

Teoria de misturas de meios contínuos.

Martina Costa Reis ^{1,*} (PG) e Adalberto Bono Maurizio Sacchi Bassi ¹ (PQ).

¹ Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química, Departamento de Físico-Química, Grupo Teoria Temporal do Calor.

* marreis@iqm.unicamp.br

Palavras Chave: Teoria de misturas, Difusão, Meios Contínuos.

Introdução

A base conceitual empregada pela termodinâmica dos meios contínuos para o tratamento teórico de misturas advém dos trabalhos de Stefan e Fick sobre difusão de espécies. Ambos consideraram que cada ponto espacial da mistura é simultaneamente ocupado pelas partículas de todos os constituintes. Tal consideração evidentemente não é fisicamente correta, porém Truesdell demonstrou que, a partir dela, é possível derivar uma teoria de misturas dos meios contínuos matematicamente coerente.^{1,2}

Neste trabalho, os aspectos mais relevantes da teoria clássica de misturas dos meios contínuos são apresentados. O objetivo do trabalho é expor um enfoque alternativo ao enfoque estatístico para o estudo das propriedades termodinâmicas de soluções.

Resultados e Discussão

Seja S uma mistura de n constituintes, $S^a = 1, \dots, n$. Considerando a cinemática dos constituintes, postula-se que: (i) as equações de movimento $\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^a(\mathbf{X}^a, t)$ de cada constituinte são funções suaves, (ii) todas as propriedades da mistura são consequências matemáticas das propriedades dos constituintes e (iii) o movimento da mistura é governado pelas mesmas equações que governam o movimento de um único corpo.²

O primeiro postulado implica em que todos os constituintes da mistura estão sempre presentes em qualquer ponto da configuração corrente. O segundo e terceiro postulados asseguram que os balanços de massa, momentos linear e angular, energia e entropia são válidos para os constituintes individuais. A única diferença que existe entre estes balanços e aqueles para um único corpo material é que as leis de balanço para os constituintes individuais não são conservadas, ou seja, apenas suas somas, referentes ao todo, são consideradas iguais às de um único corpo material. Logo, as somas dos termos de produção de massa, momentos linear e angular e energia são iguais a zero.

Então, desde que a mistura é interpretada como um único corpo em movimento, a velocidade de

difusão, \mathbf{u}^a , de cada constituinte deve ser usada nas expressões para tensor de Cauchy, T , força de corpo, \mathbf{b} , densidade de energia interna, ε , vetor fluxo de energia, \mathbf{h} e suprimento de energia, \mathbf{s} , a saber,

$$T = T_1 - \sum \rho^a \mathbf{u}^a \otimes \mathbf{u}^a, \quad (1)$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_1, \quad (2)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + 1/2 \sum C^a (\mathbf{u}^a)^2, \quad (3)$$

$$\mathbf{h} = \mathbf{h}_1 + \sum [\rho^a (\varepsilon^a + 1/2 (\mathbf{u}^a)^2 \mathbf{u}^a - (T^a)^T \mathbf{u}^a)] \quad \text{e} \quad (4)$$

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}_1 + \sum C^a \mathbf{b}^a \cdot \mathbf{u}^a, \quad (5)$$

onde as quantidades com subíndice denotam partes internas, enquanto que ρ^a e C^a respectivamente são a densidade e a concentração do constituinte.

As Equações 4 e 5 indicam que o vetor fluxo de energia e o suprimento de energia não podem ser interpretados, respectivamente, apenas como vetor fluxo de calor e suprimento de calor, devido à presença de termos associados ao movimento difusivo dos constituintes. Consequentemente, a desigualdade de Clausius-Duhem^{1,2} é inapropriada para o estudo de misturas, de modo que outras teorias constitutivas devem ser desenvolvidas.

Conclusões

Neste trabalho, os postulados da teoria de misturas dos meios contínuos foram apresentados. Além disso, foi enfatizada a relação do movimento difusivo das espécies com a desigualdade de Clausius-Duhem. Esta teoria pode ser relevante para o estudo de soluções, especialmente de soluções eletrolíticas, onde o tratamento estatístico fornece resultados limitados. Resultados numéricos serão divulgados em breve.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq pelo apoio financeiro concedido.

¹ Atkin, R.J. e Craine, R.E. *Q.J.Mech. Appl.Math.* 1976, 29, 209.

² Truesdell, C.A. *Rational Thermodynamics*, Springer: New York, 1984.