



SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE CORANTES EM SOLUÇÕES AQUOSAS UTILIZANDO COMSOL MULTIPHYSICS

Amanda Tamiris Monteiro Santos¹
Felipe Fortes Pinheiro²
Érickson Alex de Lima³
Marco Antonio Cardoso de Souza⁴

Resumo: Este estudo busca a compreensão sobre o comportamento da difusão de uma gota de tinta em um recipiente com água, através dos conceitos de transferência de massa. Por meio de uma simulação realizada no software COMSOL *Multiphysics*, foi possível observar como a tinta se dispersa ao longo do tempo. Utilizando o módulo "Transferência de Massa" em um modelo tridimensional, representou-se um recipiente contendo água e, no centro, uma gota de tinta mais concentrada. Durante a simulação, ficou evidente o movimento do soluto das regiões de maior concentração para as de menor, ilustrando na prática a Lei de Fick. A tinta se distribuiu de maneira homogênea, simulando a importância da difusividade. A modelagem evidenciou a utilidade da simulação para visualização do transporte de massa e a compreensão teórica da difusividade.

Palavras-chave: Difusão; Transferência de Massa; COMSOL; Simulação 3D; Tinta.

Abstract: This study seeks to understand the behavior of the diffusion of an ink drop in a container with water, through the concepts of mass transfer. Through a simulation carried out in the COMSOL Multiphysics software, it was possible to observe how the paint disperses over time. Using the "Mass Transfer" module in a three-dimensional model, a container containing water was represented and, in the center, a drop of more concentrated paint. During the simulation, the movement of the solute from the regions of higher concentration to those of lower concentration was evident, illustrating in practice Fick's Law. The paint was distributed homogeneously, simulating the importance of diffusivity. The modeling evidenced the usefulness of simulation for visualization of mass transport and the theoretical understanding of diffusivity.

Keywords: Diffusion; Mass Transfer; COMSOL; 3D simulation; Ink.

¹ Graduando do curso de Engenharia Química, pela UNIFATEB, campus Telêmaco Borba – e-mail: amandamonteiro34@gmail.com.

² Graduando do curso de Engenharia Química, pela UNIFATEB, campus Telêmaco Borba – e-mail: felipe.fortespinoheiro@gmail.com.

³ Professor do curso de Engenharia Química, pela UNIFATEB, campus Telêmaco Borba – e-mail: erickson.lima@unifateb.edu.br.

⁴ Professor do curso de Engenharia Química, pela UNIFATEB, campus Telêmaco Borba – e-mail: marco.souza@unifateb.edu.br.



EPIC 2025

XII ENCONTRO DE PESQUISA, XVI ENCONTRO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E
II ENCONTRO DE ENSINO E EXTENSÃO UNIVERSITÁRIA



1. INTRODUÇÃO

Na engenharia, a compreensão dos fenômenos de transporte é fundamental para analisar sistemas que envolvem fluidos, soluções e materiais em movimento. Dentre esses fenômenos, a transferência de massa assume papel central, sendo responsável pelo movimento de espécies químicas impulsionado por diferenças de concentração, que constituem sua força motriz (CREMASCO, 2016). Um exemplo clássico desse processo é a difusão, ilustrada pela dispersão de uma gota de tinta em água, na qual as moléculas se espalham até que o equilíbrio de concentrações seja atingido (GEANKOPLIS, 2003).

Segundo Lima et al (2024), utilização de softwares, como o COMSOL *Multiphysics*®, permite a integração entre a teoria e a prática, oferecendo uma ferramenta de visualização e aplicar conceitos complexos de transferência de massa, calor e fluidos. Na indústria, essa capacidade de modelar e simular processos como a difusão de um corante em um líquido permite a otimização de projetos, a redução de custos e o aumento da segurança, explorando processos mais dinâmicos e tecnológicos.

Este trabalho tem como objetivo estudar a dinâmica da transferência de massa exclusivamente por difusão, analisando de forma visual e qualitativa como ocorre a dispersão de um corante em meio líquido. A escolha do tema se justifica pela clareza com que o fenômeno permite compreender conceitos fundamentais da engenharia e pela relevância de explorar ferramentas computacionais aplicadas à modelagem e simulação, como o COMSOL *Multiphysics* (WELTY et al., 2017; CAMPOS, 2010; PERRY; GREEN, 2008).

2. DESENVOLVIMENTO

2.1 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA



2.1.1 Conceitos Gerais de Transferência de Massa

A transferência de massa é um dos pilares dos fenômenos de transporte, ao lado da transferência de calor e da mecânica dos fluidos. Este fenômeno descreve o movimento de uma ou mais espécies químicas de uma região para outra, impulsionado principalmente por gradientes de concentração. O mecanismo mais comum, e também o mais estudado, é a difusão molecular, cuja descrição clássica está baseada na Lei de Fick (CREMASCO, 2016).

2.1.2 Lei de Fick

A Primeira Lei de Fick estabelece que o fluxo de massa é proporcional ao gradiente de concentração da espécie em questão. Esse fluxo ocorre de regiões com maior concentração para aquelas com menor concentração, sendo o coeficiente de difusão a constante de proporcionalidade que reflete as propriedades do soluto, do solvente e da temperatura do sistema. Já a Segunda Lei de Fick, por sua vez, trata da variação temporal desse fluxo, descrevendo como a concentração muda com o tempo em um dado ponto do meio (CREMASCO, 2016).

2.1.3 Importância da Difusão

A difusão está presente em processos industriais de separação, como absorção, adsorção, extração e secagem, assim como em fenômenos naturais, como o transporte de oxigênio nos pulmões ou a dispersão de poluentes em corpos d'água. Além disso, é fundamental para tecnologias como sensores químicos, sistemas de liberação controlada de fármacos e processos biotecnológicos (GEANKOPLIS, 2003).

2.1.4 Aplicações na Engenharia Química

Na prática da engenharia química, entender e prever a transferência de massa é essencial para o dimensionamento de equipamentos e a otimização de processos. Para isso, são amplamente utilizadas ferramentas de modelagem e simulação numérica, como o software COMSOL Multiphysics, que permite resolver



equações diferenciais parciais associadas a fenômenos de transporte em domínios bidimensionais e tridimensionais (WELTY et al., 2017).

2.1.5 Uso do COMSOL na Simulação da Difusão

A utilização de softwares como o COMSOL oferece ao estudante a oportunidade de explorar diferentes condições de contorno, propriedades físico-químicas e geometrias, favorecendo o entendimento aprofundado das variáveis que afetam o transporte de massa. Isso reforça não apenas o domínio do conteúdo teórico, mas também o desenvolvimento de competências práticas, valorizadas no ambiente profissional da engenharia (PERRY; GREEN, 2008).

2.1.6 Limitações e Extensões do Estudo

É importante destacar que a difusão molecular é apenas um dos mecanismos possíveis de transporte de massa. Em situações mais complexas, pode ocorrer a combinação com convecção (transporte por movimento do fluido) ou reação química simultânea, o que exige uma abordagem multifísica mais robusta. No entanto, ao isolar o fenômeno da difusão, como neste estudo, é possível compreendê-lo com mais clareza, servindo como base sólida para aplicações futuras mais complexas.

2.2 METODOLOGIA

O modelo computacional foi desenvolvido em um domínio tridimensional para simular o processo de difusão de massa. O fenômeno de transporte foi regido pela Equação de Fick, que descreve o fluxo de matéria de uma região de maior para uma de menor concentração. A seleção do módulo de Transporte de Espécies Diluídas (*Transport of Diluted Species*) no software COMSOL *Multiphysics*® (versão 5.3) foi baseada em sua capacidade de solucionar equações de transporte acopladas, garantindo a representação precisa da dispersão da tinta na água. O domínio de estudo consistiu em um volume cúbico preenchido com água, com uma fonte de alta concentração de tinta, modelada como uma geometria esférica, posicionada em seu centro.



2.2.1. Condições de Contorno Iniciais

A simulação foi configurada com condições iniciais que refletem o estado do sistema no tempo zero ($t=0$). A concentração inicial da tinta foi definida como zero em todo o volume cúbico, exceto na região da gota, onde uma concentração uniforme e elevada foi atribuída. As condições de contorno foram estabelecidas para simular um sistema isolado. As paredes do recipiente foram modeladas com uma condição de fluxo de massa nulo (*zero-flux boundary condition*), o que impede qualquer movimento de massa através das fronteiras do domínio. Esta abordagem garante que a quantidade total de massa de tinta no sistema permaneça constante ao longo de toda a simulação.

2.2.2. Estratégia de Malha e Refinamento

A acurácia da solução numérica foi assegurada pelo emprego de uma estratégia de malha adaptativa. O domínio computacional foi discretizado em uma malha de elementos finitos. Para capturar com fidelidade os gradientes de concentração abruptos na interface entre a gota de tinta e a água, a malha foi significativamente refinada na região da gota. Esse refinamento localizado, sem comprometer a eficiência computacional, permitiu a resolução precisa da dinâmica inicial do transporte de massa, sendo um fator crítico para a robustez e validade dos resultados obtidos.

2.2.3. Análise de Resultados

O problema foi solucionado como um estudo dependente do tempo (*time-dependent study*), permitindo a observação da evolução temporal da distribuição de concentração da tinta. Os passos de integração temporal foram configurados de forma a garantir a estabilidade numérica e a captura de todas as escalas de tempo relevantes do processo de difusão. Após a conclusão da simulação, os resultados foram submetidos a um processo de pós-processamento. A visualização dos dados foi realizada por meio de mapas de concentração e animações, que ilustraram a dispersão da tinta. A análise qualitativa da concentração em diferentes pontos e ao

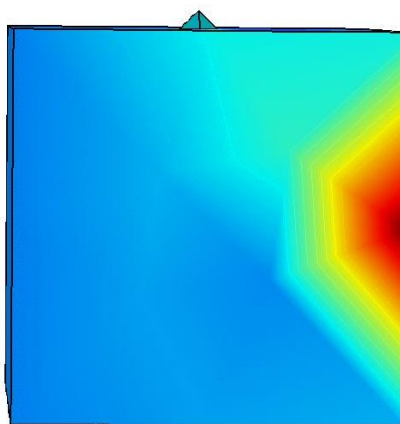


longo de perfis espaciais validou a dispersão da massa de acordo com as leis da difusão.

2.3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A simulação computacional realizada permitiu visualizar, de forma clara e progressiva, como ocorre a difusão da tinta em meio líquido ao longo do tempo. Inicialmente, observou-se um gradiente de concentração acentuado ao redor da gota inserida no centro do domínio tridimensional (Imagem 01). Esse gradiente provocou um fluxo de massa intenso nas primeiras etapas da simulação, como previsto pela Segunda Lei de Fick (WELTY et al., 2017).

Imagem 01. Visualização tridimensional do avanço da difusão.



Fonte: Autores, 2025.

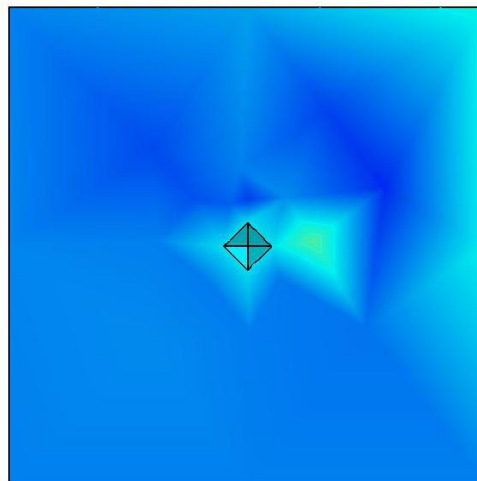
Conforme o tempo avançava, a taxa de difusão foi gradualmente diminuindo, em virtude do enfraquecimento do gradiente de concentração. A distribuição da tinta tornou-se mais uniforme, demonstrando o comportamento típico de sistemas que evoluem para o equilíbrio dinâmico. Esse comportamento foi compatível com os fundamentos teóricos discutidos por Geankoplis (2003), que enfatiza que, na ausência de convecção e reações químicas, o transporte de massa tende ao equilíbrio pela ação exclusiva da difusão molecular.



A visualização 3D fornecida pelo COMSOL Multiphysics evidenciou claramente as frentes de difusão, que se expandiam simetricamente a partir da região central (Imagem 02). Essa simetria reforça a fidelidade do modelo numérico e das condições de contorno adotadas (CREMASCO, 2016).

Outro aspecto relevante foi a adequação do coeficiente de difusão utilizado, retirado de dados encontrados na literatura. Valores típicos para sistemas aquosos foram aplicados, o que garantiu realismo à simulação e coerência com os fenômenos observados (CAMPOS, 2010).

Imagem 02. Simulação de difusão de gota de tinta em água.



Fonte: Autores, 2025.

O estudo também demonstrou a utilidade de ferramentas computacionais como o COMSOL não apenas para a análise técnica, mas como suporte ao ensino de engenharia. Ao permitir simulações interativas, parametrização de variáveis e visualização gráfica em tempo real, a plataforma se mostra eficaz na construção do conhecimento e na experimentação virtual de sistemas complexos.

Portanto, os resultados obtidos corroboram as previsões teóricas da literatura e mostram que, mesmo em modelos simplificados, é possível reproduzir com precisão o comportamento da transferência de massa por difusão. Essa abordagem



EPIC 2025

XII ENCONTRO DE PESQUISA, XVI ENCONTRO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E
II ENCONTRO DE ENSINO E EXTENSÃO UNIVERSITÁRIA



contribui tanto para o aprendizado acadêmico quanto para a aplicação prática em contextos industriais e ambientais.

4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

A simulação da difusão de uma gota de tinta em um recipiente com água possibilitou uma visualização clara e dinâmica do processo de transferência de massa por difusão molecular. A modelagem tridimensional, aliada à aplicação da Segunda Lei de Fick, mostrou como o gradiente de concentração conduz o transporte do soluto ao longo do tempo.

Os resultados obtidos reforçam os fundamentos teóricos da transferência de massa e demonstram a importância do coeficiente de difusão na descrição quantitativa do fenômeno. Além disso, a atividade evidenciou o potencial das simulações computacionais no ensino de engenharia, tornando o aprendizado mais visual e interativo.

Apesar da simplicidade do modelo, que considerou apenas a difusão, sem incluir efeitos como convecção ou reações químicas, os resultados foram coerentes e suficientes para os objetivos propostos. Para trabalhos futuros, sugere-se ampliar a complexidade do modelo, incorporando outros mecanismos de transporte ou explorando diferentes geometrias e condições de contorno.

REFERÊNCIAS

CAMPOS, Mario Cesar Massa de. **Controles típicos de equipamentos e processos industriais**. 2. ed. São Paulo: Blucher, 2010.

CREMASCO, Marco A. **Fundamentos de transferência de massa**. 3. ed. São Paulo: Blucher, 2016.

GEANKOPLIS, Christie J. **Transport Processes and Separation Process Principles**. 4th ed. New Jersey: Prentice Hall, 2003.

LIMA, Erickson Alex de et al. **O uso do comsol multiphysics aplicados no ensino para engenheiros**. In: Anais do EPIC 2024 - XI Encontro de Pesquisa, XV Encontro de Iniciação Científica e I Encontro de Ensino e Extensão da UNIFATEB.



Anais.Telêmaco Borba(PR) Centro Universitário UNIFATEB, 2024. Disponível em: <https://www.even3.com.br/anais/epic-2024/966783-O-USO-DO-COMSO-L-MULTIPHYSICS-APLICADOS-NO-ENSINO-PARA-ENGENHEIROS>. Acesso em: 03/10/2025.

PERRY, Robert H.; GREEN, Don W. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 8th ed. New York: McGraw-Hill, 2008.

WELTY, James R.; RORRER, Gregory L.; FOSTER, David G. *Fundamentos de transferência de momento, calor e massa*. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2017.

CONTRIBUIÇÃO DOS AUTORES

Amanda Tamiris Monteiro Santos

Item de colaboração	Igual aos demais	Menor que os demais	Maior que os demais	Não participou deste item
Contextualização do trabalho	x			
Organização dos dados	x			
Análise formal dos dados	x			
Análise formal do texto	x			
Investigação e estudo	x			
Metodologia	x			
Administração de cronograma	x			
Escrita do trabalho	x			
Participação em reuniões	x			
Revisão do trabalho	x			

Felipe Fortes Pinheiro

Item de colaboração	Igual aos demais	Menor que os demais	Maior que os demais	Não participou deste item
Contextualização do trabalho	x			
Organização dos dados	x			
Análise formal dos dados	x			
Análise formal do texto	x			
Investigação e estudo	x			
Metodologia	x			
Administração de cronograma	x			
Escrita do trabalho	x			
Participação em reuniões	x			
Revisão do trabalho	x			



EPIC 2025

XII ENCONTRO DE PESQUISA, XVI ENCONTRO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E
II ENCONTRO DE ENSINO E EXTENSÃO UNIVERSITÁRIA

