

**DETERMINAÇÃO NUMÉRICA E ANALÍTICA DO PERFIL DE
CONCENTRAÇÃO DE SISTEMAS BINÁRIOS GASOSOS EM
UMA CÉLULA DE LOSCHMIDT**BIAZATTI, Meury Joicy¹; MIRANDA, Júlio Cesar de Carvalho²**RESUMO:**

A difusão é um processo no qual a matéria é transportada de uma parte de um sistema para outra como resultado de movimentos moleculares aleatórios. Um dos métodos mais confiáveis para determinar os fatores de proporcionalidade da difusão para sistemas binários de gases é o método de tubo fechado, no qual se aplica uma célula de Loschmidt que consiste em um tubo vertical fechado, inicialmente separado em duas meias-células preenchidas com dois gases puros diferentes. Quando a difusão começa a composição muda em função do tempo e da posição em toda a célula, até que toda a concentração ao longo do aparato se torne homogênea. As equações que modelam a transferência de massa em conjunto com outros estudos preveem o fluxo através de equipamentos. As compreensões desses fenômenos necessitam de uma investigação cautelosa, que devido ao avanço da tecnologia, vem sendo feita, principalmente, por técnicas computacionais. Objetivos: O presente trabalho objetivou determinar o perfil de concentração, da forma de frações molares, ao longo do comprimento, em tempos parametrizados para sistemas binários diferentes, e estipular o tempo necessário para tornar a mistura homogênea. Para tanto, a 2ª lei de Fick foi resolvida numericamente e analiticamente, e os resultados foram comparados. Método: As condições de contorno adotadas foram classificadas como condições de Neumann, onde as fronteiras da célula são impermeáveis. Os perfis de concentração numérico (obtido pela metodologia de Crank Nicolson) e analítico (resolvido pela separação de variáveis) foram determinados utilizando-se do Software Scilab. O algoritmo criado recebe como *input* todas as variáveis envolvidas nas análises: tempo de simulação, passo de tempo, comprimento da célula, número de pontos e as substâncias envolvidas. Com esse programa, foi possível prever o comportamento de mais de 50 sistemas binários gasosos de difusão. Fixaram-se dados de *input* para 3 sistemas binários (nitrogênio e hidrogênio, monóxido de carbono e oxigênio, ar e anilina). Determinou-se o tempo necessário para que a mistura gasosa se tornasse homogênea, e os gráficos bidimensionais dos valores encontrados foram parametrizados em 5 tempos. Resultados: Os tempos de convergência para a completa mistura dos pares binários foram maiores quando obtidos pela solução numérica para todos os casos. As inclinações das curvas ao longo do tempo dos gráficos plotados são relacionadas com o gradiente de concentração local devido a dependência da concentração com o coeficiente de difusão. O método analítico resultou em soluções que se mantiveram constantes para todos os valores testados, reafirmando que o método de Crank Nicolson é incondicionalmente estável. Conclusão ou considerações finais: Alguns fatores podem interferir diretamente no perfil de concentração numa célula de Loschmidt, como a diferença inicial de pressão entre os gases na câmara superior e inferior, e o gradiente de temperatura e a sua consequente interferência na difusividade das espécies. O método numérico adotado pode conter também oscilações pequenas dependendo da escolha das condições de fronteiras. Além disso, a solução analítica necessita de mais ajustes para se encaixar a um padrão pré-estabelecido, e também está sujeita a um erro de truncamento.

Palavras-chave: Análise analítica; Análise numérica; Células de Loschmidt; Difusividade; Simulação.

¹ Universidade Federal de Mato Grosso, Graduanda de Engenharia química, meuryjoicy@gmail.com

² Universidade Federal de Mato Grosso, Engenheiro Químico, juliomiranda@ufmt.br