



ESTUDO DA DIFUSÃO DE MASSA EM VOLUME EXPANSIVO POR SIMULAÇÃO NO COMSOL MULTIPHYSICS

Maria Vitória Tosta de Oliveira Silva¹
Beatrice Rodrigues Rosa²
Érickson de Lima³
Marco Antonio Cardoso de Souza⁴

Resumo: O presente trabalho tem como objetivo analisar o comportamento da transferência de massa por difusão em sistemas com geometria cônica. A metodologia utilizada foi o estudo de caso, por permitir uma investigação aprofundada em um cenário específico e com possibilidade de ajustes ao longo da pesquisa. Foi realizado um levantamento teórico sobre os mecanismos de difusão e convecção. Esse acervo contribuiu para a compreensão da influência de variáveis como concentração, tempo e volume. A simulação foi conduzida com parâmetros definidos no software *Comsol Multiphysics*. Os resultados mostraram que, em sistemas com geometrias amplas, a difusão ocorre com maior alcance, embora com redução da concentração ao longo do percurso. Foi observado que, com o tempo, o sistema tende à estabilidade, confirmando as hipóteses levantadas no início do estudo. A análise mostrou que a geometria exerce papel fundamental no desempenho da difusão, podendo tanto facilitar quanto restringir a propagação das partículas. A aplicação do modelo computacional se mostrou eficiente na observação desses fenômenos, possibilitando análises futuras para otimização de processos.

Palavras-chave: Transferência de Massa; Difusão; Geometria Cônica; Simulação Computacional; *COMSOL*.

Abstract: The aim of this work is to analyze the behavior of mass transfer by diffusion in systems with conical geometry. The methodology used was a case study, as it allows an in-depth investigation of a specific scenario, with the possibility of adjustments throughout the research. A theoretical survey was carried out on the mechanisms of diffusion and convection. This contributed to understanding the influence of variables such as concentration, time and volume. The simulation was carried out using parameters defined in the *Comsol Multiphysics* software. The results showed that in systems with wide geometries, diffusion occurs over a greater range, although with a reduction in concentration along the way. It was observed that, over time, the system tends towards stability, confirming the hypotheses raised at the beginning of the study. The analysis showed that geometry plays a fundamental role in diffusion performance, and can either facilitate or restrict particle propagation. The application of the computer model proved to be efficient in observing these phenomena, enabling future analysis for process optimization.

Keywords: Mass Transfer; Diffusion; Conical Geometry; Computational Simulation; *COMSOL*.

¹ Graduanda do curso de Engenharia Química da UNIFATEB, campus Telêmaco Borba – e-mail: <mavitosta.silva@gmail.com>.

² Graduanda do curso de Engenharia Química da UNIFATEB, campus Telêmaco Borba – e-mail: <beh.rosa@gmail.com>.

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

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



1. INTRODUÇÃO

A transferência de massa é um fenômeno fundamental em diversos processos químicos e físicos, caracterizado pelo movimento de substâncias de uma região de maior concentração para outra de menor concentração, motivado por gradientes como concentração, pressão ou temperatura (PAUL et al., 2014). Segundo Bird, Stewart e Lightfoot (2007), isso pode acontecer de duas formas: por difusão, que é o movimento aleatório das partículas seguindo a Segunda Lei de Fick, e por convecção, que é o transporte da massa pelo movimento do fluido, podendo ser natural ou forçada, com a atuação de algum equipamento que faz o fluido se mover (Cussler, 2009).

Entre os mecanismos que governam essa transferência, a difusão se destaca por atuar em nível microscópico, onde as partículas se movimentam buscando o equilíbrio do sistema, processo descrito pela segunda Lei de Fick (BROGIOLI; VAILATI, 2000). Já a convecção ocorre em escala macroscópica, podendo ser natural, quando induzida por diferenças de densidade, ou forçada, quando causada por agentes externos como bombas ou agitadores (DIAZVIERA; ORTIZ-TAPIA, 2015). A compreensão desses processos é essencial para o desenvolvimento de modelos computacionais que representem fielmente a transferência de massa em sistemas reais.

Nesse contexto, o uso do software COMSOL Multiphysics tem se destacado, especialmente através do módulo “Transport of Diluted Species”, que permite simular o comportamento da difusão em meios com diferentes geometrias e propriedades (COMSOL, 2021). Estudos demonstram que a geometria do sistema influencia significativamente a propagação da massa, sendo que regiões com geometrias mais restritas podem limitar a difusão, enquanto geometrias expandidas possibilitam uma dispersão maior, ainda que com diluição do soluto (PAUL et al., 2014).



EPIC 2025

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



2. DESENVOLVIMENTO

2.1. OBJETIVOS

2.1.1. Objetivos Gerais

O objetivo do presente trabalho consiste em compreender os fenômenos de transferência de massa utilizando um objeto de estudo teórico. Também visa estimular os estudos sobre fluxo de massa e resistência à difusão através de interferências projetadas no modelo computacional, além de investigar a aplicabilidade dessa simulação em processos industriais e compreender a eficácia de programas de software na modelagem de projetos que envolvem a transferência de massa em seus sistemas.

2.1.2. Objetivos Específicos

- Discorrer sobre a transferência de massa, seus mecanismos e barreiras de propagação;
- Compreender a influência das propriedades dos materiais envolvidos durante a transferência de massa;
- Estudar os mecanismos de transferência de massa no sistema composto por uma geometria cônica com volume expansivo;
- Analisar a eficiência do revestimento como barreira à difusão no sistema;
- Avaliar a viabilidade técnica e operacional da aplicação do revestimento como método de controle da transferência de massa em processos industriais.

2.2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A transferência de massa é um fenômeno físico relacionado ao movimento de partículas, moléculas ou íons de uma região para outra, causado por um gradiente de concentração (CREMASCO, 2023). Ela ocorre por dois meios, sendo o primeiro pela difusão, caracterizada pelo movimento natural das partículas de uma região concentrada para outra menos concentrada, tendo como base a Lei de Fick. Outro modo é a convecção, definida pelo transporte de massa com o movimento do fluido, que pode ser causado por diferenças de densidade ou por forças externas, como



uma bomba ou ventilador (SANTOS, 2022).

Segundo Cremasco (2016), a forma do espaço onde ocorre a difusão também influencia, como em um sistema com geometria cônica, onde, a variação da área ao longo do caminho pode facilitar ou dificultar a difusão, mudando como as concentrações se distribuem. Portanto, em geometrias não uniformes, o gradiente de concentração se comporta de forma diferente, alterando até o tempo para que o sistema chegue ao equilíbrio.

Com o uso de ferramentas computacionais, como o COMSOL multiphysics, é possível simular e controlar a variação da concentração conforme a mudança da forma que o condiciona. Ele permite testar condições adversas, como volume, tempo e concentração, observando como o sistema se comporta diante de diferentes cenários. Isso possibilita uma análise mais precisa dos fenômenos de transferência de massa, otimizando processos e contribuindo para o desenvolvimento de soluções mais eficientes em engenharia e ciências aplicadas.

2.3. MÉTODOS E MATERIAIS

Conforme Marques (2023), a metodologia é a divisão do estudo que esclarece a forma como as pesquisas serão conduzidas, podendo ser adaptada conforme os resultados obtidos no decorrer do projeto ou mediante às possíveis necessidades. Diante disso, as acadêmicas selecionaram como norteadora do trabalho acadêmico a metodologia de estudo de caso, onde, por meio dela serão levantados acervos teóricos para embasar as pesquisas voltadas para a transferência de massa. Na sequência, esses estudos serão aplicados na criação de uma modelagem no software *Comsol Multiphysics*, a fim de comprovar as teses sobre difusão mássica e a influência da área de propagação e propriedades relevantes a esse sistema.

Os resultados adquiridos serão comparados com as fundamentações teóricas, verificando possíveis desvios e acertos no modelo. Por fim, o estudo será concluído com as considerações gerais observadas no decorrer do estudo, além da análise sobre as expectativas elencadas no início do projeto e seu cumprimento ou ausência dele no encerramento dos estudos.



Para a realização da modelagem no software *Comsol Multiphysics*, foram aplicadas as seguintes etapas, conforme o exposto no Quadro 01.

Quadro 1 - Especificações da Modelagem.

Propriedades	Descrição	Valor	Unidade de medida
Raio Inferior	-	2	m
Altura	-	5	m
Raio superior	-	0,5	m
Concentração inicial	-	1000	mol/m ³
Concentração inserida	-	2000	mol/m ³
Fenômeno	Dependente do tempo	-	-
Tempo	-	3600	s

Fonte: Elaborado pelas autoras (2025).

Com base nos dados dispostos no quadro e nos resultados oferecidos pelo software, foi possível obter algumas considerações referentes ao comportamento e a propagação de massa do sistema.

2.4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A transferência de massa é um fenômeno associado ao movimento de espécies químicas de uma região de maior concentração para uma região de menor concentração, impulsionado por gradientes de concentração, pressão ou temperatura (CREMASCO, 2023). Esse processo pode ocorrer por difusão ou convecção, onde a difusão está associada a um nível microscópico realizado pelo movimento de partículas com a intenção de atingir o equilíbrio do sistema. Ela é regida pela 2ª Lei de Fick que descreve como a concentração de uma espécie varia ao longo do tempo e do espaço devido ao movimento das partículas (MATEUS, 2018).

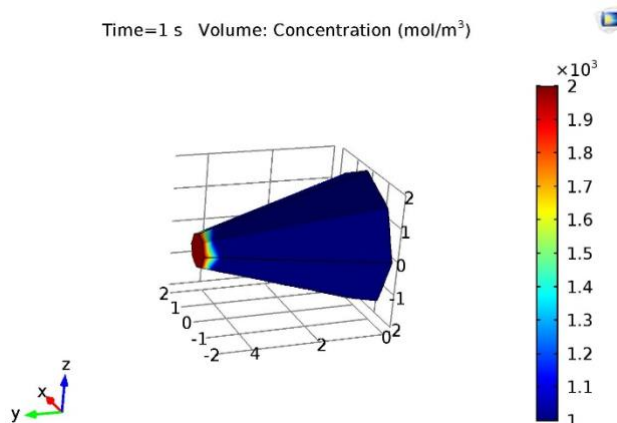
Já na convecção, a transferência de massa tende a ocorrer em uma escala macroscópica, realizada pela propagação do fluido em um modelo analisado. Ela pode ser classificada como natural, onde o movimento é feito de forma espontânea



em razão de diferenças de densidade causadas por variações de temperatura ou concentração dentro do fluido, ou como forçada, devido ao movimento do fluido ser induzido por fontes externas, como ventiladores, bombas ou agitadores (SANTOS, 2022). Para a difusão, o autor Lima (2017) afirma que a geometria de um sistema influencia em sua propagação, uma vez que determina o caminho disponível para o transporte das espécies. Para seções com geometrias restritas, como canais estreitos ou microestruturas, a difusão pode ser limitada devido à menor área de contato e ao maior tempo necessário para que as partículas alcancem regiões distantes. Por outro lado, em sistemas com geometrias expandidas, como os cones, a difusão pode se propagar de forma ampla, porém com diluição acentuada ao longo do percurso, devido ao aumento do volume disponível.

Com a intenção de analisar essa propagação, os alunos escolheram a geometria cônica com raio inferior de 2m e superior de 0,5m em um regime de estudo “*Transport of Diluted Species*”, a fim de compreender essa propagação em um sistema com volume expansivo. Foi possível perceber que na região de entrada, a concentração é inserida com quantidade considerável, porém, quando segue o fluxo do volume que a comporta, o valor da concentração diminui, se assemelhando às características de um sistema em equilíbrio, como mostra a Figura 01.

Figura 01: Simulação com geometria cônica.



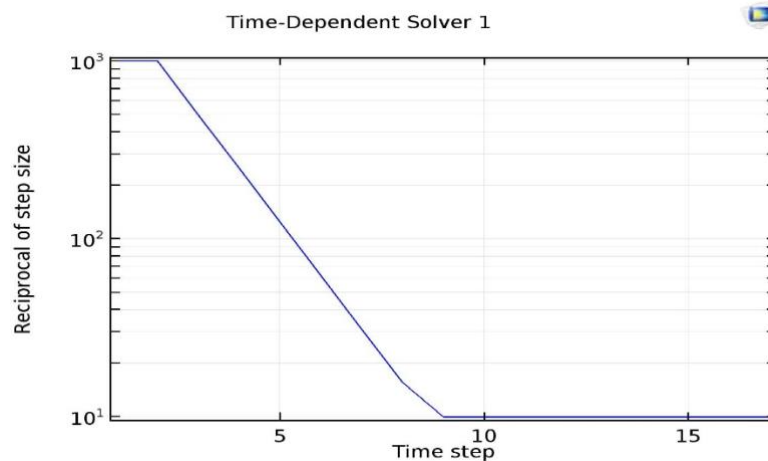
Fonte: Elaborado pelas autoras (2025).

Mediante a essas considerações, foi possível obter um gráfico que expõe o comportamento da concentração em decorrência do tempo e do volume analisado. Esse gráfico comprova as teses acerca da concentração que, ao longo do tempo, atinge um estado mínimo e constante. Esse desempenho é exemplificado na Figura



02.

Figura 02: Desempenho da concentração.



Fonte: Elaborado pelas autoras (2025).

Portanto, essa simulação comprova que a difusão sofre influência de fatores externos, como a geometria do sistema, que pode facilitar ou restringir a propagação dela (LIMA, 2021). Logo, se o sistema possui barreiras ou obstáculos, o transporte mássico não consegue desempenhar seu fluxo ideal e acaba sofrendo uma redução da taxa de difusão. Em contrapartida, se o sistema possui uma geometria ampla e livre para a movimentação das moléculas, a transferência de massa por difusão nele tende a ter um desempenho significativo, obtendo resultados notáveis no modelo proposto.

4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

A análise realizada demonstrou que a transferência de massa por difusão, processo descrito pela 2ª Lei de Fick, ocorre quando partículas migram de regiões de maior para menor concentração, conforme explicitado por Paul et al. (2014). Além disso, as variações na geometria do sistema influenciam diretamente o comportamento da difusão, uma vez que áreas restritas limitam o fluxo de massa, enquanto áreas expandidas favorecem, apesar da diluição progressiva, como destacado em estudos sobre modelos advecção-difusão em meios porosos (Diaz-Viera et al., 2015).



A utilização do COMSOL Multiphysics permitiu simular efetivamente a difusão em arranjos cônicos e verificar que, com o tempo, a concentração atinge níveis estáveis, validando a teoria de equilíbrio apresentada nas leis de Fick. Também foi possível observar que o coeficiente de difusividade efetiva em meios porosos, condicionado por fatores como tortuosidade e estrutura do material, exerce papel fundamental na uniformização da massa ao longo do tempo (com base no modelo de Millington-Quirk), conforme detalhado por COMSOL (2021).

Ressalta-se, por fim, que geometrias mais amplas oferecem maior difusão com maior diluição, enquanto geometrias restritas promovem retenção e menor fluxo de massa, aspecto importante para o projeto de sistemas de engenharia química e ambiental.

REFERÊNCIAS

BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. Transport phenomena. 2. ed. New York: John Wiley & Sons, 2007.

BROGIOLI, D.; VAILATI, A. Diffusive Mass Transfer by Nonequilibrium Fluctuations: Fick's Law Revisited. 2000. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0006163>. Acesso em: 20 jun. 2025.

COMSOL MULTIPHYSICS. Transport of Diluted Species in Porous Media. 2021. Disponível em: https://doc.comsol.com/5.5/doc/com.comsol.help.cfd/cfd_ug_chemsptrans.11.089.html. Acesso em: 20 jun. 2025.

CREMASCO, Marco A. Fundamentos de transferência de massa. 3. ed. São Paulo: Editora Blucher, 2016. E-book. p.410. ISBN 9788521209058. Disponível em: <https://integrada.minhabiblioteca.com.br/reader/books/9788521209058/>. Acesso em: 20 set. 2025.



CREMASCO, Marco A.; BERTAN, Alessandra S. Transferência de massa: difusão mássica em meios convencionais. v.1. São Paulo: Editora Blucher, 2023. E-book. p.27. ISBN 9786555064575. Disponível em: <https://integrada.minhabiblioteca.com.br/reader/books/9786555064575/>. Acesso em: 20 jun. 2025.

CUSSLER, E. L. Diffusion: mass transfer in fluid systems. 3. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.

DIAZVIERA, M. A.; ORTIZ-TAPIA, A. A Flow and Transport Model in Porous Media for Microbial Enhanced Oil Recovery Studies Using COMSOL Multiphysics® Software. Mexican Petroleum Institute, 2015. Disponível em: <https://www.comsol.com/paper/a-flow-and-transport-model-in-porous-media-for-microbial-enhanced-oil-recovery-studies-using-comsol-multiphysics-software-24331>. Acesso em: 20 jun. 2025.

LIMA, W. M. P. B.. Transferência de calor e massa em sólidos porosos com geometria complexa via análise concentrada: Modelagem e simulação. Universidade Federal de Campina Grande, 2017. Disponível em: WANDERSON MAGNO PAIVA BARBOSA DE LIMA - DISSERTAÇÃO PPGEM 2017.pdf. Acesso em: 19/06/2025.

LIMA, W. M. P. B.. Transporte de Calor e Massa em Sólidos Porosos Heterogêneos com Geometria Arbitrária via Método da Análise Concentrada: Modelagem Fenomenológica Difusiva-Convectiva e Simulação. Universidade Federal de Campina Grande, 2021. Disponível em: WANDERSON MAGNO PAIVA BARBOSA DE LIMA – TESE (PPGEP) 2021.pdf. Acesso em: 20/06/2025.



MARQUES, Biblioteca Universitária Mario O. Guia Unijuí de formatação de trabalhos acadêmico-científicos. 3. ed. Ijuí: Editora Unijuí, 2023. E-book. p.51. ISBN 9788541903820. Disponível em: <https://integrada.minhabiblioteca.com.br/reader/books/9788541903820/>. Acesso em: 13 jun. 2025.

MATEUS, Marcos Vinícius. Efeito de surfactantes sobre o coeficiente volumétrico de transferência de massa de oxigênio da interface gás-líquido. 2018. 74f. Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia Ambiental) - Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia Ambiental, Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Uberaba, 2018. Disponível em: <https://bdtd.ufm.edu.br/bitstream/tede/669/5/Dissert%20Marcos%20V%20Mateus.pdf>. Acesso em: 20/06/2025.

PAUL, A. et al. Fick's Laws of Diffusion. In: Thermodynamics, Diffusion and the Kirkendall Effect in Solids. Springer, 2014. Disponível em: https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-07461-0_3. Acesso em: 20 jun. 2025.

PEDRO, Ramos E.; BULCÃO-NETO, Renato de F.; COUTINHO, Emanuel; GRACIANO NETO, Valdemar V.. Uma Análise do Workshop de Modelagem e Simulação em Sistemas Intensivos de Software. In: WORKSHOP EM MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE SISTEMAS INTENSIVOS EM SOFTWARE (MSSIS), 2023, Campo Grande/MS. Anais [...]. Porto Alegre: Sociedade Brasileira de Computação, 2023 . p. 1-10. DOI: <https://doi.org/10.5753/mssis.2023.235551>. Disponível em: Vista do Uma Análise do Workshop de Modelagem e Simulação em Sistemas Intensivos de Software. Acesso em: 20 jun. 2025.

SANTOS, Diego M. C dos; COELHO, Felipe L.; SANTOS, Luana S dos; et al. Transferência de massa. Porto Alegre: SAGAH, 2022. E-book. p.24. ISBN



9786556903217.

Disponível

em:

<https://integrada.minhabiblioteca.com.br/reader/books/9786556903217/>. Acesso em:
20 jun. 2025.

CONTRIBUIÇÃO DOS AUTORES

Nome completo: Todos os integrantes.

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			
Financiamento para desenvolvimento do trabalho	Não se aplica			
Investigação e estudo	x			
Metodologia	x			
Administração de cronograma	Não se aplica			
Administração de recursos	Não se aplica			
Gestão do projeto	Não se aplica			
Validação do projeto	Não se aplica			
Marketing	Não se aplica			
Escrita do trabalho	x			
Participação em reuniões	Não se aplica			
Revisão do trabalho	x			
Participação na construção do protótipo	x			