



Fundamentos da transferência de massa

Prof. Alexei Essiptchouk

**Dep. Engenharia Ambiental
Instituto de Ciência e Tecnologia
Universidade Estadual Paulista
“Júlio de Mesquita Filho”**

Introdução

- A transferência de massa é a base para muitos processos físicos, químicos e biológicos
 - aeração de águas residuais;
 - purificação de minérios e isótopos;
 - deposição químico de vapor;
 - oxigenação do sangue;
 - transporte de íons através das membranas dentro do rim;
 - etc

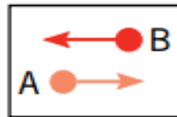
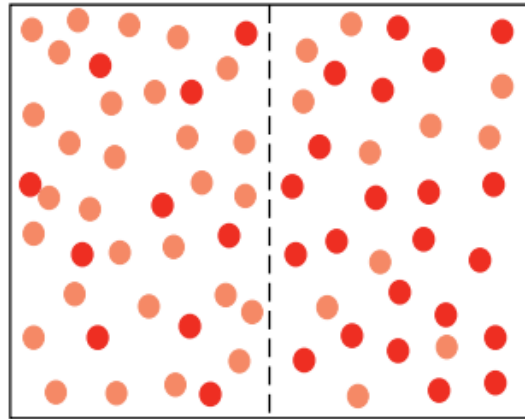
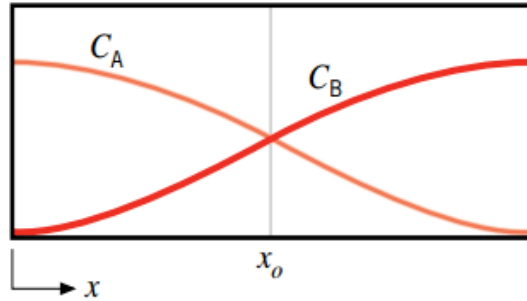
Introdução

- Dois modos distintos de transporte
 - transferência de massa molecular (por movimento molecular aleatório em fluidos quiescentes)
 - transferência de massa convectiva (de uma superfície para um fluido em movimento, auxiliada pelas características dinâmicas do fluxo)
- Os dois mecanismos frequentemente agem simultaneamente

Difusão molecular

- Difusão molecular - transporte macroscópico de massa, independente de qualquer convecção dentro do sistema
- Difusão molecular é massa em trânsito como resultado de uma diferença de concentrações de uma espécie em uma mistura
- Potencial motriz – gradiente de concentração
- Análogos:
 - Transferência de calor por condução
 - Transferência de momento num escoamento laminar

Princípio físico



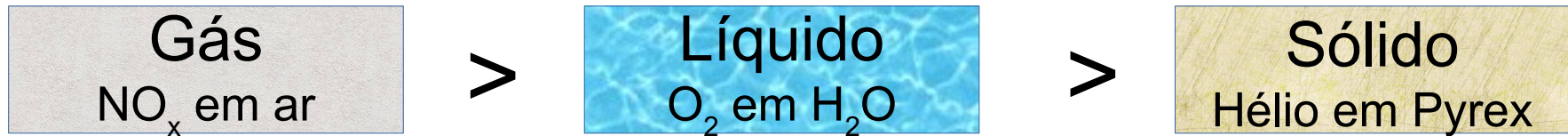
- Câmara com 2 espécies A e B separadas por uma divisora
- Temperatura e pressão são mesmas
- Num instante $t=0$ a divisora é removida
- A probabilidade de A atravessar o plano x_0 de esquerda para direita é mesma para outro direção
- Como a concentração de A, $C_A|_{x_0-0} > C_A|_{x_0+0}$
→ existe transporte líquido do A no direção x

Para $t \rightarrow \infty$ C_A e C_B uniformes → não há transporte líquido

Exemplo



Transferência de massa é influenciada pelo espaçamento molecular



Definições

- *Transferência de massa* ou *Difusão* acontece somente em misturas
- Mistura é constituída de dois ou mais espécies (constituintes químicos)
- Avaliação da mistura envolve um exame do efeito de cada componente
- Discutimos a base comum: espécie, concentração, fração molar, velocidade e fluxo.

Espécie

- Espécie é uma molécula identificável (CO_2 , N_2) que pode ser transportada e/ou convertida em outras espécies
- Exemplo: $\text{CO}_2 \rightarrow \text{CO} + \text{O}$
- Uma mistura (por exemplo, ar) também pode ser identificada como uma espécie
- Para gases ideais

Pressão parcial constituinte $p_i = \rho_i R_i T = c_i R T$

- c_i é concentração molar
- $R = 8,314 \text{ J}/(\text{mol K})$ – constante universal de gás

$$R_i = \frac{R}{M_i}$$

Concentração

- Concentração **mássica**, ρ_A , [kg/m³], da espécie é definida como a massa do componente A que está presente em unidade de volume da mistura

$$\rho_A = \frac{m_A}{V}$$

- A concentração mássica total ou densidade é a massa total da mistura contida na unidade de volume

$$\rho = \frac{m}{V} = \sum_{i=1}^n \rho_i$$

- Fração mássica da espécie A

$$w_A = \frac{\rho_A}{\sum_{i=1}^n \rho_i}$$

$$\sum_{i=1}^n w_i = 1$$

Concentração

- Concentração **molar**, c_A , [kmol/m³], é definida como o número de mols da espécie A que está presente em unidade de volume da mistura
- Para fase gasosa

$$p_A V = n_A RT \quad c_A = \frac{n_A}{V} = \frac{p_A}{RT}$$

- Concentração molar total $c = \sum_{i=1}^n c_i$

- Para mistura gasosa $c = \frac{n_{total}}{V} = \frac{p}{RT}$

- A relação entre concentração mássica e concentração molar $c_A = \frac{\rho_A}{M_A}$

Fração molar e mássica

- Fração molar para líquidos ou sólidos, x_A , e para mistura gasosa, y_A , são concentrações molares da espécie A dividida por concentração molar total

$$x_A = \frac{c_A}{c} \quad y_A = \frac{c_A}{c}$$

- Para misturas gasosas (lei de Dalton)

$$y_A = \frac{c_A}{c} = \frac{p_A/RT}{p/RT} = \frac{p_A}{p}$$

- Fração mássica

$$w_i = \frac{\rho_i}{\rho}$$

- Soma das frações

$$\sum_{i=1}^n x_i = 1 \quad \sum_{i=1}^n y_i = 1 \quad \sum_{i=1}^n w_i = 1$$

Velocidade mássica

- Em mistura, as espécies diferentes, normalmente, possuam velocidades diferentes
- Velocidade mássica média (*mass-average*) para mistura multicomponente

$$\mathbf{u} = \frac{\sum_{i=0}^n \rho_i \mathbf{u}_i}{\sum_{i=0}^n \rho_i} = \frac{\sum_{i=0}^n \rho_i \mathbf{u}_i}{\rho}$$

- $\mathbf{u}_i$ é a velocidade absoluta da espécie i relativamente ao eixo de coordenadas estacionário
- Velocidade relativa de difusão em termos de velocidade mássica

$$\mathbf{u}_i - \mathbf{u}$$

Velocidade molar

- Mesmo procedimento em termos de velocidade molar
- Velocidade molar média (*molar-average*)

$$U = \frac{\sum_{i=0}^n c_i \mathbf{u}_i}{\sum_{i=0}^n c_i} = \frac{\sum_{i=0}^n c_i \mathbf{u}_i}{C}$$

- Velocidade relativa de difusão em termos de velocidade molar $\mathbf{u}_i - U$

De acordo com a lei de Fick, uma espécie pode ter a velocidade relativa às velocidades mássica e molar somente se *existirem gradientes de concentração*

Fluxos

- O **fluxo mássico ou molar** – é **quantidade vetorial** que representa a *quantidade* de A transferida por difusão por *unidade de tempo* e por *unidade de área* perpendicular à direção de transferência.
- O fluxo pode ser definido com referência
 - às coordenadas fixas no espaço,
 - coordenadas que estão se movendo com a velocidade média
 - **mássica** $\mathbf{u}$
 - **molar** $\mathbf{U}$
- O fluxo mássico ou molar, além de gradiente de concentração, depende dos gradientes de **temperatura**, **pressão** ou **força externa**. Em maioria dos casos esses efeitos são desprezíveis

Lei de Fick

- Uma relação *empírica* para o fluxo molar, primeiramente postulada por Fick e, conseqüentemente, frequentemente referida como a primeira lei de Fick, *define a difusão do componente A em um sistema isotérmico e isobárico*.

$$J_A = -D_{AB} \nabla c_A \qquad j_A = -D_{AB} \nabla \rho_A$$

J_A – fluxo molar

j_A – fluxo mássico

D_{AB} – coeficiente de difusão binária ou difusividade mássica

c_A e ρ_A - são concentração molar e mássica da espécie A para **condições isotérmicas e isobáricas**

Lei de Fick

- Uma relação de fluxo mais geral que **não é restrita a sistemas isotérmicos e isobáricos** é escrita em termos de frações molar e mássica

$$\mathbf{J}_A = -c D_{AB} \nabla y_A$$

$$\mathbf{j}_A = -\rho D_{AB} \nabla m_A$$

c e ρ - são concentração total e densidade (constantes) para condições isotérmicas e isobáricas

Lei de Fick

Stefan (1872) e Maxwell (1877) provaram que o fluxo de massa, em relação a um sistema fixo de coordenadas, é o resultado de duas contribuições:

- do gradiente de concentração
- do movimento global

Massa total transportada	=	Transporte por difusão	+	Movimento global do fluido
--------------------------	---	------------------------	---	----------------------------

$$N_{A,z} = J_{A,z} + c_A u_{A,z}$$

Lei de Fick

Para um sistema *binário* (componentes A e B) com uma velocidade média U_z constante na direção z , o fluxo molar na direção z em relação à velocidade média molar pode ser expresso

$$J_A = c_A(u_{A,z} - U_z) = -c D_{AB} \frac{dy_A}{dz}$$

$$U_z = \frac{\sum_{i=0}^n c_i u_i}{c} = \frac{1}{c} (c_A u_{A,z} + c_B u_{B,z})$$

Reescrevendo

$$c_A u_{A,z} = -c D_{AB} \frac{dy_A}{dz} + c_A U_z = -c D_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A (c_A u_{A,z} + c_B u_{B,z})$$

Como os fluxos molares

$$N_{A,z} = c_A u_{A,z} \quad N_{B,z} = c_B u_{B,z}$$

$$N_{A,z} = -c D_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A (N_{A,z} + N_{B,z})$$

Equação da taxa de Fick

Fluxos

$$N_{A,z} = -c D_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A (N_{A,z} + N_{B,z})$$

Fluxo $N_{A,z}$ inclui dois componentes

- **Difusão:** Fluxo molar devido ao gradiente de concentração (*concentration gradient contribution*)

$$-c D_{AB} \nabla y_A$$

- **Advecção:** Fluxo molar, resultante do movimento volumétrico da espécie A

$$y_A (N_{A,z} + N_{B,z}) = y_A (c_A u_{A,z} + c_B u_{B,z}) = y_A c U = c_A U$$

Fluxos

Equação pode ser generalizada para 3D

$$N_A = -c D_{AB} \nabla y_A + y_A (N_A + N_B)$$

Para uma mistura multicomponente

$$N_A = -c D_{AM} \nabla y_A + y_A \sum_{i=1}^n N_i$$

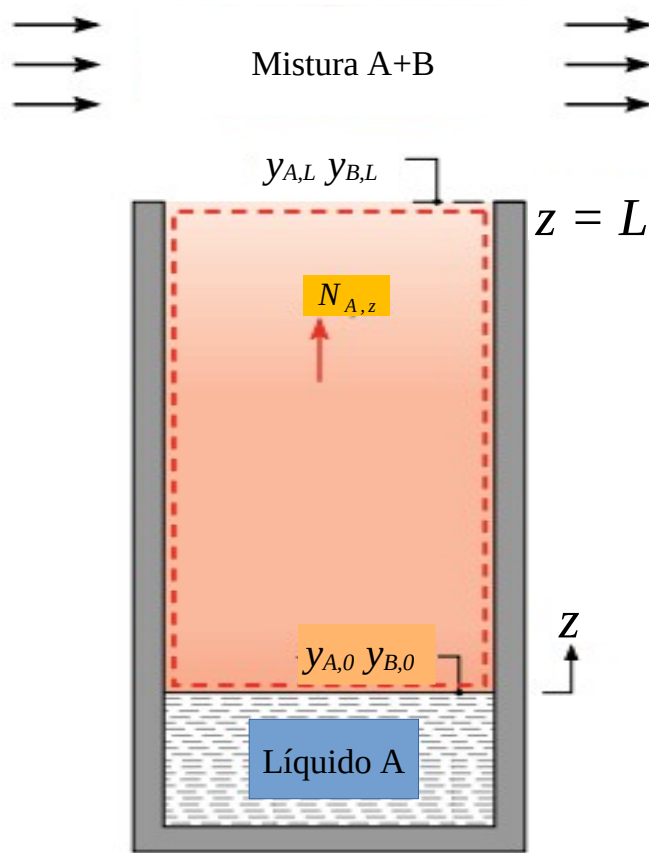
Em termos da densidade mássica $\mathbf{n}_A = -\rho D_{AB} \nabla w_A + w_A (\mathbf{n}_A + \mathbf{n}_B)$

Onde $\mathbf{n}_A = \rho_A \mathbf{u}_A$ $\mathbf{n}_B = \rho_B \mathbf{u}_B$

Sob condições isotérmicas e isobáricas

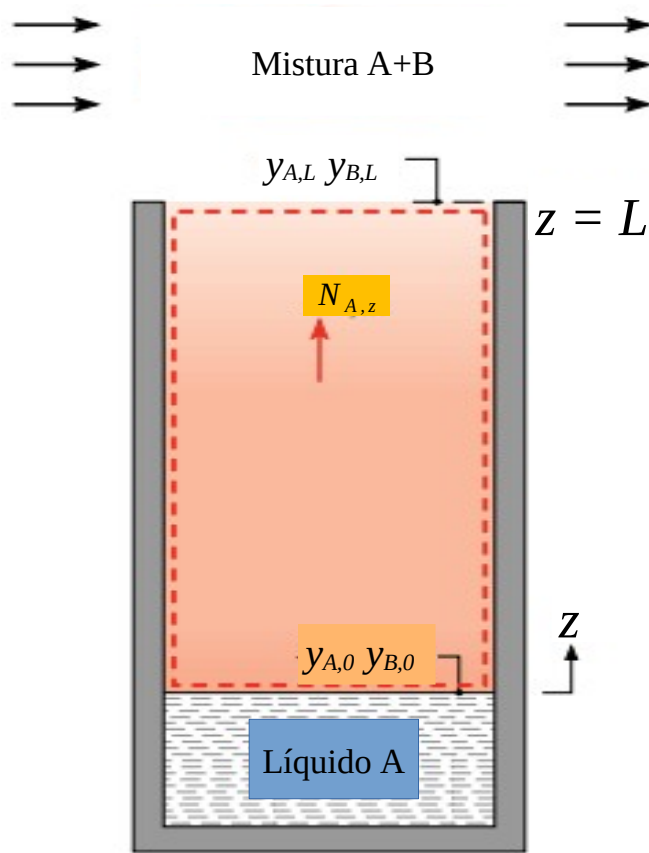
$$\mathbf{n}_A = \underbrace{-D_{AB} \nabla \rho_A}_{\text{Difusão}} + \underbrace{w_A (\mathbf{n}_A + \mathbf{n}_B)}_{\text{Advecção}}$$

Evaporação em uma coluna



- Coluna com líquido A
- Fluxo acima da coluna mantém as condições $c_{A,L}$, $c_{B,L}$, p , $T = \text{const}$;
- Equilíbrio entre fases líquida e gasosa, i.e $c_{A,0}$ = corresponde a condição de saturação
- Espécie B não se dissolve no A $\rightarrow N_{B,0} = 0$

Evaporação em uma coluna



$$N_A = -c D_{AB} \nabla y_A + y_A (N_A + N_B)$$

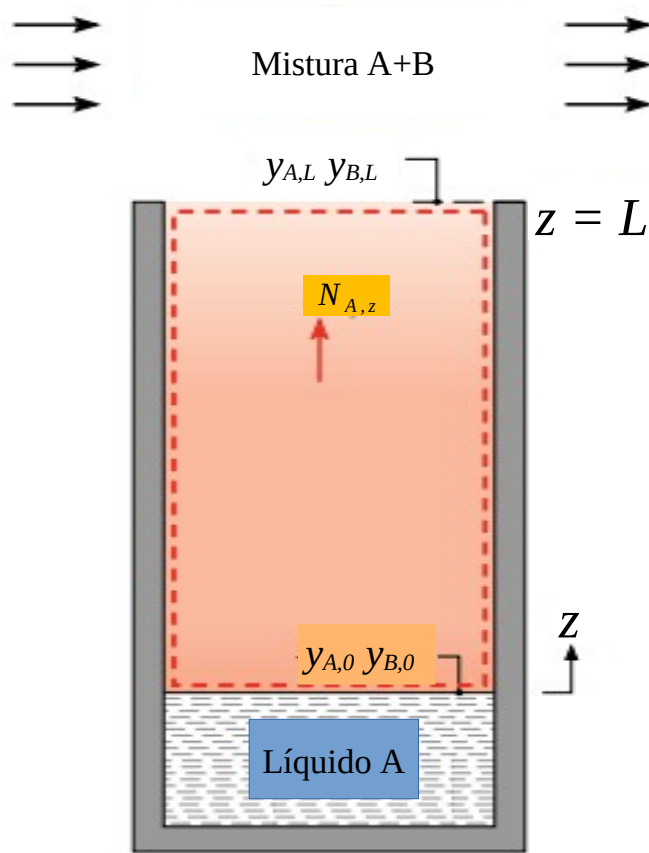
Caso 1D:

$$N_{A,z} = -c D_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A (N_{A,z} + N_{B,z})$$

As espécies não se acumulam: $\frac{dN_{A,z}}{dz} = 0$, i.e. o fluxo molar absoluto do A é constante para $0 < z < L$ e as variáveis podem ser separadas

O regime estacionário exige $N_{B,z} = 0$

Evaporação em uma coluna



$$N_{A,z} = -c D_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A N_{A,z}$$

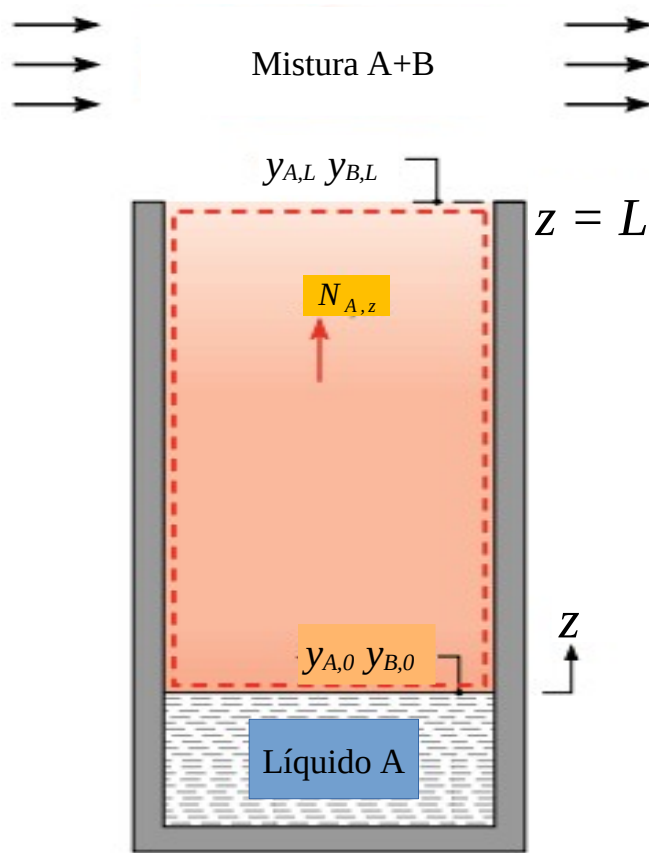
$$N_{A,z} = -\frac{c D_{AB}}{1 - y_A} \frac{dy_A}{dz}$$

$$\int_0^L N_{A,z} dz = -c D_{AB} \int_{y_{A,0}}^{y_{A,L}} \frac{dy_A}{1 - y_A}$$

$$N_{A,z} L = -c D_{AB} \left(-\ln(1 - y_A) \right) \Big|_{y_{A,0}}^{y_{A,L}}$$

$$N_A = \frac{c D_{AB}}{L} \ln \frac{1 - y_{A,L}}{1 - y_{A,0}}$$

Evaporação em uma coluna



A média logarítmica da concentração da espécie B

$$y_{B,lm} = \frac{y_{B,L} - y_{B,0}}{\ln \frac{y_{B,L}}{y_{B,0}}}$$

$$y_B = 1 - y_A$$

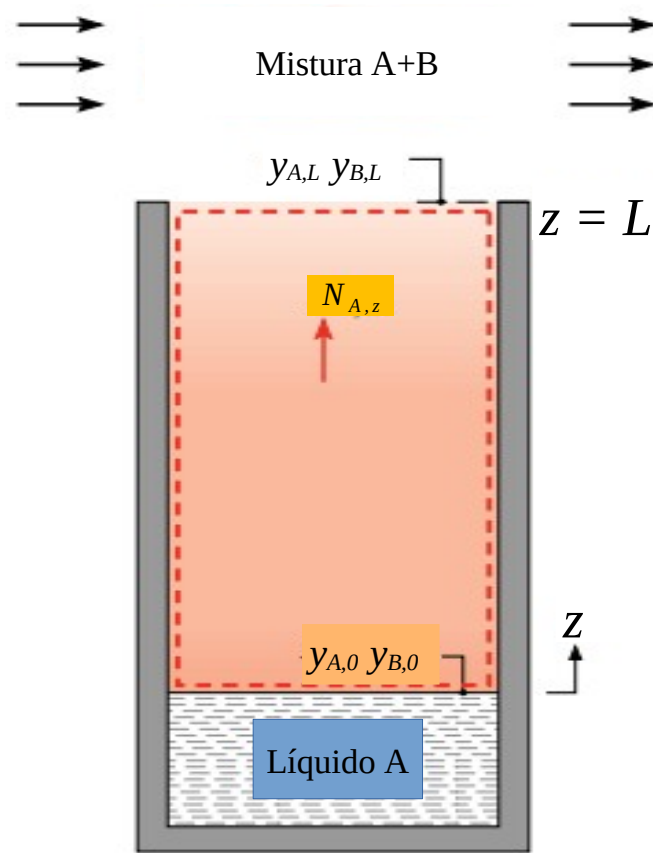
$$y_{B,lm} = \frac{y_{A,0} - y_{A,L}}{\ln \frac{1 - y_{A,L}}{1 - y_{A,0}}}$$

$$N_A = \frac{c D_{AB}}{L} \ln \frac{1 - y_{A,L}}{1 - y_{A,0}}$$



$$N_{A,z} = \frac{c D_{AB}}{L} \frac{y_{A,0} - y_{A,L}}{y_{B,lm}}$$

Evaporação em uma coluna



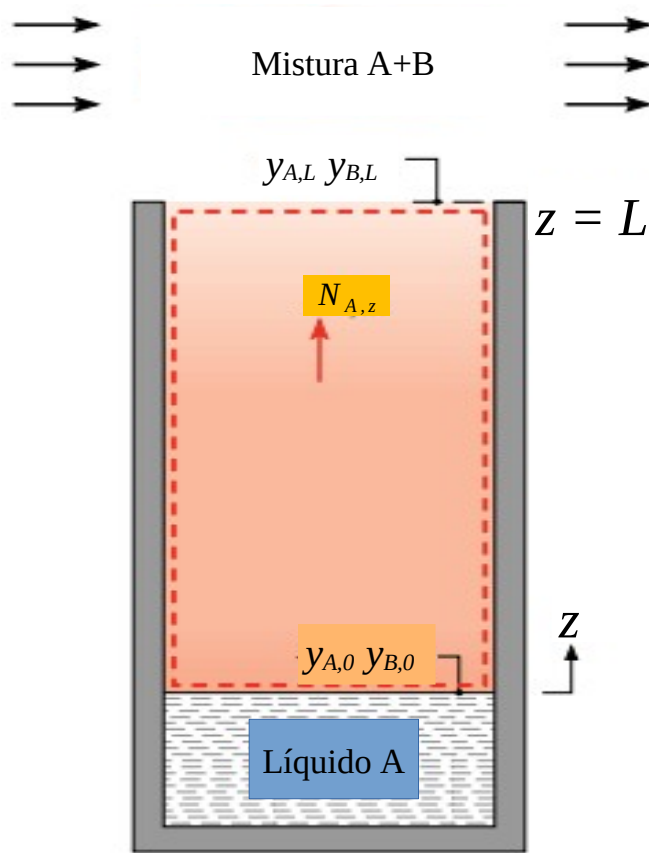
Em termos da pressão

$$c = \frac{n}{V} = \frac{P}{RT}$$

$$y_A = \frac{p_A}{P}$$

$$N_{A,z} = \frac{D_{AB} P}{RTL} \frac{p_{A,0} - p_{A,L}}{p_{B,lm}}$$

Evaporação em uma coluna



Como $\frac{dN_{A,z}}{dz} = 0$

$$N_{A,z} = -\frac{c D_{AB}}{1-y_A} \frac{dy_A}{dz}$$

$$\frac{d}{dz} \left[-\frac{c D_{AB}}{1-y_A} \frac{dy_A}{dz} \right] = 0$$

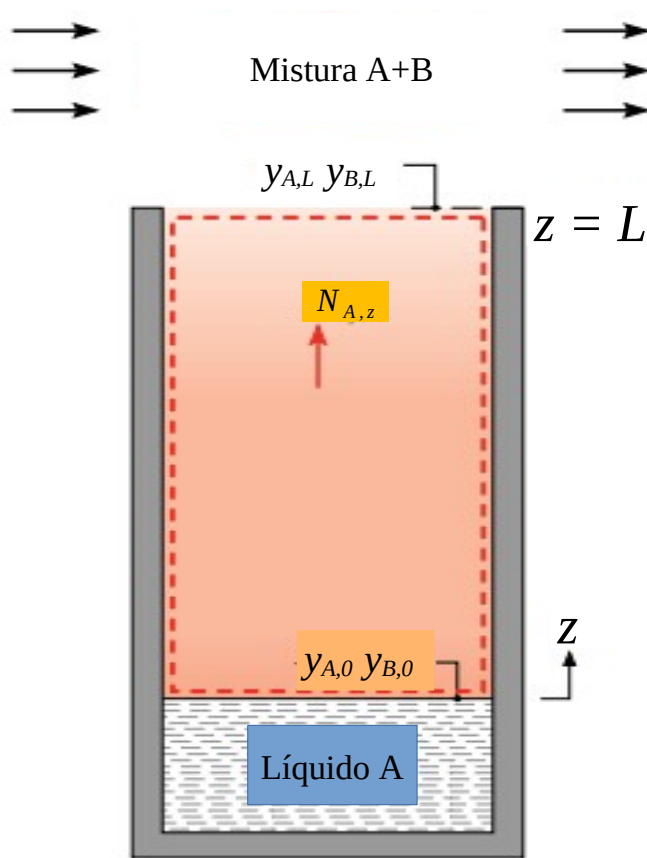
$$-\ln(1-y_A) = C_1 z + C_2$$

$$y_A(0) = y_{A,0} \rightarrow C_2 = -\ln(1-y_{A,0})$$

$$y_A(L) = y_{A,L} \rightarrow -\ln(1-y_{A,L}) = C_1 L - \ln(1-y_{A,0})$$

$$C_1 = \frac{1}{L} \ln \frac{1-y_{A,0}}{1-y_{A,L}}$$

Evaporação em uma coluna



$$-\ln(1-y_A)=C_1z+C_2$$

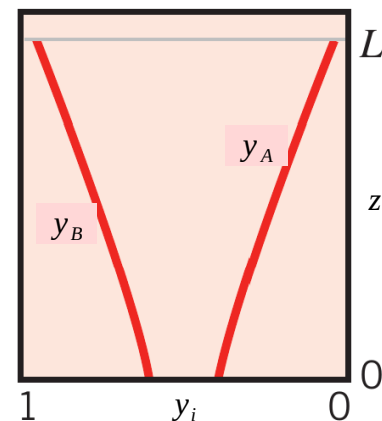
$$\ln(1-y_A)=\frac{z}{L}\ln\frac{1-y_{A,0}}{1-y_{A,L}}+\ln(1-y_{A,0})$$

$$\ln(1-y_A)-\ln(1-y_{A,0})=\frac{z}{L}\ln\frac{1-y_{A,0}}{1-y_{A,L}}$$

$$\frac{1-y_A}{1-y_{A,0}} = \left[\frac{1-y_{A,0}}{1-y_{A,L}} \right]^{\frac{Z}{L}}$$

$$1 - y_A = y_B$$

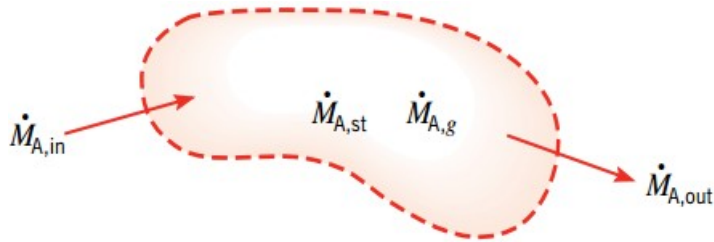
$$\frac{y_B}{y_{B,0}} = \left[\frac{y_{B,0}}{y_{B,L}} \right]^{\frac{z}{L}}$$



A equação de difusão mássica

A taxa na qual a massa de alguma espécie **entra** em um volume de controle (VC), mais a taxa na qual a massa de espécie é **gerada** no interior do VC, menos a taxa na qual a massa dessa espécie **deixa** o VC, tem que ser igual a taxa de **aumento** da massa da espécie acumulada no interior do VC

$$\dot{M}_{A,ent} + \dot{M}_{A,ger} - \dot{M}_{A,sai} = \frac{dM_A}{dt} \equiv \dot{M}_{A,acu}$$



$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} \rho_A dV = - \iint_{SC} \rho_A \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}} dA + \iiint_{VC} r_A dV$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} \rho_A dV = - \iiint_{VC} \nabla \cdot (\rho_A \mathbf{u} \cdot \hat{\mathbf{n}}) dV + \iiint_{VC} r_A dV$$

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{n}_A) - r_A = 0$$

$$\mathbf{n}_A = -D_{AB} \nabla \rho_A + w_A (\mathbf{n}_A + \mathbf{n}_B)$$

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{N}_A) - R_A = 0$$

A equação de difusão mássica

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{n}_A) - r_A = 0$$

$$\mathbf{n}_A = -D_{AB} \nabla \rho_A + w_A (\mathbf{n}_A + \mathbf{n}_B)$$

$$\frac{1}{D_{AB}} \frac{\partial \rho_A}{\partial t} = \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \rho_A}{\partial z^2} + \frac{r_A}{D_{AB}}$$

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{N}_A) - R_A = 0$$

$$\frac{1}{D_{AB}} \frac{\partial c_A}{\partial t} = \frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} + \frac{R_A}{D_{AB}}$$

Coeficiente de difusão, D_{AB} , em gases

Da lei de Fick determinamos a dimensão do coeficiente de difusão

$$D_{AB} = \frac{-J_{A,z}}{dc_A/dz} = \left(\frac{M}{L^2 t} \right) \left(\frac{1}{M/L^3 \cdot 1/L} \right) = \frac{L^2}{t}$$

Dimensão, L^2/T , é idêntica à de outras envolvidas no FT: viscosidade ν e difusividade térmica α .

Coeficiente de difusão, D_{AB} , em gases

No modelo mais simples (teoria cinética dos gases) para o coeficiente de autodifusão (espécie A se difunde através do seu isotopo A*)

$$D_{AA^*} = \frac{1}{3} \lambda u$$

$$\lambda = \frac{kT}{\sqrt{2} \pi \sigma_A^2 p}$$

O caminho livre (ou livre percurso médio)

$$u = \sqrt{\frac{8kN_A T}{\pi M_A}}$$

A velocidade média da espécie A

Substituindo

$$D_{AA^*} = \frac{2T^{\frac{3}{2}}}{3\pi^{\frac{3}{2}} \sigma_A^2 p} \sqrt{\frac{k^3 N_A}{M_A}}$$

$$D_{AA^*} \sim T^{\frac{3}{2}}$$

$$D_{AA^*} \sim \frac{1}{p}$$

Correlações para D_{AB}

Levando em conta as espécies diferentes e atração/repulsão entre as espécies

$$D_{AB} = \frac{0.001858 T^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}}}{p \sigma_{AB}^2 \Omega_D}$$

D_{AB} – coeficiente de difusão (cm^2/s)

T – temperatura absoluta (K)

M_A e M_B – massas molares das espécies A e B (g/mol)

P – pressão absoluta (atm)

σ_{AB} – diâmetro de colisão do par binário A e B ($\text{\AA}$) um parâmetro de Lennard-Jones

Ω_D - “integral de colisão” para difusão molecular, normalmente é tabulado em função de

kT/ϵ_{AB} - temperatura adimensional

k – constante de Boltzmann, 1.38×10^{-16} (erg/K)

ϵ_{AB} – energia de interação molecular (erg)

Correlações para D_{AB}

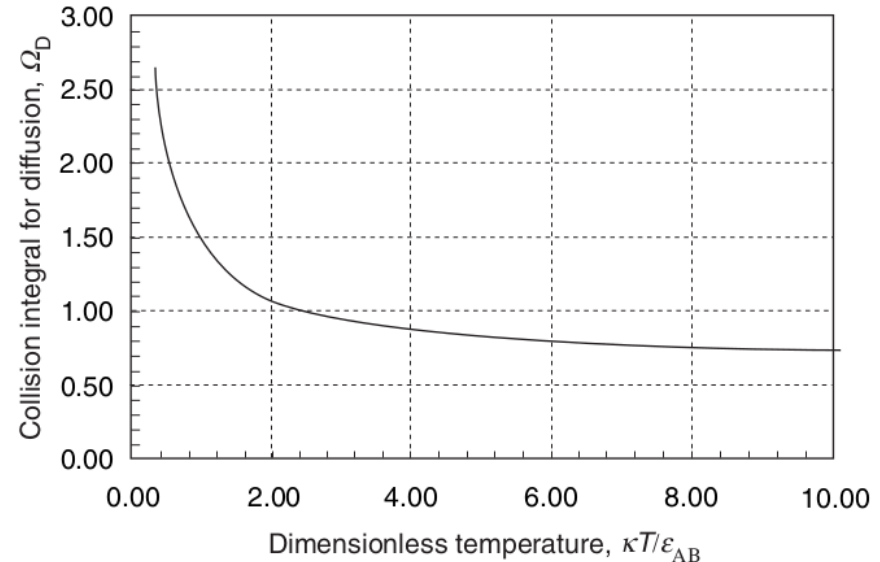
Para um sistema binário composto de moléculas não polares os parâmetros de Lennard-Jones podem ser combinados de modo empírico

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}$$

$$\epsilon_{AB} = \sqrt{\epsilon_A \epsilon_B}$$

Para pressões abaixo de 25 atm e qualquer temperatura o coeficiente de difusão pode ser extrapolado

$$D_{AB_{T_2, P_1}} = D_{AB_{T_1, P_1}} \left(\frac{P_1}{P_2} \right) \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{3/2} \frac{\Omega_D|_{T_1}}{\Omega_D|_{T_2}}$$



“Integral de colisão”

Problema

Avalie o coeficiente de difusão do dióxido de carbono no ar a 20 C e pressão atmosférica. Compare este valor com o valor experimental tabelado.

$$D_{AB} = \frac{0.001858 T^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}}}{p \sigma_{AB}^2 \Omega_D}$$

$$T = 273 + 20 = 293 \text{ K} \quad p = 1 \text{ atm}$$

$$M_{CO_2} = 44$$

$$M_{air} = 29$$

$$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}$$

$$\epsilon_{AB} = \sqrt{\epsilon_A \epsilon_B}$$

Table K.2 Lennard–Jones force constants calculated from viscosity data[†]

Compound	Formula	ϵ_A/κ , in (K)	σ , in Å
Acetylene	C ₂ H ₂	185	4.221
Air	$\sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2} = \frac{3.996 + 3.617}{2} = 3.806 \text{ Å}$	97	3.617
Argon		124	3.418
Arsine	AsH ₃	281	4.06
Benzene	$\epsilon_{AB} = \sqrt{\epsilon_A \epsilon_B}$	440	5.270
Bromine		520	4.268
<i>i</i> -Butane	$\frac{\epsilon_{AB}}{kT} = \frac{1}{T} \sqrt{\frac{\epsilon_A}{k} \frac{\epsilon_B}{k}} = \frac{\sqrt{190 \times 97}}{293} = \frac{136}{293} = 0.463$	313	5.341
<i>n</i> -Butane		410	4.997
Carbon dioxide	CO ₂	190	3.996
Carbon disulfide	CS ₂	488	4.438
Carbon monoxide	CO	110	3.590

Table K.1 The collision integrals, Ω_μ and Ω_D based on the Lennard–Jones potential[†]

kT/ϵ	$\Omega_\mu = \Omega_k$ (for viscosity and thermal conductivity)	Ω_D (for mass diffusivity)	kT/ϵ	$\Omega_\mu = \Omega_k$ (for viscosity and thermal conductivity)	Ω_D (for mass diffusivity)
			1.75	1.234	1.128
0.30	2.785	2.662	1.80	1.221	1.116
0.35	2.628	2.476	1.85	1.209	1.105
0.40	2.492	2.318	1.90	1.197	1.094
0.45	2.368	2.184	1.95	1.186	1.084
0.50	2.257	2.066	2.00	1.175	1.075
0.55	2.156	1.966	2.10	1.156	1.057
0.60	2.065	1.877	2.20	1.138	1.041
0.65	1.982	1.798	2.30	1.122	1.026

$$\frac{kT}{\epsilon_{AB}} = 2.16$$

$$\Omega_D = \frac{1.041 - 1.057}{2.2 - 2.1} (2.16 - 2.1) = 1.047$$

$$D_{AB} = \frac{0.001858 T^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}}}{p \sigma_{AB}^2 \Omega_D} = \frac{0.001858 \times 293^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{1}{44} + \frac{1}{29}}}{1 \times 3.806^2 \times 1.047} = 0.147 \text{ cm}^2/\text{s}$$

Comparação dos resultados

System	T (K)	$D_{AB}P(\text{cm}^2 \text{ atm/s})$	$D_{AB}P(\text{m}^2 \text{ Pa/s})$
Air			
Ammonia	273	0.198	2.006
Aniline	298	0.0726	0.735
Benzene	298	0.0962	0.974
Bromine	293	0.091	0.923
Carbon dioxide	273	0.136	$D_{AB}=0.147 \text{ cm}^2/\text{s}$
Carbon disulfide	273	0.0883	
Chlorine	273	0.124	1.256
Diphenyl	491	0.160	1.621

Precisamos corrigir valor para 20°C

Correção dados tabeladas para temperatura de 20 °C

$$D_{AB_{T_2, P_1}} = D_{AB_{T_1, P_1}} \left(\frac{P_1}{P_2} \right) \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{3/2} \frac{\Omega_{D|T_1}}{\Omega_{D|T_2}}$$

$$p_1 = p_2 = 1 \text{ atm} \quad T_1 = 293 \text{ K} \quad T_2 = 273 \text{ K}$$

Para $T_1 = 293 \text{ K}$ calculamos

$$\Omega_D = 1.047$$

Para $T_1 = 273 \text{ K}$ $\frac{\epsilon_{AB}}{kT} = \frac{136}{273} = 0.498$

$$\Omega_D = 1.074$$

$$D_{AB, T_1} = 0.136 \left(\frac{1}{1} \right) \left(\frac{293}{273} \right)^{3/2} \left(\frac{1.074}{1.047} \right) = 0.155 \text{ cm}^2/\text{s}$$

Compare com calculados 0.147

Condições de contorno: concentração



Concentração na superfície pode ser especificada por

- concentração molar, c_{As}
- concentração mássica, ρ_{As}
- fração molar do gás, y_{As}
- fração molar do líquido, x_{As}
- etc.

Condições de contorno: concentração

Caso uma fase é o componente puro.

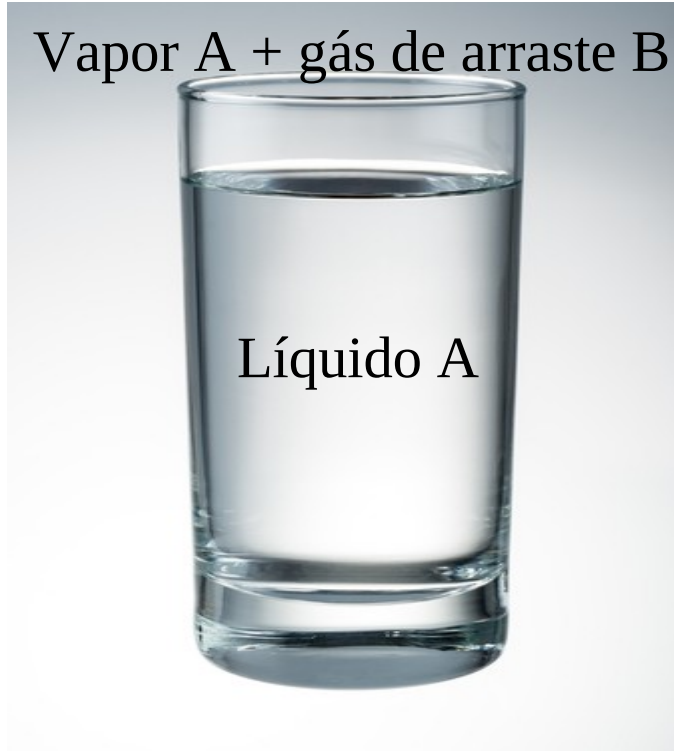
Concentração está nas condições de equilíbrio termodinâmico (saturação)

$$p_{As} = P_A$$

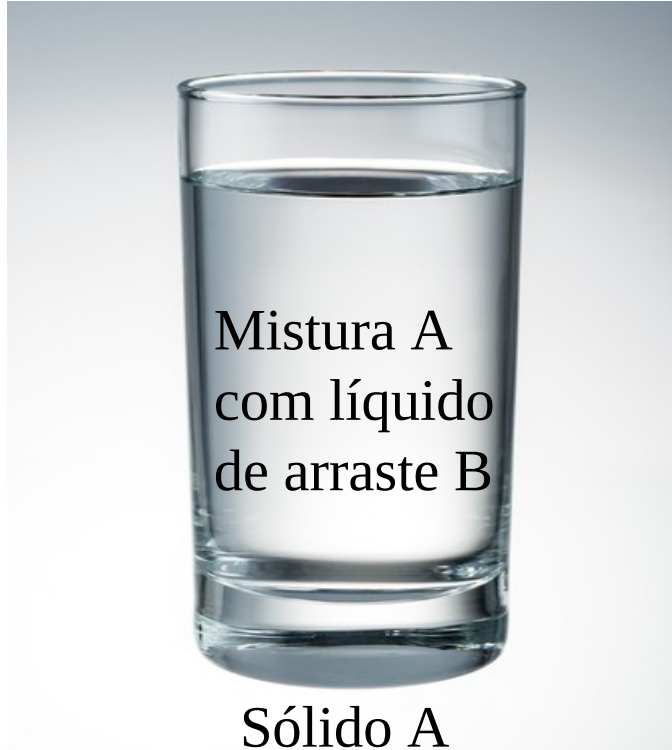
Mistura gasosa em contato com líquido puro volátil

p_{As} - Pressão parcial de A

P_A - Pressão de saturação



Condições de contorno: concentração



Caso uma fase é o componente puro.

Concentração está nas condições de equilíbrio termodinâmico (saturação)

$$p_{As} = P_A$$

Mistura gasosa em contato com líquido puro volátil

p_{As} - Pressão parcial de A

P_A - Pressão de saturação

Mistura líquida em contato com sólido puro

$$c_{As} = c_A^*$$

c_{As} - concentração da espécie A

c_A^* - solubilidade de A no líquido

Condições de contorno: concentração

Caso uma espécie está presente em ambas fases.

1. Gás se difunde no líquido (mistura). Lei de Raoult

$$p_{As} = x_A P_A$$

p_{As} - Pressão parcial de A no gás

P_A - Pressão de vapor da espécie A na $T_{superfície}$

x_A - fração molar do A no líquido/sólido

A fração molar (ou concentração) na superfície

$$y_{As} = \frac{p_{As}}{P} \quad \text{ou} \quad c_{As} = \frac{p_{As}}{RT}$$

2. Para soluções em que A ligeiramente solúvel na fase líquida (lei de Henry)

$$p_A = H x_A \quad H - \text{Constante de Henry}$$

3. Para caso interface gás - sólido

$$c_A = S p_A \quad S - \text{Constante de solubilidade}$$

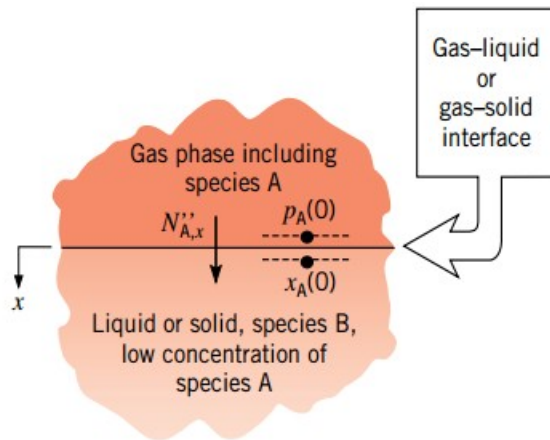


TABLE A.9 Henry's Constant for Selected Gases in Water at Moderate Pressure^a

$H = p_{A,i}/x_{A,i}$ (bars)								
T (K)	NH ₃	Cl ₂	H ₂ S	SO ₂	CO ₂	CH ₄	O ₂	H ₂
273	21	265	260	165	710	22,880	25,500	58,000
280	23	365	335	210	960	27,800	30,500	61,500
290	26	480	450	315	1300	35,200	37,600	66,500
300	30	615	570	440	1730	42,800	45,700	71,600
310	—	755	700	600	2175	50,000	52,500	76,000
320	—	860	835	800	2650	56,300	56,800	78,600
323	—	890	870	850	2870	58,000	58,000	79,000

Gas	Solid	T (K)	$S = C_{A,i}/p_{A,i}$ (kmol/m ³ ·bar)
O ₂	Rubber	298	3.12×10^{-3}
N ₂	Rubber	298	1.56×10^{-3}
CO ₂	Rubber	298	40.15×10^{-3}
He	SiO ₂	293	0.45×10^{-3}
H ₂	Ni	358	9.01×10^{-3}

Constante de solubilidade

Condições de contorno: reação

1. Fluxo estequiométrico: Reação na superfície



A e B se movem no direção oposta de C. Relação dos fluxos

$$N_A \quad N_B = +2 N_A \quad N_C = -3 N_A$$

2. Taxa finita da reação: Componente A consumida em uma reação de primeiro ordem na superfície $z=0$ (a direção z é oposta à direção do fluxo de A)

$$N_A|_{z=0} = -k_s c_{As} \quad k_s - \text{constante de taxa de reação}$$

3. Velocidade da reação muito alta:

$$c_{As} = 0$$

Condições de contorno: fluxo de espécie

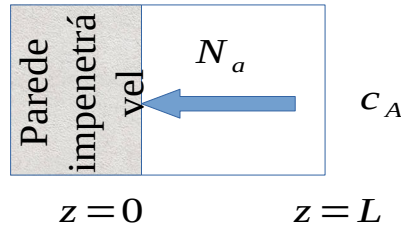
Fluxo constante da espécie A

$$N_a = -D_{AB} \left. \frac{\partial c_A}{\partial z} \right|_{z=0} = \text{const}$$

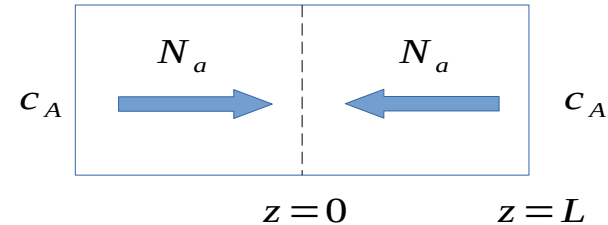
Parede impenetrável ou linha de simetria

$$N_a = -D_{AB} \left. \frac{\partial c_A}{\partial z} \right|_{z=0} = 0$$

$$\left. \frac{\partial c_A}{\partial z} \right|_{z=0} = 0$$



barreira



simetria

Condições de contorno: fluxo convectivo

A taxa de transferência de massa por convecção é definida de modo análogo da lei de Newton

$$N_a = k_c \Delta c_A$$

N_a – transferência de massa em termos molares

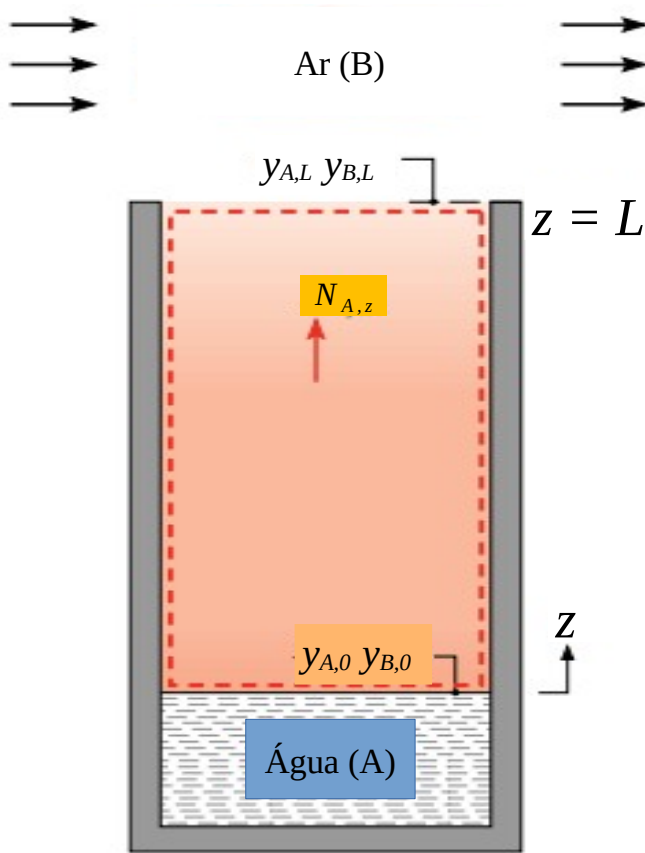
k_c – o coeficiente convectivo

Δc_A – é a diferença entre a concentração na superfície e a concentração média na corrente de fluído

O fluxo convectivo de massa através da camada limite

$$N_A \Big|_{z=0} = k_s (c_{As} - c_{A,\infty})$$

Problema



Um equipamento de laboratório para medir coeficientes de difusão de misturas vapor-gás é constituído por uma coluna vertical, com diâmetro pequeno, na qual há uma fase líquida que evapora para um gás escoando sobre a boca da coluna. A vazão do gás é suficiente para manter uma concentração do vapor desprezível no plano de saída.

A coluna tem $L = 200$ mm de altura, e a pressão e a temperatura na câmara são mantidas a $p = 0,25$ atm e $T = 320$ K.

Calcule a taxa de evaporação esperada ($\text{kg}/(\text{h m}^2)$) em um teste com água e ar sob as condições especificadas acima, usando o valor conhecido de D_{AB} para a mistura “vapor d'água” - “ar”.

TABLE A.6 Thermophysical Properties of Saturated Water^a

Temperature, T (K)	Pressure, p (bars) ^b	Specific Volume (m ³ /kg)		Heat of Vaporization, h_{fg} (kJ/kg)	Specific Heat (kJ/kg · K)		Viscosity (N · s/m ²)		Thermal Conductivity (W/m · K)		Prandtl Number		Surface Tension, $\sigma_f \cdot 10^3$ (N/m)	Expansion Coef- cient, $\beta_f \cdot 10^6$ (K ⁻¹)	Temperature, T (K)
		$v_f \cdot 10^3$	v_g		$c_{p,f}$	$c_{p,g}$	$\mu_f \cdot 10^6$	$\mu_g \cdot 10^6$	$k_f \cdot 10^3$	$k_g \cdot 10^3$	Pr_f	Pr_g			
273.15	0.00611	1.000	206.3	2502	4.217	1.854	1750	8.02	569	18.2	12.99	0.815	75.5	-68.05	273.15
275	0.00697	1.000	181.7	2497	4.211	1.855	1652	8.09	574	18.3	12.22	0.817	75.3	-32.74	275
280	0.00990	1.000	130.4	2485	4.198	1.858	1422	8.29	582	18.6	10.26	0.825	74.8	46.04	280
285	0.01387	1.000	99.4	2473	4.189	1.861	1225	8.49	590	18.9	8.81	0.833	74.3	114.1	285
290	0.01917	1.001	69.7	2461	4.184	1.864	1080	8.69	598	19.3	7.56	0.841	73.7	174.0	290
295	0.02617	1.002	51.94	2449	4.181	1.868	959	8.89	606	19.5	6.62	0.849	72.7	227.5	295
300	0.03531	1.003	39.13	2438	4.179	1.872	855	9.09	613	19.6	5.83	0.857	71.7	276.1	300
305	0.04712	1.005	29.74	2426	4.178	1.877	769	9.29	620	20.1	5.20	0.865	70.9	320.6	305
310	0.06221	1.007	22.93	2414	4.178	1.882	695	9.49	628	20.4	4.62	0.873	70.0	361.9	310
315	0.08132	1.009	17.82	2402	4.179	1.888	631	9.69	634	20.7	4.16	0.883	69.2	400.4	315
320	0.1053	1.011	13.98	2390	4.180	1.895	577	9.89	640	21.0	3.77	0.894	68.3	436.7	320
325	0.1351	1.013	11.06	2378	4.182	1.903	528	10.09	645	21.3	3.42	0.901	67.5	471.2	325
330	0.1719	1.016	8.82	2366	4.184	1.911	489	10.29	650	21.7	3.15	0.908	66.6	504.0	330
335	0.2167	1.018	7.09	2354	4.186	1.920	453	10.49	656	22.0	2.88	0.916	65.8	535.5	335
340	0.2713	1.021	5.74	2342	4.188	1.930	420	10.69	660	22.3	2.66	0.925	64.9	566.0	340

TABLE A.8 Binary Diffusion Coefficients at One Atmosphere^{a,b}

Substance A	Substance B	T (K)	D_{AB} (m ² /s)
Gases			
NH ₃	Air	298	0.28×10^{-4}
H ₂ O	Air	298	0.26×10^{-4}
CO ₂	Air	298	0.16×10^{-4}
H ₂	Air	298	0.41×10^{-4}
O ₂	Air	298	0.21×10^{-4}
Acetone	Air	273	0.11×10^{-4}
Benzene	Air	298	0.88×10^{-5}
Naphthalene	Air	300	0.62×10^{-5}
Ar	N ₂	293	0.19×10^{-4}
H ₂	O ₂	273	0.70×10^{-4}
H ₂	N ₂	273	0.68×10^{-4}
H ₂	CO ₂	273	0.55×10^{-4}
CO ₂	N ₂	293	0.16×10^{-4}
CO ₂	O ₂	273	0.14×10^{-4}
O ₂	N ₂	273	0.18×10^{-4}

A solução $N_A = \frac{c D_{AB}}{L} \ln \frac{1 - y_{A,L}}{1 - y_{A,0}}$ Em kmol/m²s ou converte a formula para fluxo mássico

Da tabela determina D_{AB} e faça a correção do valor para dados T e p , sabendo que

$$D_{AB} \propto \frac{T^{\frac{3}{2}}}{p}$$

Calcula c sabendo p e T

$$c = \frac{n_{total}}{V} = \frac{p}{RT}$$

Determina y_{AL} e y_{A0}