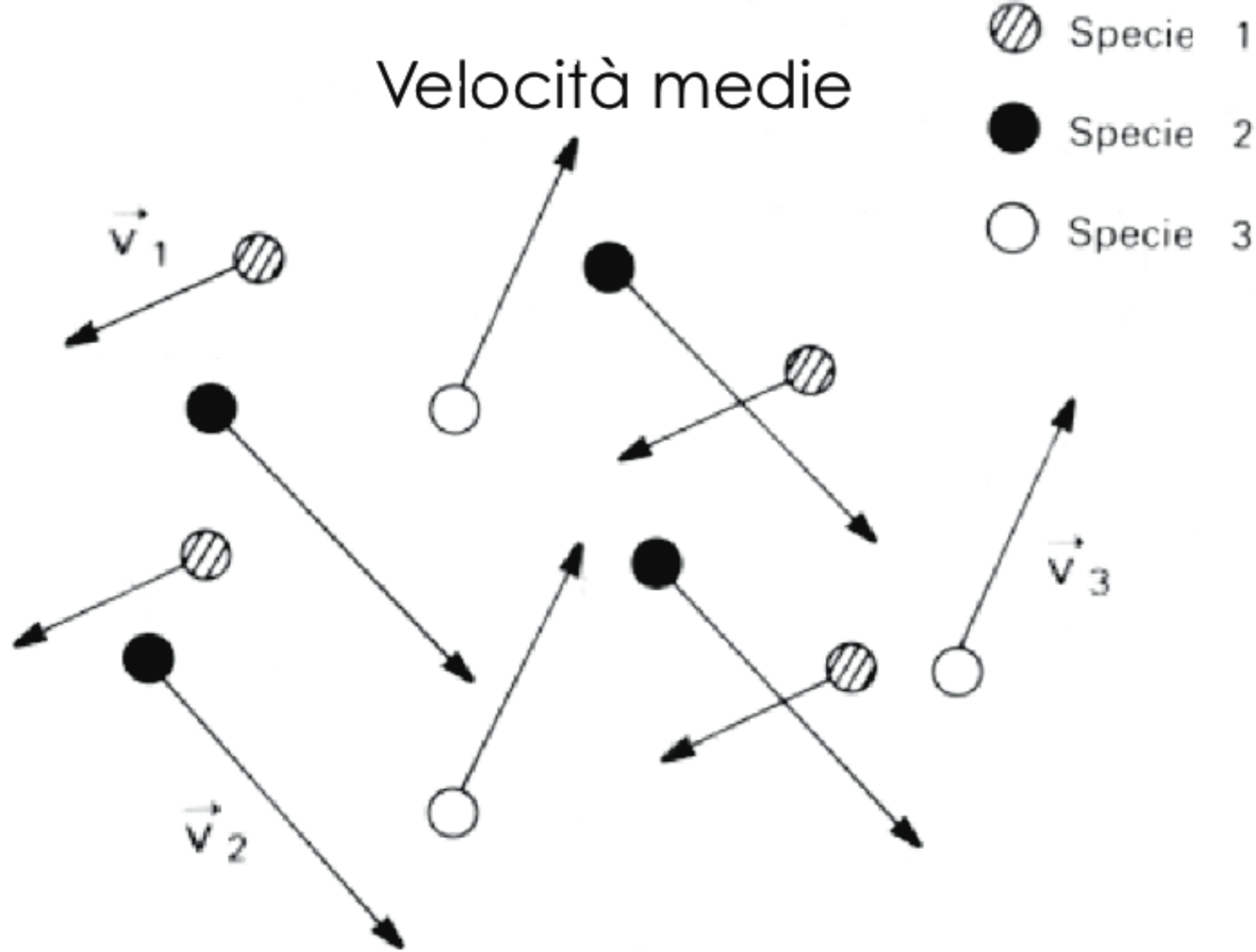
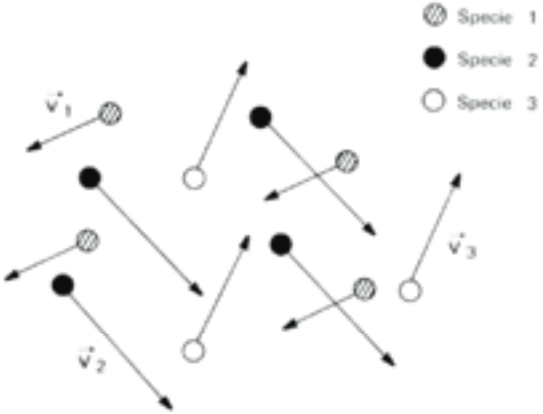
Le equazioni costitutive e di bilancio nel trasporto di materia

Fenomeni di Trasporto

Velocità medie





Velocità medie

Velocità media massica

$$\mathbf{v} = \frac{\sum_{\alpha=1}^{N} \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha}{\sum_{\alpha=1}^{N} \rho_\alpha} = \frac{\sum_{\alpha=1}^{N} \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha}{\rho} = \sum_{\alpha=1}^{N} \omega_\alpha \mathbf{v}_\alpha$$

Velocità media molare

$$\mathbf{v}^* = \frac{\sum_{\alpha=1}^{N} c_\alpha \mathbf{v}_\alpha}{\sum_{\alpha=1}^{N} c_\alpha} = \frac{\sum_{\alpha=1}^{N} c_\alpha \mathbf{v}_\alpha}{c} = \sum_{\alpha=1}^{N} x_\alpha \mathbf{v}_\alpha$$

Il flusso convettivo

In unità di massa $$\rho_\alpha \boldsymbol{\delta}_x v_x + \rho_\alpha \boldsymbol{\delta}_y v_y + \rho_\alpha \boldsymbol{\delta}_z v_z = \rho_\alpha \mathbf{v}$$

In unità di moli $$c_\alpha \boldsymbol{\delta}_x v_x^* + c_\alpha \boldsymbol{\delta}_y v_y^* + c_\alpha \boldsymbol{\delta}_z v_z^* = c_\alpha \mathbf{v}^*$$

Il flusso diffusivo
miscele binarie

In unità di massa $$\mathbf{j}_A = \rho_A(\mathbf{v}_A - \mathbf{v}) = -\rho\mathscr{D}_{AB}\nabla\omega_A$$

In unità di moli $$\mathbf{J}_A^* = c_A(\mathbf{v}_A - \mathbf{v}^*) = -c\mathscr{D}_{AB}\nabla x_A$$

Oss.: $$\sum_{\alpha=1}^{N} \mathbf{j}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N} \mathbf{J}_\alpha^* = 0$$

Il flusso complessivo

In unità di massa $$\mathbf{n}_\alpha = \mathbf{j}_\alpha + \rho_\alpha \mathbf{v}$$

Oss.: $$\mathbf{j}_\alpha = \mathbf{n}_\alpha - \omega_\alpha \sum_{\beta=1}^{N} \mathbf{n}_\beta$$

Parte diffusiva

Parte convettiva

In unità di moli $$\mathbf{N}_\alpha = \mathbf{J}^*_\alpha + c_\alpha \mathbf{v}^*$$

Oss.: $$\mathbf{J}^*_\alpha = \mathbf{N}_\alpha - x_A \sum_{\beta=1}^{N} \mathbf{N}_\beta$$

L'equazione di bilancio per le specie chimiche

In unità di massa

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} = -(\nabla \cdot \mathbf{n}_\alpha) + r_\alpha \qquad \alpha = 1, 2, 3, \ldots, N$$

$$\left\{\begin{array}{c}\text{Accumulo della}\\ \text{specie } \alpha \text{ per unità}\\ \text{di volume}\end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{c}\text{Flusso netto sia}\\ \text{per moto}\\ \text{convettivo che}\\ \text{diffusivo}\end{array}\right\} + \left\{\begin{array}{c}\text{Velocità di}\\ \text{generazione della}\\ \text{specie } \alpha \text{ per unità}\\ \text{di volume}\end{array}\right\}$$

$$\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} = -(\nabla \cdot \mathbf{N}_\alpha) + R_\alpha \qquad \alpha = 1, 2, 3, \ldots, N$$

In unità di moli

L'equazione di bilancio per le specie chimiche

In unità di massa

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho_\alpha \mathrm{v}) - (\nabla \cdot \mathrm{j}_\alpha) + r_\alpha \qquad \alpha = 1, 2, 3, \ldots, N$$

$$\left\{\begin{array}{c}\text{Accumulo}\\ \text{della specie } \alpha\\ \text{per unità di}\\ \text{volume}\end{array}\right\} = \left\{\begin{array}{c}\text{Flusso}\\ \text{netto per}\\ \text{moto}\\ \text{convettivo}\end{array}\right\} + \left\{\begin{array}{c}\text{Flusso}\\ \text{netto per}\\ \text{moto}\\ \text{diffusivo}\end{array}\right\} + \left\{\begin{array}{c}\text{Velocità di}\\ \text{generazione della}\\ \text{specie } \alpha \text{ per unità}\\ \text{di volume}\end{array}\right\}$$

$$\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} = -(\nabla \cdot c_\alpha \mathrm{v}^*) - (\nabla \cdot \mathrm{J}_\alpha^*) + R_\alpha \qquad \alpha = 1, 2, 3, \ldots, N$$

In unità di moli

L'equazione di bilancio per le specie chimiche

In unità di massa

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho_\alpha \mathbf{v}) - (\nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha) + r_\alpha \qquad \alpha = 1, 2, 3, \ldots, N$$

Sommando su tutte le specie chimiche

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho \mathbf{v})$$

L'equazione di bilancio per le specie chimiche

In unità di moli

$$\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} = -(\nabla \cdot c_\alpha \mathbf{v}^*) - (\nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha^*) + R_\alpha \qquad \alpha = 1, 2, 3, \ldots, N$$

Sommando su tutte le specie chimiche

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -(\nabla \cdot c\mathbf{v}^*) + \sum_{\alpha=1}^{N} R_\alpha$$

Oss.: il termine di generazione non scompare perché in generale le moli non si conservano

L'equazione di bilancio per le specie chimiche: Casi particolari

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho_\alpha \mathbf{v}) - (\nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha) + r_\alpha \qquad \mathbf{j}_A = -\rho \mathscr{D}_{AB} \nabla \omega_A$$

Miscela binaria con $\rho\mathscr{D}_{AB}$ costante

$$\rho \frac{D\omega_A}{Dt} = \rho\left(\frac{\partial \omega_A}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla \omega_A)\right) = \rho \mathscr{D}_{AB} \nabla^2 \omega_A + r_A$$

Si applica solitamente nel caso di **miscele liquide**, per cui le proprietà dei singoli componenti non sono molto diverse fra loro

L'equazione di bilancio per le specie chimiche: Casi particolari

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho_\alpha \mathbf{v}) - (\nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha) + r_\alpha \qquad \mathbf{j}_A = -\rho \mathcal{D}_{AB} \nabla \omega_A$$

Miscela binaria con ρ e $\mathcal{D}_{AB}$ costanti

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla c_A) = \mathcal{D}_{AB} \nabla^2 c_A + \frac{r_A}{M_A}$$

L'equazione di bilancio per le specie chimiche: Casi particolari

$$\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} = -(\nabla \cdot c_\alpha \mathbf{v}^*) - (\nabla \cdot \mathbf{J}_\alpha^*) + R_\alpha \qquad \mathbf{J}_A^* = -c\mathscr{D}_{AB}\nabla x_A$$

Miscela binaria con $c\mathscr{D}_{AB}$ costante

$$c\left(\frac{\partial x_A}{\partial t} + (\mathbf{v}^* \cdot \nabla x_A)\right) = c\mathscr{D}_{AB}\nabla^2 x_A + (x_B R_A - x_A R_B)$$

Si applica solitamente nel caso di **miscele gassose**, per cui (nell'approssimazione di gas ideale) $c=P/RT$, o per **sistemi diluiti**

Oss.: x_A non è una grandezza definita per unità di massa.
L'equazione generale di bilancio non è utilizzabile.

L'equazione di bilancio per le specie chimiche

Forma adimensionale

Per proprietà costanti:

$$\frac{Dc_A}{Dt} = \mathcal{D}_{AB}\nabla^2 c_A - k_n c_A^n$$

La velocità di scomparsa di A è stata scritta con una reazione di ordine n

L'equazione di bilancio per le specie chimiche

Variabili adimensionali

$$\check{x} = \frac{x}{l_0} \qquad \check{y} = \frac{y}{l_0} \qquad \check{z} = \frac{z}{l_0} \qquad \check{t} = \frac{v_0 t}{l_0}$$

$$\check{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}}{v_0} \qquad \check{\nabla} = l_0 \nabla \qquad \frac{D}{D\check{t}} = \left(\frac{l_0}{v_0}\right)\frac{D}{Dt}$$

$$\check{c}_A = \frac{c_A}{c_{A0}}$$

L'equazione di bilancio per le specie chimiche

Forma adimensionale

$$\frac{D\breve{c}_A}{D\breve{t}} = \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\breve{\nabla}^2\breve{c}_A - \mathrm{Da}^{\mathrm{I}}\,\breve{c}_A^{\mathrm{n}}$$

$$\mathrm{Sc} = \left[\!\left[\frac{\mu}{\rho\mathcal{D}_{AB}}\right]\!\right] = \left[\!\left[\frac{\nu}{\mathcal{D}_{AB}}\right]\!\right] = \text{Schmidt number}$$

$$\mathrm{Da}^{\mathrm{I}} = \left[\!\left[\frac{l_0 k_{\mathrm{n}} c_{A0}^{\mathrm{n-1}}}{v_0}\right]\!\right] = \textit{first Damköhler number}$$

L'equazione di bilancio per le specie chimiche

Forma adimensionale

Se si considera la diffusione in solidi: $v_0 = \dfrac{\mathscr{D}_{AB}}{l_0}$

$$\frac{\partial \breve{c}_A}{\partial \breve{t}} = \frac{1}{\mathrm{ReSc}} \breve{\nabla}^2 \breve{c}_A - \mathrm{Da}^{\mathrm{II}} \breve{c}_A^{\mathrm{n}}$$

$$\mathrm{Da}^{\mathrm{II}} = \left[\!\left[\frac{l_0^2 k_{\mathrm{n}} c_{A0}^{\mathrm{n-1}}}{\mathscr{D}_{AB}} \right]\!\right] = \textit{second Damköhler number}$$

$$\phi = \sqrt{\mathrm{Da}^{\mathrm{II}}} = \textit{Thiele modulus}$$

Confronto fra le equazioni di bilancio

q. di moto

$$\frac{D\breve{\mathbf{v}}}{D\breve{t}} = \frac{1}{\mathrm{Re}}\breve{\nabla}^2\breve{\mathbf{v}} - \breve{\nabla}\breve{\mathcal{P}}$$

energia

$$\frac{D\breve{T}}{D\breve{t}} = \frac{1}{\mathrm{RePr}}\breve{\nabla}^2\breve{T} + \frac{\mathrm{Br}}{\mathrm{RePr}}\Phi_v$$

specie chimiche

$$\frac{D\breve{c}_A}{D\breve{t}} = \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\breve{\nabla}^2\breve{c}_A - \mathrm{Da}^{\mathrm{I}}\,\breve{c}_A^{\,n}$$

Accumulo più termini convettivi

Trasporto diffusivo o *molecolare*

Generazione