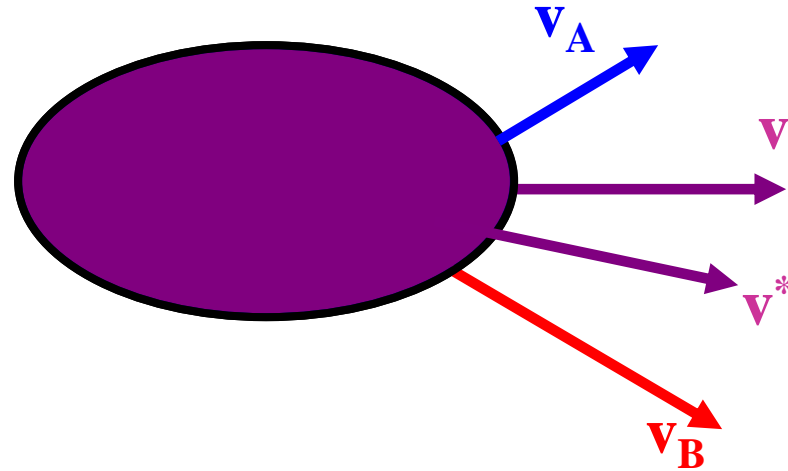
FLUXOS MOLARES: DIFUSIVOS E CONVECTIVOS

Sistema Binário

C_A - kgmol A/m³

$$\vec{V}_A = \frac{\vec{N}_A}{C_A}$$

$$\vec{V}_B = \frac{\vec{N}_B}{C_B}$$



DIFUSÃO (Definição)

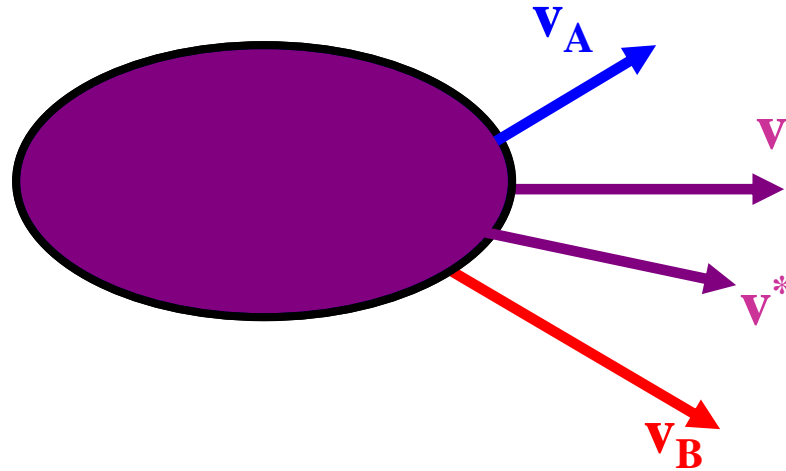
Fluxo (difusivo) em relação ao centro molar

$$\vec{N}_A = C_A \vec{V}_A = C_A \vec{V}^* + \vec{J}_A^* \Rightarrow \boxed{\vec{J}_A^* = C_A (\vec{V}_A - \vec{V}^*)} \text{ gmol A/(m}^2 \text{ s)}$$

VELOCIDADE DO CENTRO MOLAR

$$\vec{N} = C \vec{V}^* = C_A \vec{V}_A + C_B \vec{V}_B \Rightarrow \boxed{\vec{V}^* = x_A \vec{V}_A + x_B \vec{V}_B}$$

FLUXOS MOLARES: DIFUSIVOS E CONVECTIVOS



$$\vec{V} - \vec{V}^* = \omega_A (\vec{V}_A - \vec{V}^*) + \omega_B (\vec{V}_B - \vec{V}^*)$$

Generalizando-se para sistema multicomponente:

$$\vec{V} - \vec{V}^* = \sum_{\alpha=1}^N \omega_{\alpha} (\vec{V}_{\alpha} - \vec{V}^*)$$

$$\vec{V}^* - \vec{V} = \sum_{\alpha=1}^N x_{\alpha} (\vec{V}_{\alpha} - \vec{V})$$

FLUXOS MÁSSICOS E MOLARES: DIFUSIVOS E CONVECTIVOS - BIRD

Table 17.8-1 Notation for Mass and Molar Fluxes*

| Quantity | With respect to stationary axes | With respect to mass average velocity \mathbf{v} | With respect to molar average velocity \mathbf{v}^* |
|---------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Velocity of species α (cm/s) | \mathbf{v}_α (A) | $\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}$ (B) | $\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}^*$ (C) |
| Mass flux of species α (g/cm ² s) | $\mathbf{n}_\alpha = \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha$ (D) | $\mathbf{j}_\alpha = \rho_\alpha (\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v})$ (E) | $\mathbf{j}_\alpha^* = \rho_\alpha (\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}^*)$ (F) |
| Molar flux of species α (g-moles/cm ² s) | $\mathbf{N}_\alpha = c_\alpha \mathbf{v}_\alpha$ (G) | $\mathbf{J}_\alpha = c_\alpha (\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v})$ (H) | $\mathbf{J}_\alpha^* = c_\alpha (\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}^*)$ (I) |
| Sums of mass fluxes | $\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{n}_\alpha = \rho \mathbf{v}$ (J) | $\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{j}_\alpha = 0$ (K) | $\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{j}_\alpha^* = \rho (\mathbf{v} - \mathbf{v}^*)$ (L) |
| Sums of molar fluxes | $\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{N}_\alpha = c \mathbf{v}^*$ (M) | $\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{J}_\alpha = c (\mathbf{v}^* - \mathbf{v})$ (N) | $\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{J}_\alpha^* = 0$ (O) |
| Relations between mass and molar fluxes | $\mathbf{n}_\alpha = M_\alpha \mathbf{N}_\alpha$ (P) | $\mathbf{j}_\alpha = M_\alpha \mathbf{J}_\alpha$ (Q) | $\mathbf{j}_\alpha^* = M_\alpha \mathbf{J}_\alpha^*$ (R) |
| Interrelations among mass fluxes | $\mathbf{n}_\alpha = \mathbf{j}_\alpha + \rho_\alpha \mathbf{v}$ (S) | $\mathbf{j}_\alpha = \mathbf{n}_\alpha - \omega_\alpha \sum_{\beta=1}^N \mathbf{n}_\beta$ (T) | $\mathbf{j}_\alpha^* = \mathbf{n}_\alpha - x_\alpha \sum_{\beta=1}^N \frac{M_\alpha}{M_\beta} \mathbf{n}_\beta$ (U) |
| Interrelations among molar fluxes | $\mathbf{N}_\alpha = \mathbf{J}_\alpha + c_\alpha \mathbf{v}^*$ (V) | $\mathbf{J}_\alpha = \mathbf{N}_\alpha - \omega_\alpha \sum_{\beta=1}^N \frac{M_\beta}{M_\alpha} \mathbf{N}_\beta$ (W) | $\mathbf{J}_\alpha^* = \mathbf{N}_\alpha - x_\alpha \sum_{\beta=1}^N \mathbf{N}_\beta$ (X) |

* Entries in the shaded boxes, involving the "hybrid fluxes" \mathbf{j}_α^* and \mathbf{J}_α , are seldom needed; they are included only for the sake of completeness.

Equações Constitutivas

"LEIS" E MODELOS FÍSICOS

Modelo Físico → Observação Lagrangeana (material)

$$\rho \frac{D\varphi}{Dt} = - \operatorname{div} \vec{j}_\Phi + \dot{\sigma}_{\nabla\Phi}$$

VARIAÇÃO

DIFUSÃO

PRODUÇÃO

Equações Constitutivas

“LEI DE FICK” – DIFUSÃO DE MASSA

$$\varphi = \omega_A$$

$$\rho \frac{D\omega_A}{Dt} = -\text{div} \vec{j}_A + \dot{\sigma}_{\nabla A}$$

Difusão : “Lei” de Fick - Sistema binário (A/B)

$$\vec{j}_A = -\rho D_{AB} \text{grad} \omega_A \quad \omega_A : \text{fração mássica}$$

$$\vec{J}_A^* = -CD_{AB} \text{grad} X_A \quad X_A : \text{fração molar}$$

D_{AB} : Difusividade de A em B

Produção: “Leis” Cinéticas – Velocidade de reação - r_A

$$\dot{\sigma}_{\nabla A} = \dot{r}_i \cong v_{ij} K_j \prod_i \omega_i^{v_{ij}}$$

Equação da Continuidade para espécie A:

"LEI DE FICK" – DIFUSÃO DE MASSA

$$\rho \frac{D\omega_A}{Dt} = \frac{\partial \rho \omega_A}{\partial t} + \text{div } \rho \vec{v} \omega_A = - \text{div}(-\rho D_{AB} \text{grad } \omega_A) + \dot{\sigma}_{\nabla A}$$

$$\rho D_{AB} \sim cte$$

$$\rho \frac{D\omega_A}{Dt} = \frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \text{div } \rho_A \vec{v} = \rho D_{AB} \text{lap} \omega_A + \dot{\sigma}_{\nabla A}$$

A equação acima, para os diferentes sistemas de coordenadas, está apresentada no apêndice B.11 (Bird 2002).

$$\rho \frac{D\omega_A}{Dt} = \rho \frac{\partial \omega_A}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \text{grad} \omega_A = \rho D_{AB} \text{lap} \omega_A + \dot{\sigma}_{\nabla A}$$

Equações Constitutivas

“LEI DE FOURIER” – DIFUSÃO DE CALOR

$$\Phi = mc_p T \Rightarrow \varphi = \frac{\partial \Phi}{\partial m} = c_p T$$

$$\rho \frac{Dc_p T}{Dt} = -\text{div } \vec{j}_{c_p T} + \dot{\sigma}_{\nabla c_p T}$$

Difusão de Calor : “Lei” de FOURIER

$$\vec{j}_{c_p T} = \vec{q} = -k \text{ grad } T$$

k : condutividade térmica

Produção: q''' - p.exemplo - = $\mu \Phi_v$

Equação de Energia

"LEI DE FOURIER" – DIFUSÃO DE CALOR

$$\rho \frac{DC_P T}{Dt} = \rho \frac{\partial(C_P T)}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \text{grad}(C_P T) = -\text{div}(-k \text{ grad } T) + q'''$$

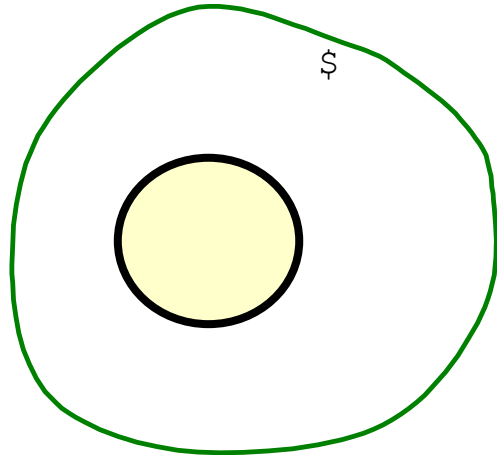
k e C_p : constantes

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad } T = \alpha \text{ lap } T + \frac{q'''}{\rho C_P}$$

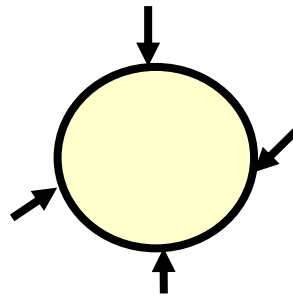
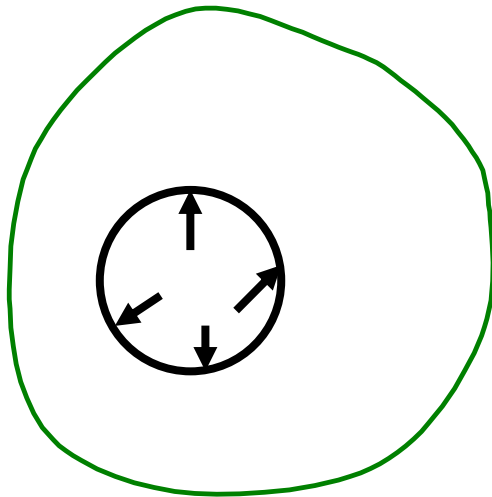
$\alpha = k/\rho C_p$: difusividade térmica

Equações Constitutivas

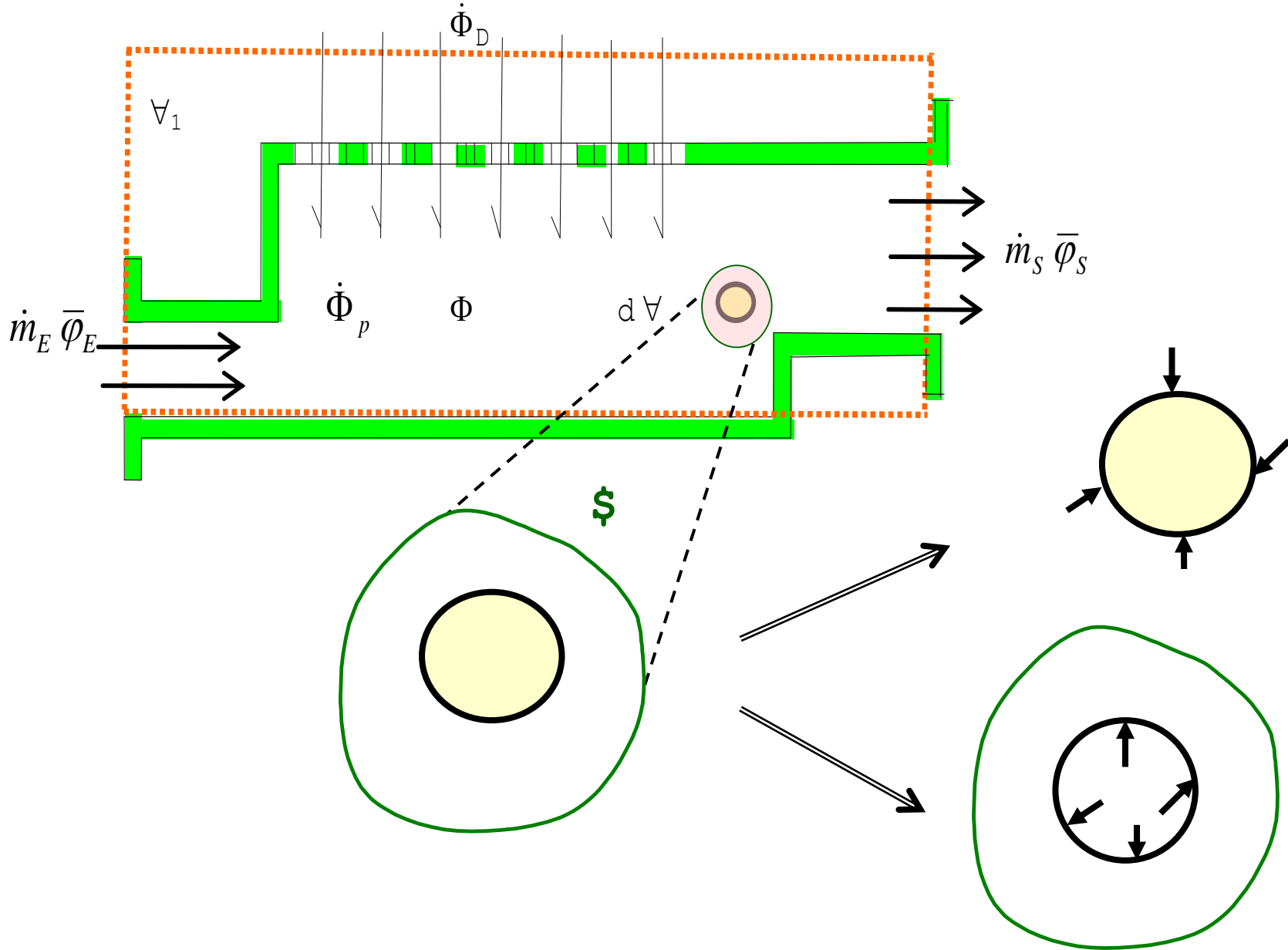
CAUCHY



VOLUME DE
FLUIDO

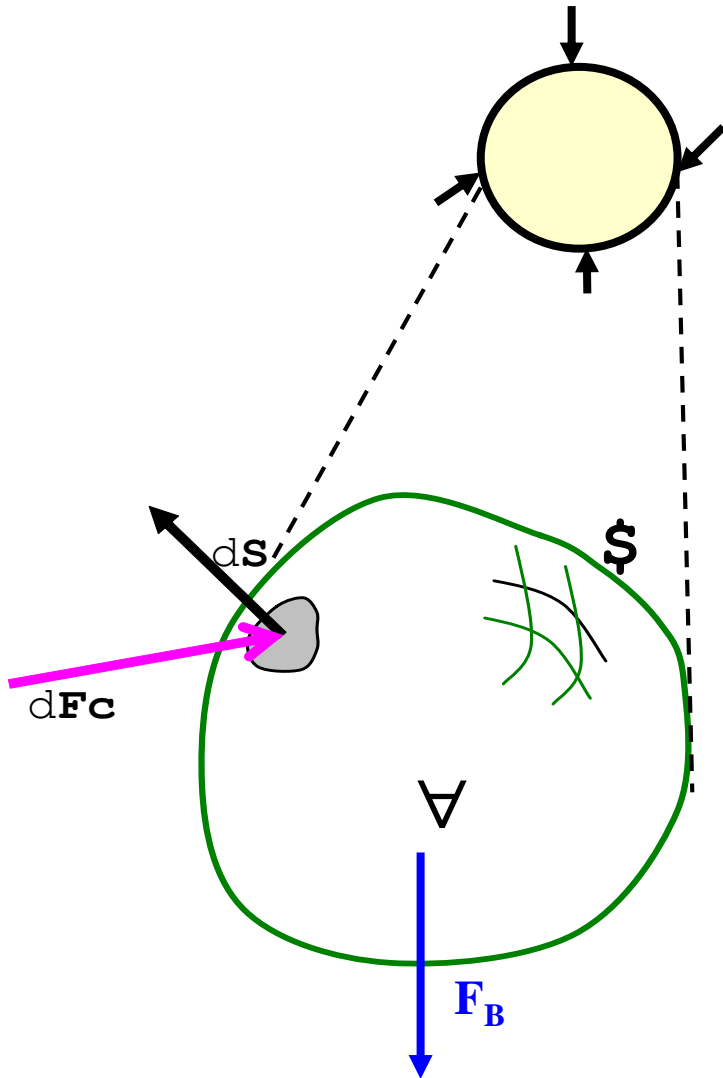


Equações Constitutivas – Escoamento - CAUCHY



Equações Constitutivas

FORÇA DE CONTATO E DE CAMPO



F_B - força de campo – produção

F_C - força de contato - difusão

Equações Constitutivas

FORÇA DE CONTATO E DE CAMPO

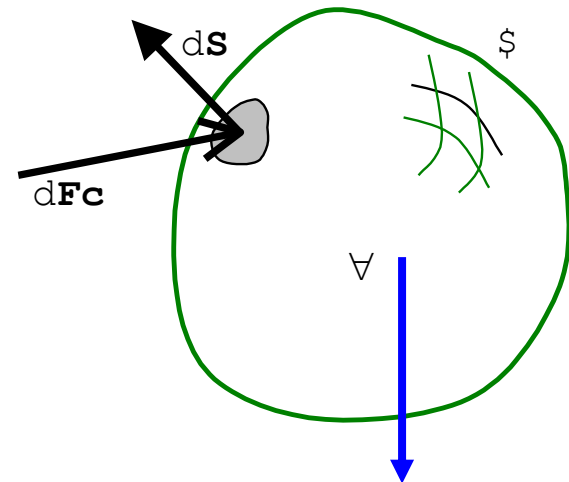
Força de campo/volume: GRAVIDADE $\vec{F}_B = \rho \vec{g}$

O tensor das **Tensões**: $\vec{\pi} = -\frac{d\vec{F}_C}{d\vec{S}}$

$$\vec{F}_C = \int_{\mathcal{S}} d\vec{F}_C = -\int_{\mathcal{S}} \vec{\pi} \cdot d\vec{S} = -\int_{\mathcal{V}} \text{div} \vec{\pi} dV$$

F_B - força de campo – produção

F_C - força de contato - difusão



Equações Constitutivas

LEI DE NEWTON – QUANTIDADE MOVIMENTO

$$\Phi = m\vec{v} \Rightarrow \varphi = \frac{\partial\Phi}{\partial m} = \vec{v}$$

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \vec{F}_B + \vec{F}_{Cv}$$

$$\vec{F}_B = \rho\vec{g}$$

$$\vec{F}_C = \int_{\mathcal{S}} d\vec{F}_C = - \int_{\mathcal{S}} \vec{\pi} \cdot d\vec{S} = - \int_{\mathcal{V}} d\text{div} \vec{\pi} dV$$

$$F_{Cv} = \frac{d\vec{F}_C}{dV} = -d\text{div} \vec{\pi}$$

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho\vec{g} - d\text{div} \vec{\pi}$$

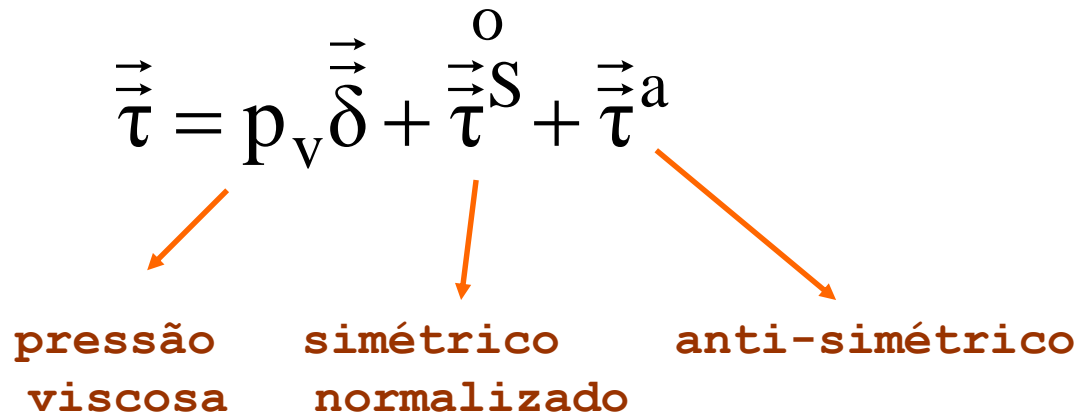
Equações Constitutivas

Decomposição do Tensor das **TENSÕES** π

$$\vec{\pi} = p\vec{\delta} + \vec{\tau} \left\{ \begin{array}{l} \text{tensões normais:} \quad \pi_{ii} = p + \tau_{ii} \\ \text{tensões de cisalhamento:} \quad \pi_{ij} = \tau_{ij} \end{array} \right.$$

π_{ij} : componente da força (de contato) na direção j por unidade de área perpendicular à direção i .

$$\vec{\tau} = p_v \vec{\delta} + \vec{\tau}^s + \vec{\tau}^a$$


pressão viscosa simétrico normalizado anti-simétrico

Equações Constitutivas

Decomposição do Tensor das TENSÕES

$$\vec{\pi} = p\vec{\delta} + \vec{\tau}$$

$$\vec{\tau} = p_v \vec{\delta} + \vec{\tau}^s + \vec{\tau}^a$$

pressão
viscosa

simétrico
normalizado

anti-simétrico

$$\begin{bmatrix} \tau_{11} & \tau_{21} & \tau_{31} \\ \tau_{21} & \tau_{22} & \tau_{23} \\ \tau_{31} & \tau_{32} & \tau_{33} \end{bmatrix} = \frac{\tau_{11} + \tau_{22} + \tau_{33}}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{2\tau_{11} - \tau_{22} - \tau_{33}}{3} & \frac{\tau_{21} + \tau_{12}}{2} & \frac{\tau_{31} + \tau_{13}}{2} \\ \frac{\tau_{12} + \tau_{21}}{2} & \frac{2\tau_{22} - \tau_{11} - \tau_{33}}{3} & \frac{\tau_{32} + \tau_{23}}{2} \\ \frac{\tau_{13} + \tau_{31}}{2} & \frac{\tau_{23} + \tau_{32}}{2} & \frac{2\tau_{33} - \tau_{11} - \tau_{22}}{3} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \frac{\tau_{21} - \tau_{12}}{2} & \frac{\tau_{31} - \tau_{13}}{2} \\ \frac{\tau_{12} - \tau_{21}}{2} & 0 & \frac{\tau_{32} - \tau_{23}}{2} \\ \frac{\tau_{13} - \tau_{31}}{2} & \frac{\tau_{23} - \tau_{32}}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

Equações Constitutivas

Decomposição do Tensor $\text{grad } \vec{v}$

$$\text{grad } \vec{v} = \frac{1}{3}(\text{div } \vec{v})\vec{\delta} + (\text{grad } \vec{v})^S + (\text{grad } \vec{v})^A$$

traço

simétrico
normalizado

anti-simétrico

dilatação

cisalhamento

rotação

$$(\text{grad } \vec{v})^S = \frac{1}{2} \left(\text{grad } \vec{v} + (\text{grad } \vec{v})^T \right) - \frac{1}{3}(\text{div } \vec{v})\vec{\delta}$$

$$(\text{grad } \vec{v})^A = \frac{1}{2} \left(\text{grad } \vec{v} - (\text{grad } \vec{v})^T \right)$$

Equações Constitutivas

Lei de NEWTON generalizada

$$\vec{\tau} = -\vec{\mu} \cdot \text{grad } \vec{v} \quad ; \quad \tau_{ij} = -\sum_k \sum_l \mu_{ijkl} \frac{\partial v_k}{\partial x_l}$$

μ_{ijkl} - Tensor dos coeficientes de viscosidade com 81 termos!

$$\vec{\tau} = p_v \vec{\delta} + \vec{\tau}^o + \vec{\tau}^a$$

Equações Constitutivas

Lei de NEWTON generalizada

$$\vec{\tau} = p_v \vec{\delta} + \vec{\tau}^s + \vec{\tau}^a$$

$$p_v = -\kappa \operatorname{div} \vec{v}$$

$$\vec{\tau}^a = -\eta_R (\operatorname{rot} \vec{v} - 2\vec{\Omega})$$

$$\vec{\tau}^s = -2\mu (\operatorname{grad} \vec{v})^s$$

Viscosidades

κ - "bulk" - dilatacional - compressibilidade

η_R - "rotational" - diferença entre a rotação do fluido e a rotação intrínseca da partícula

μ - "shear" - cisalhamento.

Equações Constitutivas

Lei de NEWTON generalizada

$$\vec{\tau} = -\kappa (\operatorname{div} \vec{v}) \vec{\delta} - 2\mu (\operatorname{grad} \vec{v})^s - \eta_R \underbrace{(\operatorname{rot} \vec{v} - 2\vec{\Omega})}_{\approx 0}$$

Substituindo-se:

$$(\operatorname{grad} \vec{v})^s = (\operatorname{grad} \vec{v})^s - \frac{1}{3} (\operatorname{div} \vec{v}) \vec{\delta}$$

$$\vec{\tau} = \left(\frac{2}{3} \mu - \kappa \right) (\operatorname{div} \vec{v}) \vec{\delta} - 2\mu (\operatorname{grad} \vec{v})^s$$

$$\vec{\tau} = \left(\frac{2}{3} \mu - \kappa \right) (\operatorname{div} \vec{v}) \vec{\delta} - \mu \left(\operatorname{grad} \vec{v} + (\operatorname{grad} \vec{v})^T \right)$$

Equações Constitutivas

NAVIER-STOKES

$$\vec{\tau} = -\mu \left(\text{grad } \vec{v} + (\text{grad } \vec{v})^T \right) + \left(\frac{2}{3} \mu - \kappa \right) (\text{div } \vec{v}) \vec{\delta}$$

Escoamento incompressível: $\text{div } \vec{v} = 0$

$$\vec{\tau} = -\mu \left(\text{grad } \vec{v} + (\text{grad } \vec{v})^T \right)$$

$$\text{div } \vec{\tau} = -\mu \text{div} \left(\text{grad } \vec{v} + (\text{grad } \vec{v})^T \right) = -\mu \left(\text{div grad } \vec{v} + \underbrace{\text{div} (\text{grad } \vec{v})^T}_{=0} \right)$$

Escoamento incompressível e newtoniano

$$\text{div } \vec{\tau} = -\mu \text{lap } \vec{v}$$

Equações Constitutivas

NAVIER- STOKES

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho \vec{g} - \text{div} \vec{\pi}$$

$$\vec{\pi} = p\vec{\delta} + \vec{\tau}$$

$$\text{div} \vec{\pi} = \text{div} \left(p\vec{\delta} \right) + \text{div} \vec{\tau} = \text{grad} p + \text{div} \vec{\tau}$$

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho \vec{g} - \text{grad} p - \text{div} \vec{\tau}$$

Equações Constitutivas

NAVIER- STOKES

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho \vec{g} - \text{grad } p - \text{div } \vec{\tau}$$

$$\text{div } \vec{\tau} = -\mu \text{lap } \vec{v}$$

NAVIER - STOKES

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \text{grad } \vec{v} = \rho \vec{g} - \text{grad } p + \mu \text{lap } \vec{v}$$

Escoamento incompressível e newtoniano

Equações constitutivas - Mecanismos complexos

Difusão de Calor - Transporte simultâneo de calor e massa

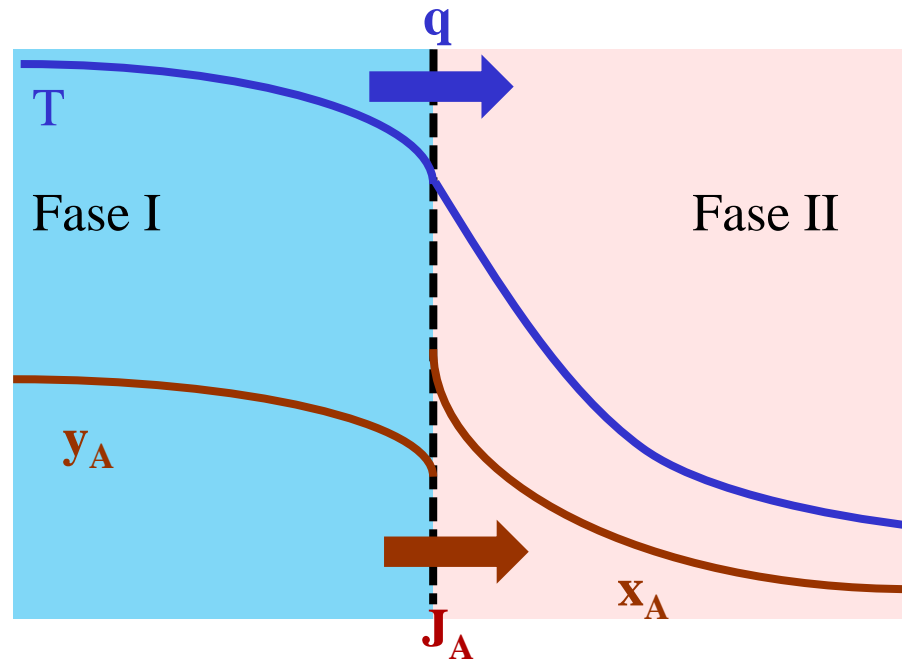
$$\vec{q} = -\vec{k} \cdot \text{grad} T + \sum \vec{j}_i \hat{H}_i + \vec{q}^x$$

DIFUSÃO DE CALOR

CONDUÇÃO FOURIER

DIFUSÃO

TERMODIFUSÃO DUFOUR



$$-(k \cdot \text{grad} T)_I + \vec{j}_A \hat{H}_{A,I} = -(k \cdot \text{grad} T)_{II} + \vec{j}_A \hat{H}_{A,II}$$

Equações constitutivas - Mecanismos complexos
Difusão de Massa - Difusão de Calor

$$\vec{J}_i = -D_i \left[\frac{C_i}{RT} (\text{grãd } \mu_i)_{T,P} + \frac{1}{RT} (\phi_{vi} - w_i) \text{grãd } P - \frac{\rho_i}{RT} \left(\vec{g}_i - \sum_{k=1}^n w_k \vec{g}_k \right) \right] + \frac{D_i^{(T)}}{M_i} \frac{\text{grãd } T}{T}$$

DIFUSÃO

**ORDINÁRIA
FICK**

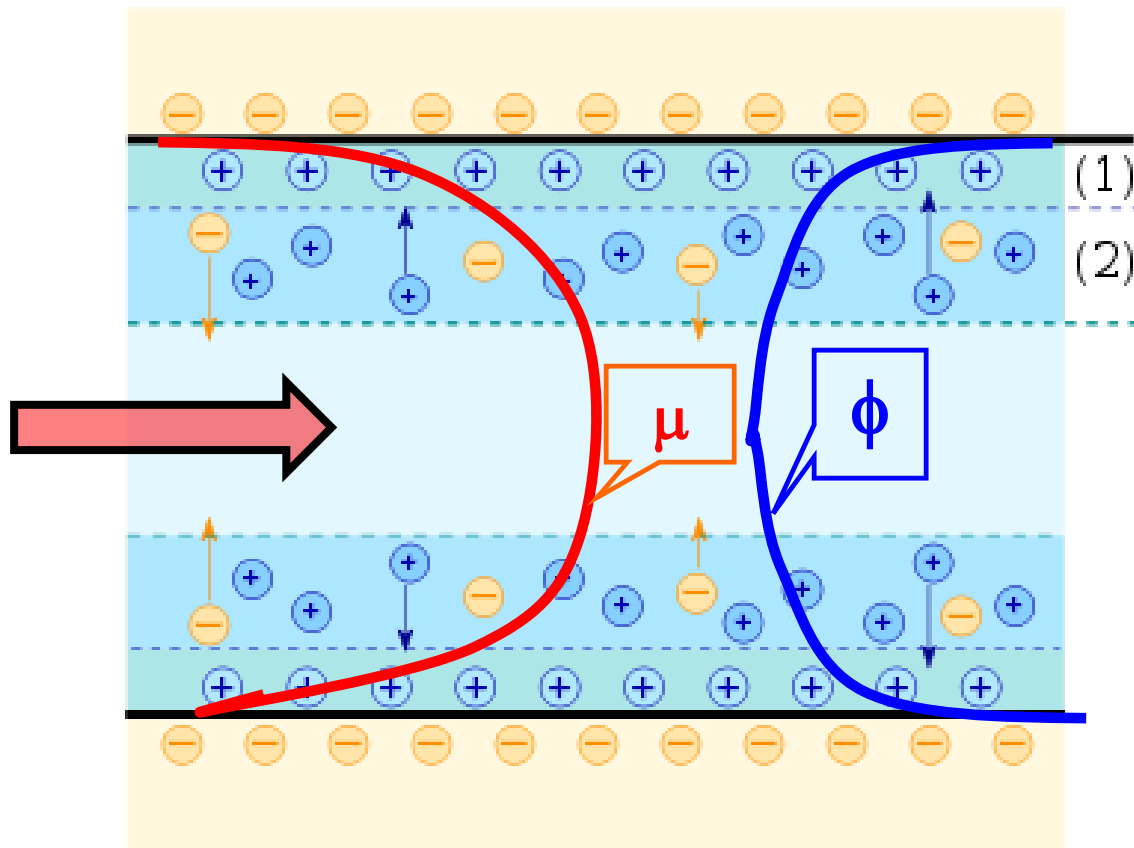
PRESSÃO

FORÇADA

**TÉRMICA
SORET**

- ϕ_{vi} = fração volumétrica de i
- w_i = fração mássica de i
- ρ_i = concentração mássica de i
- C_i = concentração molar de i
- \vec{g}_i = força de campo exercida em i
- $D_i^{(T)}$ = coeficiente de termodifusão
- $(\mu_i)_{T,P}$ = potencial químico, T e P ctes

Difusão de Massa - Eletroquímica 1



Difusão de Massa - Eletroquímica - 2

$$\vec{J}_i = -D_i \left[\frac{C_i}{RT} (\text{grãd } \mu_i)_{T,P} + \frac{1}{RT} (\phi_{vi} - w_i) \text{grãd } P - \frac{\rho_i}{RT} \left(\vec{g}_i - \sum_{k=1}^n w_k \vec{g}_k \right) \right] + \frac{D_i^{(T)}}{M_i} \frac{\text{grãd } T}{T}$$

DIFUSÃO ORDINÁRIA

CAMPO ELÉTRICO

$$\vec{F}_e = q\vec{E} \Rightarrow \vec{F}_e^M = -z_i \mathfrak{S} \text{grãd } \phi \Rightarrow \vec{g}_i^e = -\frac{z_i \mathfrak{S}}{M_i} \text{grãd } \phi$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{S} &= 96520 \text{C} / \text{mol} \\ z_i &= \text{valência} \\ \vec{E} &= -\text{grãd } \Phi \quad (\text{V} / \text{m}) \end{aligned}$$

$$\frac{\rho_i}{RT} \left(\vec{g}_i - \sum_{k=1}^n w_k \vec{g}_k \right) = \frac{\rho_i}{RT} \left(-\frac{z_i \mathfrak{S}}{M_i} \text{grãd } \phi + \sum_{k=1}^n w_k \frac{z_k \mathfrak{S}}{M_k} \text{grãd } \phi \right) =$$

$$= -\frac{\rho_i}{RT} \frac{z_i \mathfrak{S}}{M_i} \text{grãd } \phi \left(1 - \frac{M_i}{z_i} \sum_{k=1}^n \frac{w_k z_k}{M_k} \right) = -\frac{\rho_i}{RT} \frac{z_i \mathfrak{S}}{M_i} \text{grãd } \phi \left(1 - \underbrace{\frac{M_i}{M z_i} \sum_{k=1}^n x_k z_k}_{\approx 0, \text{ diluída}} \right)$$

$$w_k = \frac{x_k M_k}{M}$$

Difusão de Massa - Eletroquímica - 3

$$\frac{\rho_i}{RT} \left(\vec{g}_i - \sum_{k=1}^n w_k \vec{g}_k \right) = -\frac{\rho_i}{RT} \frac{z_i \mathfrak{F}}{M_i} \text{gr\~{a}d } \phi = -\frac{C_i}{RT} z_i \mathfrak{F} \text{gr\~{a}d } \phi$$

$$\frac{\rho_i}{RT} \left(\vec{g}_i - \sum_{k=1}^n w_k \vec{g}_k \right) = -\frac{C_i}{RT} z_i \mathfrak{F} \text{gr\~{a}d } \phi$$

$$\vec{J}_i = -D_i \left[\frac{C_i}{RT} (\text{gr\~{a}d } \mu_i)_{T,P} + \frac{1}{RT} (\varphi_{vi} - w_i) \text{gr\~{a}d } P - \frac{\rho_i}{RT} \left(\vec{g}_i - \sum_{k=1}^n w_k \vec{g}_k \right) \right] + \frac{D_i^{(T)}}{M_i} \text{gr\~{a}d } T$$

$$\mu_i = \mu_{i0} + RT \ln x_i$$

$$\frac{C_i}{RT} (\text{gr\~{a}d } \mu_i)_{T,P} = \frac{C_i}{RT} [\text{gr\~{a}d } (RT \ln x_i)]_{T,P} = C_i \frac{\text{gr\~{a}d } x_i}{x_i} = C_{X_i} \frac{\text{gr\~{a}d } x_i}{x_i} = \text{gr\~{a}d } C_i$$

$$\frac{C_i}{RT} (\text{gr\~{a}d } \mu_i)_{T,P} = \text{gr\~{a}d } C_i$$

Difusão de Massa - Eletroquímica - 4

$$\vec{J}_i = -D_i \left[\frac{C_i}{RT} (\text{grãd } \mu_i)_{T,P} - \frac{\rho_i}{RT} \left(\vec{g}_i - \sum_{k=1}^n w_k \vec{g}_k \right) \right]$$

$$\frac{C_i}{RT} (\text{grãd } \mu_i)_{T,P} = \text{grãd } C_i$$

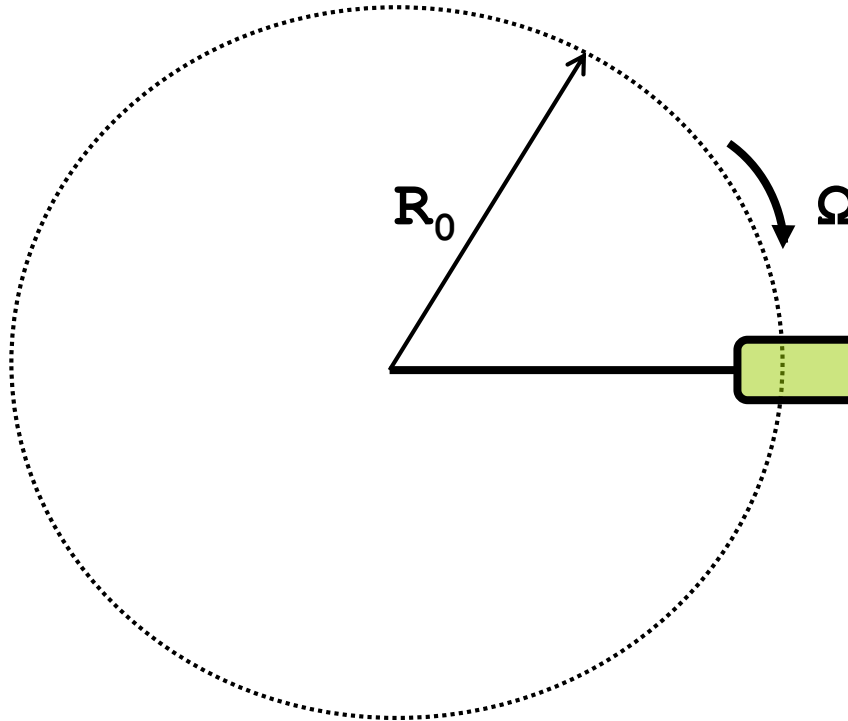
$$\frac{\rho_i}{RT} \left(\vec{g}_i - \sum_{k=1}^n w_k \vec{g}_k \right) = -\frac{C_i}{RT} z_i \mathfrak{F} \text{grãd } \phi$$

Equação de Nernst - Planck

$$\vec{J}_i = -D_i \left[\text{grãd } C_i + C_i z_i \frac{\mathfrak{F}}{RT} \text{grãd } \phi \right]$$

$$\frac{RT}{\mathfrak{F}} = 25,7 \text{ mV}$$

Centrifugação - 1



$$v_r = 0 \quad ; \quad v_z = 0 \quad ; \quad v_\theta = v_\theta = \vec{\Omega} \times \vec{r} = \Omega r$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{v_\theta^2}{r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) = - \frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (r v_r)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right] + \rho g_r$$

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \rho \frac{v_\theta^2}{r} = \rho \frac{(\Omega r)^2}{r} = \rho \Omega^2 r$$

Centrifugação - sistema binário - 2

$$\vec{J}_i = -D_i \left[\frac{C_i}{RT} (\text{grad } \mu_i)_{T,P} + \frac{1}{RT} (\varphi_{vi} - w_i) \text{grad } P - \frac{\rho_i}{RT} \left(\vec{g}_i - \sum_{k=1}^n w_k \vec{g}_k \right) \right] + \frac{D_i^{(T)}}{M_i} \frac{\text{grad } T}{T}$$

$$\frac{C_i}{RT} (\text{grad } \mu_A)_{T,P} = \text{grad } C_A = C \text{grad } x_A = C \frac{dx_A}{dr}$$

$$\varphi_{vA} = \frac{V_A}{V} = \frac{n_A}{V} \frac{V_A}{n_A} = \frac{m_A}{VM_A} \bar{V}_A = \rho \frac{m_A}{m} \frac{\bar{V}_A}{M_A} = \rho w_A \frac{\bar{V}_A}{M_A}$$

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \rho \Omega^2 r$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{RT} (\varphi_{vi} - w_i) \text{grad } P &= \frac{1}{RT} \left(\rho w_A \frac{\bar{V}_A}{M_A} - w_A \right) \rho \Omega^2 r = \\ &= \frac{\rho w_A}{RT M_A} (\rho \bar{V}_A - M_A) \Omega^2 r = \frac{C x_A}{RT} (\rho \bar{V}_A - M_A) \Omega^2 r \end{aligned}$$

Centrifugação - sistema binário - 3

$$\vec{J}_i = -D_i \left[\frac{C_i}{RT} (\text{grãd } \mu_i)_{T,P} + \frac{1}{RT} (\varphi_{vi} - w_i) \text{grãd } P \right]$$

$$\frac{C_A}{RT} (\text{grãd } \mu_A)_{T,P} = C \frac{dx_A}{dr}$$

$$\frac{1}{RT} (\varphi_{vA} - w_A) \text{grãd } P = \frac{C x_A}{RT} (\rho \bar{V}_A - M_A) \Omega^2 r$$

$$\vec{J}_A = -D_A \left[C \frac{dx_A}{dr} + \frac{C x_A}{RT} (\rho \bar{V}_A - M_A) \Omega^2 r \right]$$

Centrifugação - 4

$$\vec{J}_A = -D_A \left[C \frac{dx_A}{dr} + \frac{x_A}{RT} (\rho \bar{V}_A - M_A) \Omega^2 r \right]$$

No equilíbrio e sob ação centrífuga: $\vec{J}_A = 0$; $\vec{J}_B = 0$

$$\frac{dx_A}{dr} = -\frac{x_A}{RT} (\rho \bar{V}_A - M_A) \Omega^2 r \quad (1)$$

$$\frac{dx_B}{dr} = -\frac{x_B}{RT} (\rho \bar{V}_B - M_B) \Omega^2 r \quad (2)$$

$$(2) \times \bar{V}_A - (1) \times \bar{V}_B$$

$$\bar{V}_A \frac{dx_B}{x_B} - \bar{V}_B \frac{dx_A}{x_A} = \frac{1}{RT} (M_A \bar{V}_B - M_B \bar{V}_A) \Omega^2 r dr$$

Centrifugação - 5

$$\bar{V}_A \frac{dx_B}{x_B} - \bar{V}_B \frac{dx_A}{x_A} = \frac{1}{RT} (M_A \bar{V}_B - M_B \bar{V}_A) \Omega^2 r dr$$

$$\bar{V}_A \int_{x_{B1}}^{x_{B2}} \frac{dx_B}{x_B} - \bar{V}_B \int_{x_{A1}}^{x_{A2}} \frac{dx_A}{x_A} = \frac{1}{RT} (M_A \bar{V}_B - M_B \bar{V}_A) \Omega^2 \int_{r_1}^{r_2} r dr$$

$$\bar{V}_A \ln \frac{x_{B1}}{x_{B2}} - \bar{V}_B \ln \frac{x_{A1}}{x_{A2}} = \frac{1}{RT} (M_A \bar{V}_B - M_B \bar{V}_A) \Omega^2 \frac{(r_1^2 - r_2^2)}{2}$$

Equações Constitutivas

Fluidos Não Newtonianos

Newtoniano e incompressível: $\vec{\tau} = -\mu \left(\text{grad } \vec{v} + (\text{grad } \vec{v})^T \right) = -\mu \dot{\vec{\gamma}}$

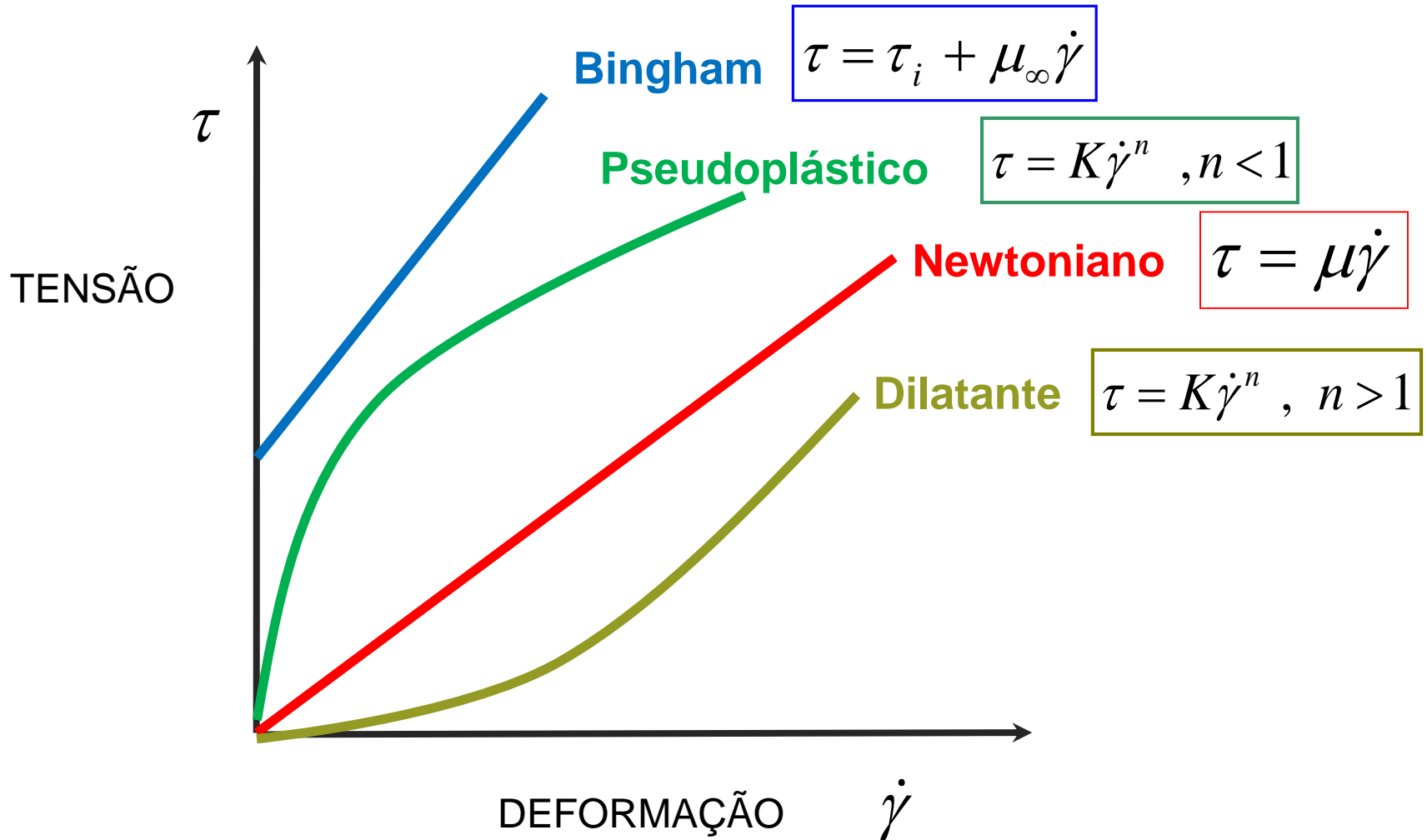
Não Newtoniano e incompressível:
$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{\tau} = -\eta \left(\text{grad } \vec{v} + (\text{grad } \vec{v})^T \right) = -\eta \dot{\vec{\gamma}} \\ \eta = \eta(\dot{\gamma}) \quad \dot{\gamma} = \sqrt{\frac{1}{2} \dot{\vec{\gamma}} : \dot{\vec{\gamma}}} \end{array} \right.$$

Modelo: Lei de potência $\eta = m \dot{\gamma}^{n-1}$

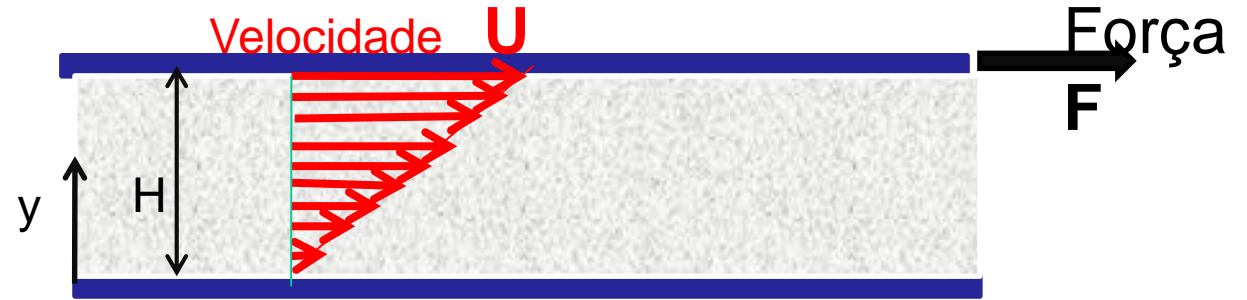
Quantidade de movimento:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \text{grad } \vec{v} = \rho \vec{g} - \text{grad } p - \text{div } \vec{\tau}$$

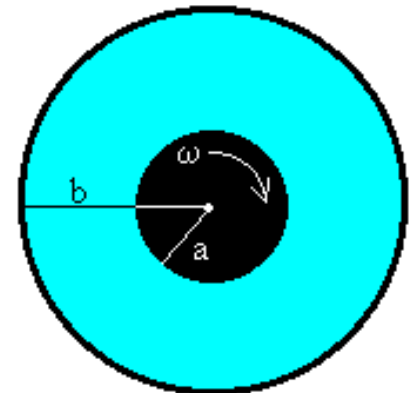
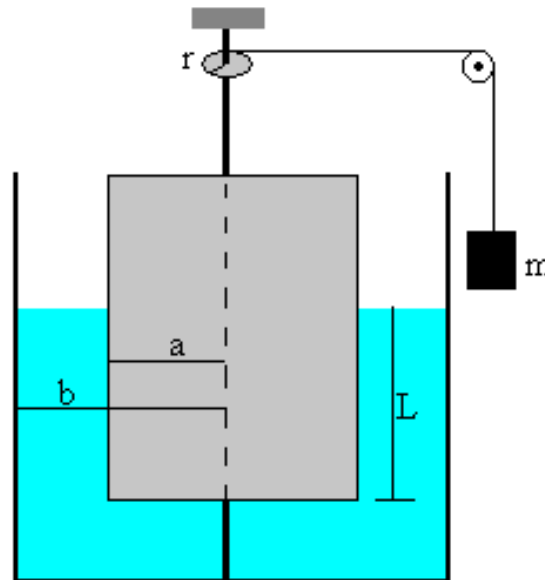
Reologia



Reômetro



Reômetro de Cilindros Coaxiais



FENÔMENOS DE TRANSPORTE

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \rho \vec{v} = 0$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \text{div } \vec{v}$$

$$\rho \frac{D\omega_A}{Dt} = \frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \text{div } \rho_A \vec{v} = \rho D_{AB} \text{lap} \omega_A + \dot{\sigma}_{VA}$$

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad } T = \alpha \text{lap} T + \frac{\dot{q}'''}{\rho C_P}$$

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \text{grad } \vec{v} = \rho \vec{g} - \text{grad } p + \mu \text{lap } \vec{v}$$

FENÔMENOS DE TRANSPORTE

MODELAGEM E SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES

