PQI – 3303 – Fenômenos de Transporte III
Aula 03

José Luís de Paiva

Departamento de Engenharia Química da EPUSP

Agenda

1. Coeficiente Convectivo de Transporte de Massa
2. Contradifusão Equimolar
3. Difusão de A em B parado
4. Fluxos arbitrários e escoamento turbulento.
5. Coeficiente Global de Transporte de Massa

Coeficiente Convectivo de Transporte de Massa

- A equação de continuidade da espécie química A em um sistema binário :

$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = -\mathrm{div}\left(\rho_A \vec{v} + \vec{J}_A\right) + \dot{r}_A = -\mathrm{div}(\vec{n}_A) + \dot{r}_A$$

$$\vec{n}_A = \vec{n} x_A + \vec{J}_A = \rho \vec{v} x_A + \vec{J}_A$$

Coeficiente Convectivo de Transporte de Massa

- O fluxo mássico global de A é determinado pelo fluxo difusivo, usualmente expresso pela “lei” de Fick, e pelo escoamento (convecção) .
- Em alguns poucos casos, o equacionamento exato e o cálculo do fluxo é factível. Tal limitação é devida principalmente à complexidade do escoamento, que depende da geometria, propriedades e regime de escoamento (laminar ou turbulento).
- Este fenômeno é análogo ao observado no caso de transferência de calor, e portanto o procedimento será o mesmo, isto é, pelo emprego de um coeficiente convectivo k, análogo ao h da transferência de calor.

Interface

- **Hipótese de baixo transporte de massa**

$$k_x = \frac{J_A}{x_{AS} - x_{A\infty}} = \frac{-\rho D_A (\partial x_A / \partial z)_{z=0}}{x_{AS} - x_{A\infty}}$$

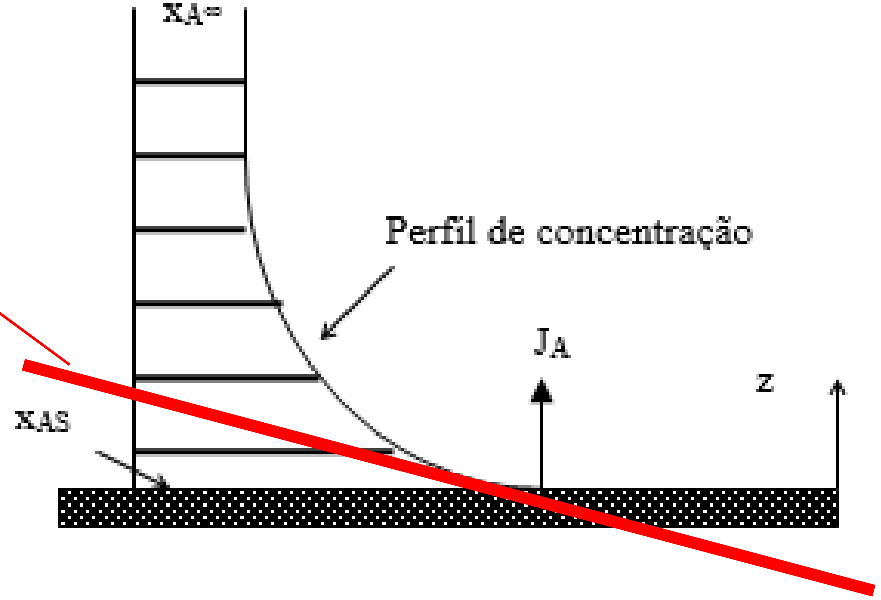


Figura 1 – Perfil de concentração

Coeficientes convectivos e fluxos

- A principal dificuldade para a obtenção do coeficiente convectivo é a determinação do perfil de concentrações.
- De fato, na maioria das situações, o cálculo do coeficiente convectivo de transporte de massa é obtido a partir de correlações semi-empíricas e expresso em termos do número de Sherwood, Sh, análogo ao número de Nusselt, Nu, da transferência de calor.

$$n_A = k_x\left(x_{AS} - x_{A\infty}\right)$$

$$n_A = k_\rho\left(\rho_{AS} - \rho_{A\infty}\right)$$

$$\tilde{N}_A = k_{\tilde{x}}\left(\tilde{x}_{AS} - \tilde{x}_{A\infty}\right)$$

$$\tilde{N}_A = k_{\tilde{\rho}}\left(\tilde{\rho}_{AS} - \tilde{\rho}_{A\infty}\right)$$

$$\tilde{N}_A = k_P\left(P_{AS} - P_{A\infty}\right)$$

2. Contradifusão Equimolar

- Contra difusão equimolar unidimensional.
- O sistema é binário (A/B).

$$\tilde{N}_A = -\tilde{N}_B \Rightarrow \tilde{N} = 0$$

$$\tilde{N}_A = \tilde{x}_A \tilde{N} + \tilde{I}_A = \tilde{I}_A = -\tilde{\rho} D_{AB} \frac{d\tilde{x}_A}{dz}$$

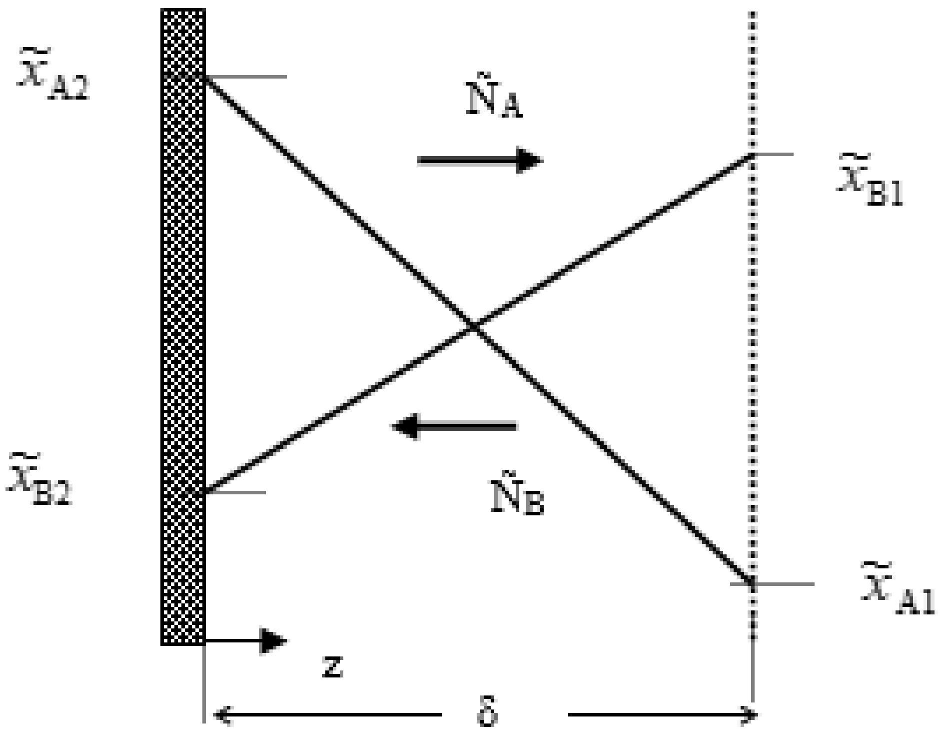
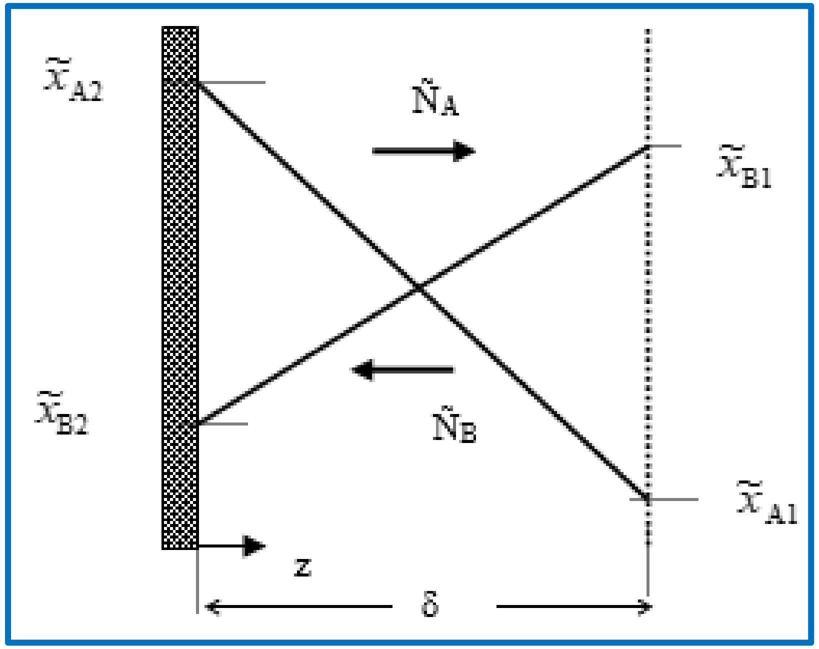


Figura 2 - Filme fase gás

2. Contradifusão Equimolar



$$\tilde{N}_A = \tilde{x}_A \tilde{N} + \tilde{I}_A = \tilde{I}_A = -\tilde{\rho} D_{AB} \frac{d\tilde{x}_A}{dz}$$

$$\tilde{N}_A = \tilde{\rho}\frac{D_{AB}}{\delta}\left(\tilde{x}_{A2} - \tilde{x}_{A1}\right) \qquad \tilde{N}_B = \tilde{\rho}\frac{D_{AB}}{\delta}\left(\tilde{x}_{B2} - \tilde{x}_{B1}\right)$$

- coeficientes convectivos de transporte de massa:

$$\boxed{k_{\tilde{x}} = \tilde{\rho}\frac{D_{AB}}{\delta}} \qquad \boxed{k_{\tilde{\rho}} = \frac{D_{AB}}{\delta}}$$

3.Difusão de A em B parado

- Experimento de Stefan

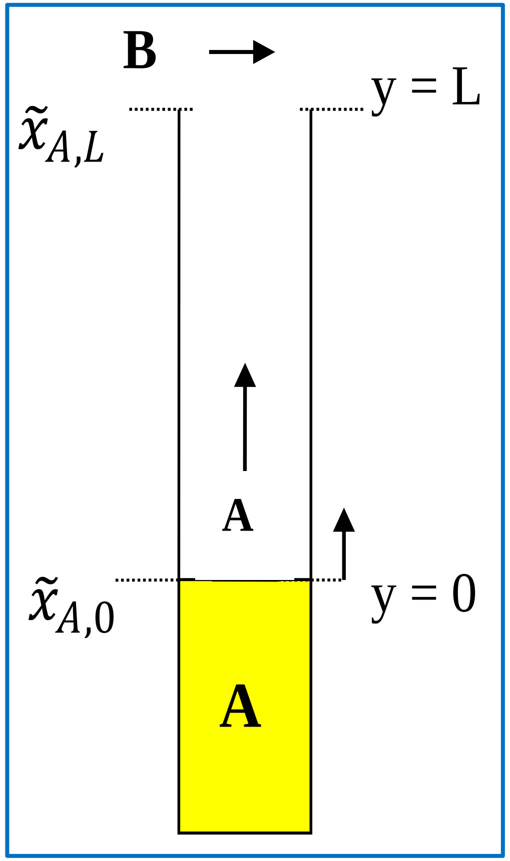
$$\tilde{N}_A = \frac{\tilde{\rho}\, D_{AB}}{L\,\tilde{x}_{BLN}}\left(\tilde{x}_{A,0} - \tilde{x}_{A,L}\right)$$

$$\tilde{N}_A = \frac{D_{AB}}{L\,\tilde{x}_{BLN}}\left(\tilde{\rho}_{A,0} - \tilde{\rho}_{A,L}\right)$$

$$\tilde{N}_A = k_{\tilde{\rho}}\left(\tilde{\rho}_{A,0} - \tilde{\rho}_{A,L}\right)$$

$$k_{\tilde{\rho}} = \frac{D_{AB}}{L\,\tilde{x}_{BLN}} = \frac{k'_{\tilde{\rho}}}{\tilde{x}_{BLN}}$$

independe da composição.



Para sistemas diluídos: $k_{\tilde{\rho}} \cong k'_{\tilde{\rho}}$

4.Fluxos arbitrários e escoamento turbulento

- O equacionamento do escoamento turbulento : modelos de turbulência.

$$\tilde{I}_A = -\tilde{\rho}\left(D_{AB} + \varepsilon_D\right)\frac{d\,\tilde{x}_A}{d\,z}$$

difusividade turbilhonar

$$\tilde{N}_A = \tilde{x}_A \tilde{N} + \tilde{I}_A =$$

$$= \tilde{x}_A\left(\tilde{N}_A + \tilde{N}_B\right) - \tilde{\rho}\left(D_{AB} + \varepsilon_D\right)\frac{d\,\tilde{x}_A}{d\,z}$$

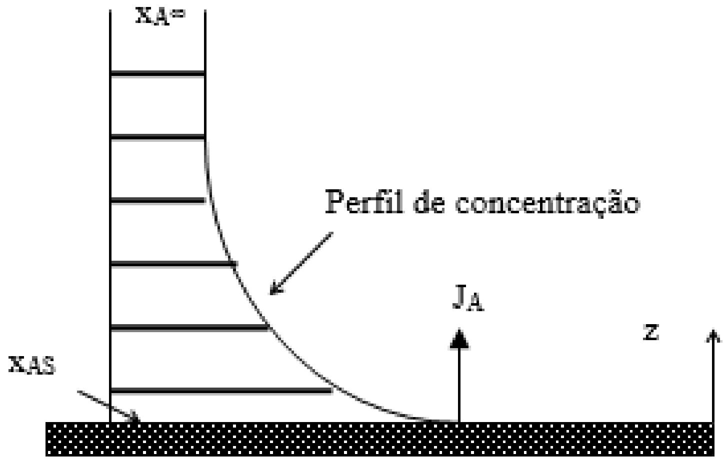


Figura 1 - Perfil de concentração

4.Fluxos arbitrários e escoamento turbulento

- Camada de fluido, δ, próxima à interface:

$$\tilde{N}_A = \tilde{x}_A \tilde{N} + \tilde{I}_A =$$

$$= \tilde{x}_A\left(\tilde{N}_A + \tilde{N}_B\right) - \tilde{\rho}\left(D_{AB} + \varepsilon_D\right)\frac{d\,\tilde{x}_A}{d\,z}$$

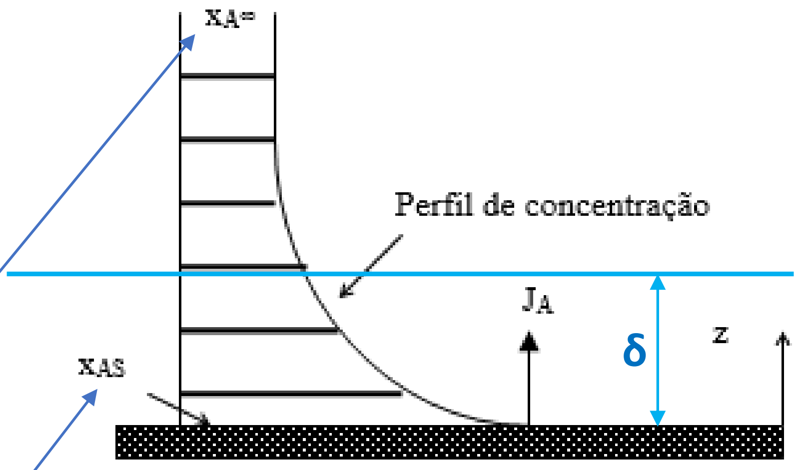


Figura 1 - Perfil de concentração

$$\tilde{N}_A = \left(\frac{\tilde{N}_A}{\tilde{N}_A + \tilde{N}_B}\right)\tilde{\rho}\frac{\left(D_{AB} + \varepsilon_D\right)}{\delta}\ln\left[\frac{\dfrac{\tilde{N}_A}{\tilde{N}_A + \tilde{N}_B} - \tilde{x}_{AL}}{\dfrac{\tilde{N}_A}{\tilde{N}_A + \tilde{N}_B} - \tilde{x}_{A0}}\right]$$

$$k'_{\tilde{\rho}} = \frac{D_{AB} + \varepsilon_A}{\delta}$$

$$\tilde{N}_A = \frac{k'_{\tilde{\rho}}}{\beta}\left(\tilde{\rho}_{A0} - \tilde{\rho}_{AL}\right)$$

4.Fluxos arbitrários e escoamento turbulento

$$\tilde{N}_A = \left(\frac{\tilde{N}_A}{\tilde{N}_A + \tilde{N}_B}\right)\tilde{\rho}\,\frac{(D_{AB} + \varepsilon_D)}{\delta}\ln\left[\frac{\dfrac{\tilde{N}_A}{\tilde{N}_A + \tilde{N}_B} - \tilde{x}_{AL}}{\dfrac{\tilde{N}_A}{\tilde{N}_A + \tilde{N}_B} - \tilde{x}_{A0}}\right]$$

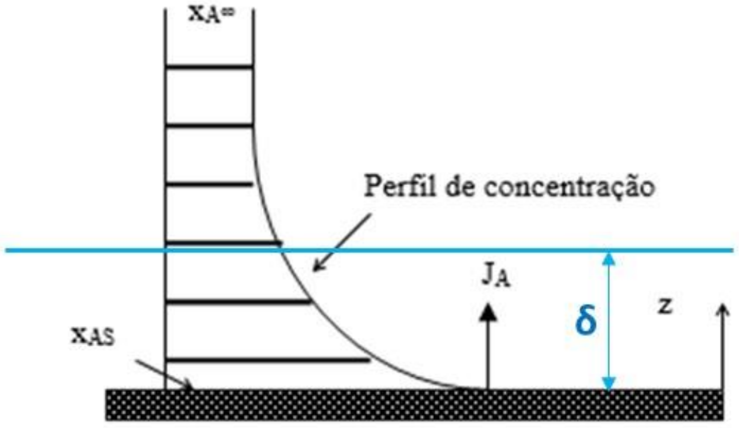


Figura 1 – Perfil de concentração

$$\tilde{N}_A = \frac{k'_{\tilde{\rho}}}{\beta}\left(\tilde{\rho}_{A0} - \tilde{\rho}_{AL}\right)$$

$$\beta = \frac{\left\{\left[\tilde{N}_A/\left(\tilde{N}_A + \tilde{N}_B\right)\right] - \tilde{x}_{AL}\right\} - \left\{\left[\tilde{N}_A/\left(\tilde{N}_A + \tilde{N}_B\right)\right] - \tilde{x}_{A0}\right\}}{\left(\dfrac{\tilde{N}_A}{\tilde{N}_A + \tilde{N}_B}\right)\ln\left\{\dfrac{\left[\tilde{N}_A/\left(\tilde{N}_A + \tilde{N}_B\right)\right] - \tilde{x}_{AL}}{\left[\tilde{N}_A/\left(\tilde{N}_A + \tilde{N}_B\right)\right] - \tilde{x}_{A0}}\right\}}$$

Contradifusão equimolar => $\beta = 1$

Difusão de A em B parado => $\beta = \tilde{x}_{BLN}$

CONCENTRAÇÕES USUAIS EM TRANSPORTE DE MASSA

	mass fraction ω [–]	mole fraction x [–]	absolute humidity $H\left[\frac{\text{kg}-\text{A}}{\text{kg}-\text{B}}\right]$	mole ratio $X\left[\frac{\text{mol}-\text{A}}{\text{mol}-\text{B}}\right]$
mass fraction ω [–]	ω	$\dfrac{x}{\dfrac{M_B}{M_A}+\left\{1-\dfrac{M_B}{M_A}\right\}x}$	$\dfrac{H}{1+H}$	$\dfrac{X}{\dfrac{M_B}{M_A}+X}$
mole fraction x [–]	$\dfrac{\omega}{\dfrac{M_A}{M_B}+\left\{1-\dfrac{M_A}{M_B}\right\}\omega}$	x	$\dfrac{H}{\dfrac{M_A}{M_B}+H}$	$\dfrac{X}{1+X}$
absolute humidity $H\left[\frac{\text{kg}-\text{A}}{\text{kg}-\text{B}}\right]$	$\dfrac{\omega}{1-\omega}$	$\left(\dfrac{x}{1-x}\right)\left(\dfrac{M_A}{M_B}\right)$	H	$\left(\dfrac{M_A}{M_B}\right)X$
mole ratio $X\left[\frac{\text{mol}-\text{A}}{\text{mol}-\text{B}}\right]$	$\left(\dfrac{M_B}{M_A}\right)\left(\dfrac{\omega}{1-\omega}\right)$	$\left(\dfrac{x}{1-x}\right)$	$\left(\dfrac{M_B}{M_A}\right)H$	X

RELAÇÕES ENTRE AS DEFINIÇÕES DE CONCENTRAÇÃO

	mass fraction ω_A [–]	mole fraction x_A [–]	partial density ρ_A [kg m^{-3}]	molar density c_A [kmol m^{-3}]	partial pressure p_A [kPa]
mass fraction ω_A [–]	ω	$\dfrac{x_A M_A}{\sum_i x_i M_i}$	$\dfrac{\rho_A}{\sum_i \rho_i}$	$\dfrac{c_A M_A}{\sum_i c_i M_i}$	$\dfrac{p_A M_A}{\sum_i p_i M_i}$
mole fraction x_A [–]	$\dfrac{(\omega_A/M_A)}{\sum_i(\omega_i/M_i)}$	x_A	$\dfrac{\rho_A/M_A}{\sum_i(\rho_i/M_i)}$	$\dfrac{c_A}{\sum_i c_i}$	$\dfrac{p_A}{\sum_i p_i}$
partial density ρ_A [kg m^{-3}]	$\rho\,\omega_A$	$\dfrac{\rho\, x_A M_A}{\sum_i x_i M_i}$	ρ_A	$c_A M_A$	$\dfrac{M_A p_A}{RT}$
molar density c_A [kmol m^{-3}]	$\dfrac{\rho\,\omega_A}{M_A}$	$c x_A$	$\dfrac{\rho_A}{M_A}$	c_A	$\dfrac{p_A}{RT}$
partial pressure p_A [kPA]	$\dfrac{(\omega_A/M_A)P}{\sum_i(\omega_i/M_i)}$	$P x_A$	$\dfrac{RT\rho_A}{M_A}$	$c_A RT$	p_A

Mixture: $\sum_i x_i = 1,\ \sum_i \omega_i = 1,\ \rho = \sum_i \rho_i,\ c = \sum_i c_i,\ P = \sum_i p_i$

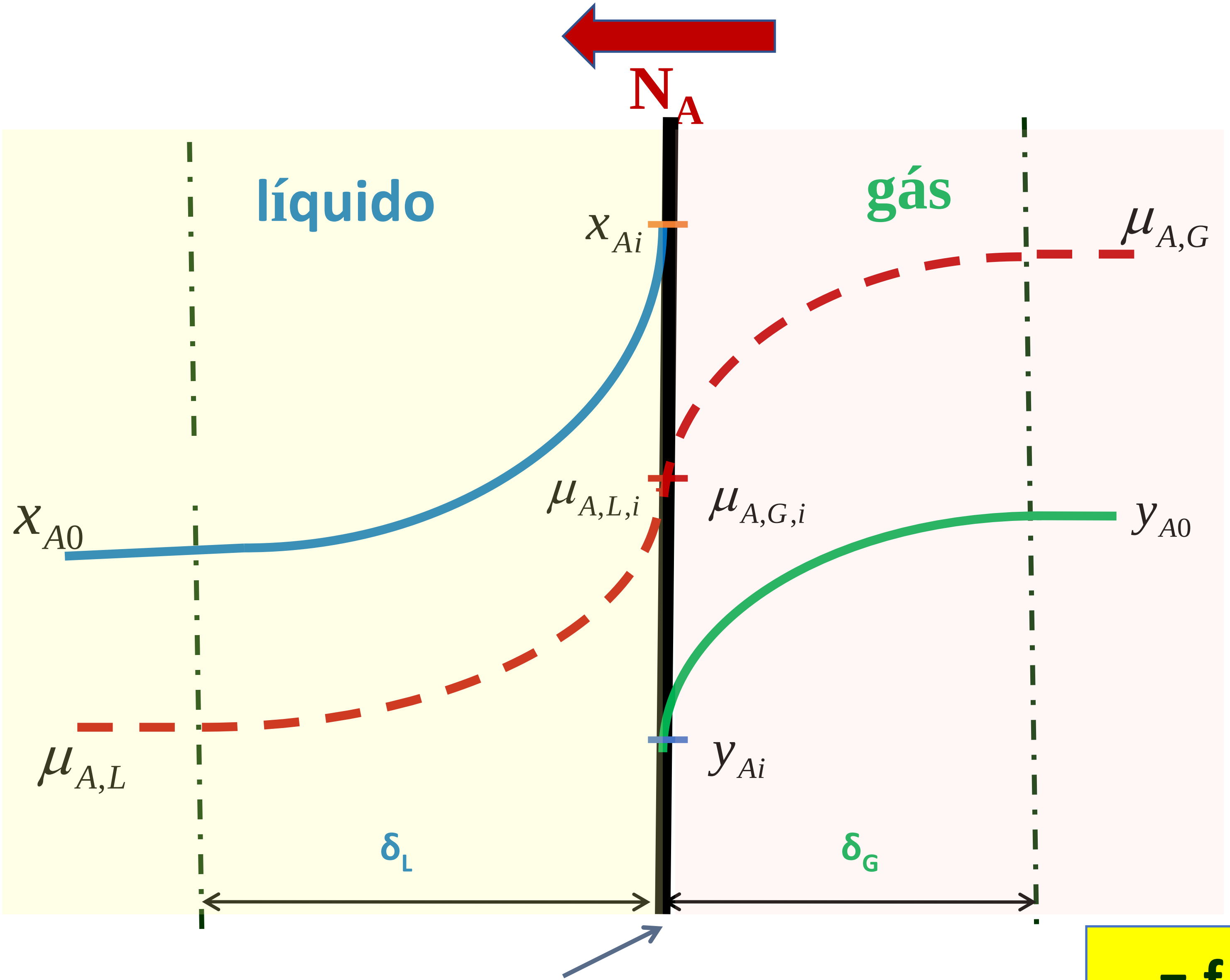
$$M = \sum_i M_i x_i = \left(\sum_i \frac{\omega_i}{M_i}\right)^{-1}$$

COEFICIENTES DE TRANSPORTE DE MASSA

Mass transfer coefficient	Unit	Definition	Driving force	Phase
k_y	[kmol m^{-2} s^{-1}]	$N_A^* = k_y(y_s - y_\infty)$	Δy	Gas phase
k_G	[kmol m^{-2} s^{-1} kPa^{-1}]	$N_A^* = k_G(p_s - p_\infty)$	Δp	
k_Y	[kmol m^{-2} s^{-1}]	$N_A^* = k_Y(Y_s - Y_\infty)$	ΔY	
k	[m s^{-1}]	$N_A = \rho_G k(\omega_{Gs} - \omega_{G\infty})$	$\Delta\omega_G$	
k_H	[kg m^{-2} s^{-1}]	$N_A = k_H(H_s - H_\infty)$	ΔH	
k_L	[m s^{-1}]	$N_A^* = k_L(c_s - c_\infty)$	Δc	Liquid phase
k_x	[kmol m^{-2} s^{-1}]	$N_A^* = k_x(x_s - x_\infty)$	Δx	
k_X	[kmol m^{-2} s^{-1}]	$N_A^* = k_X(X_s - X_\infty)$	ΔX	
k	[m s^{-1}]	$N_A = \rho_L k(\omega_{Ls} - \omega_{L\infty})$	$\Delta\omega_L$	

c = molar density [mol m^{-3}], H = absolute humidity [–], M_A = molecular weight [kg kmol^{-1}], N_A = mass flux [kg m^{-2} s^{-1}], $N_A^* = N_A/M_A$ = molar flux [kmol m^{-2} s^{-1}], p = partial pressure [kPa], x,y = mole fraction [–], $X = x/(1-x)$ [–], $Y = y/(1-x)$ [–], ω = mass fraction [–].

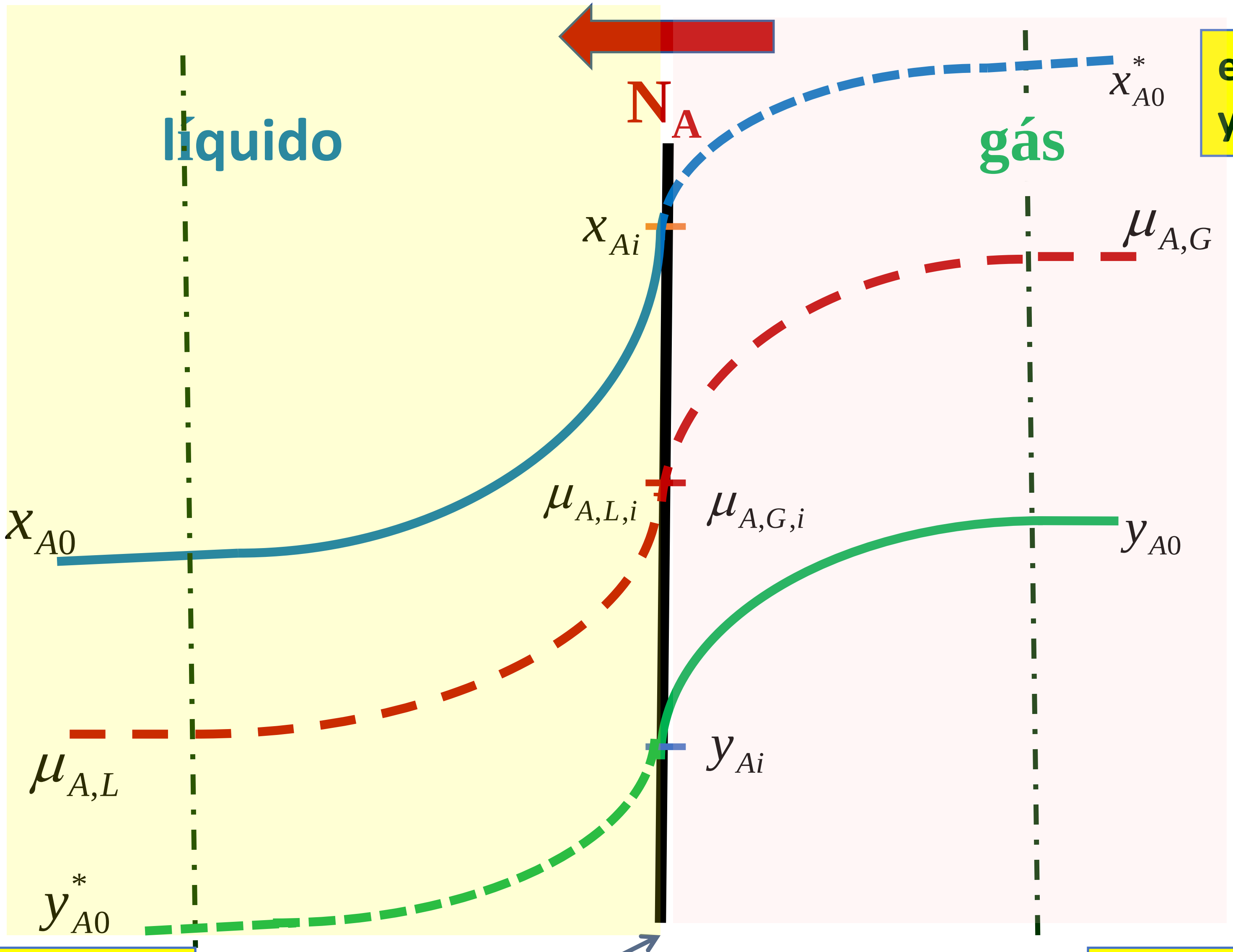
5.Coeficiente Global de Transporte de Massa -Interface



=> **Equilíbrio** =>

$$y_{Ai} = f\,(x_{Ai})$$

5.Coeficiente Global de Transporte de Massa -Interface

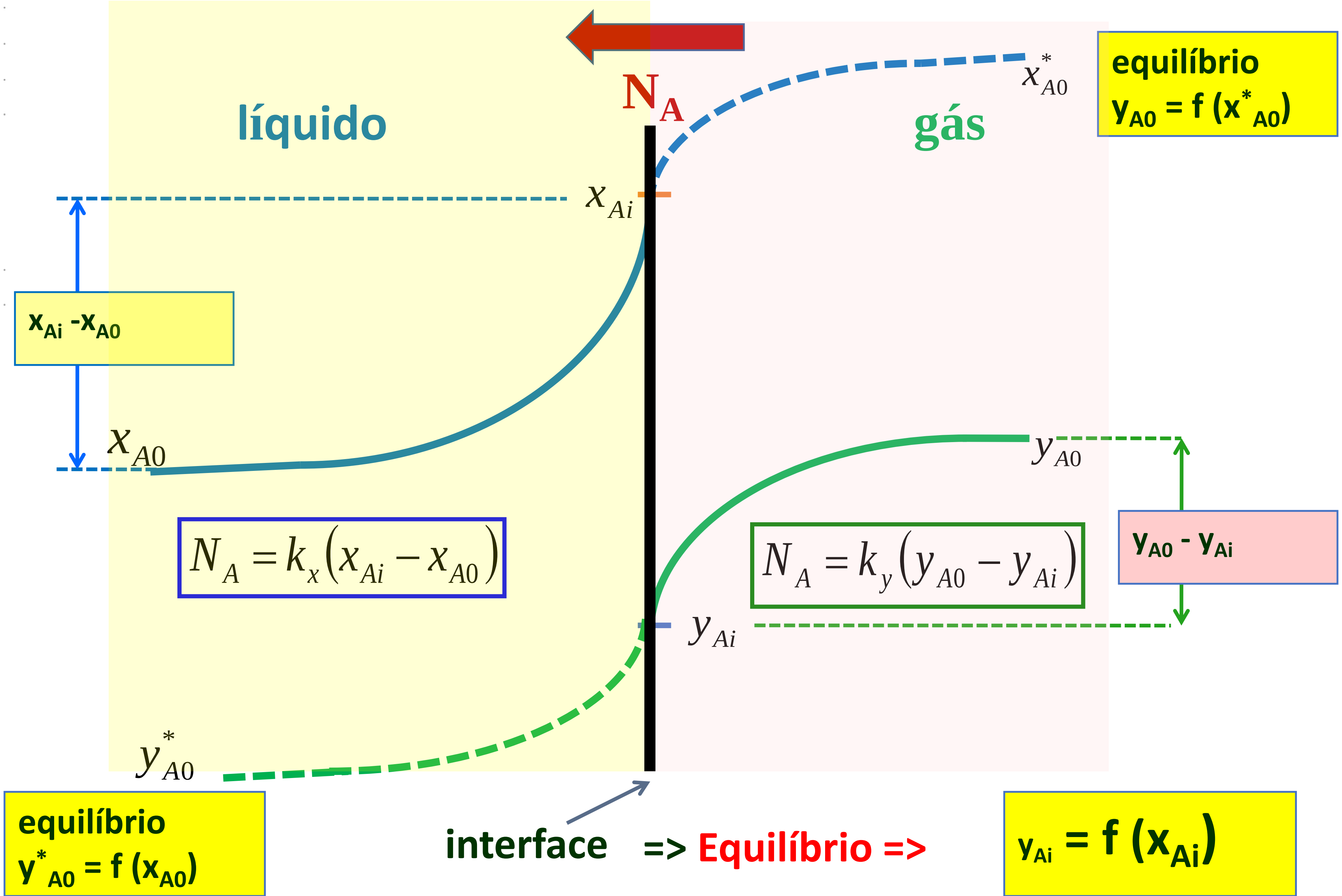


equilíbrio
$y_{A0} = f\,(x^*_{A0})$

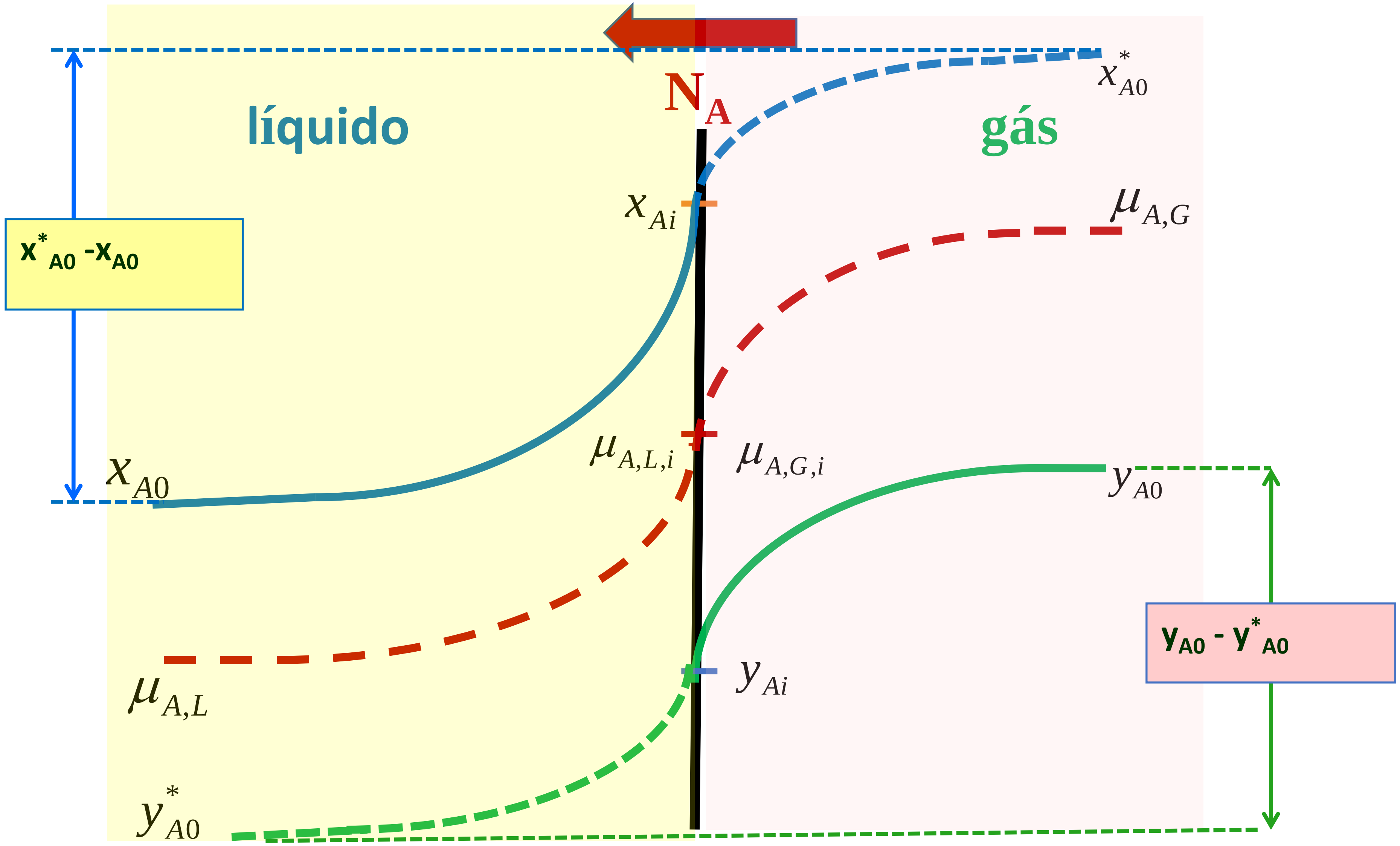
equilíbrio
$y^*_{A0} = f\,(x_{A0})$

interface => Equilíbrio => $y_{Ai} = f\,(x_{Ai})$

Interface – Coeficientes de T. de Massa



Interface – Coeficientes de T. de Massa



$$N_A = K_x\left(x^*_{A0} - x_{A0}\right) = K_y\left(y_{A0} - y^*_{A0}\right)$$

$$N_A = k_x\left(x_{Ai} - x_{A0}\right) = k_y\left(y_{A0} - y_{Ai}\right)$$

Coeficiente Global de Transporte de Massa

$$\left(\mu_{A0,G}-\mu_{A0,L}\right)=\left(\mu_{A0,G}-\mu_{Ai,G}\right)+\left(\mu_{Ai,L}-\mu_{A0,L}\right)$$

$$\left(y_{A0}-y^*_{A0}\right)=\left(y_{A0}-y_{Ai}\right)+\left(\underbrace{mx_{Ai}}_{y_{Ai}}-\underbrace{mx_{A0}}_{y^*_{A0}}\right)$$

$$\left(y_{A0}-y^*_{A0}\right)=\left(y_{A0}-y_{Ai}\right)+m\left(x_{Ai}-x_{A0}\right)$$

$$\left(y_{A0}-y^*_{A0}\right)=\frac{N_A}{k_y}+m\frac{N_A}{k_x}$$

$$\boxed{N_A=K_y\left(y_{A0}-y^*_{A0}\right)}\qquad\boxed{\frac{1}{K_{\tilde{y}}}=\frac{1}{k_{\tilde{y}}}+\frac{m}{k_{\tilde{x}}}}$$

$$\boxed{N_A=K_x\left(x^*_{A0}-x_{A0}\right)}\qquad\boxed{\frac{1}{K_{\tilde{x}}}=\frac{1}{mk_{\tilde{y}}}+\frac{1}{k_{\tilde{x}}}}$$

Equilíbrio

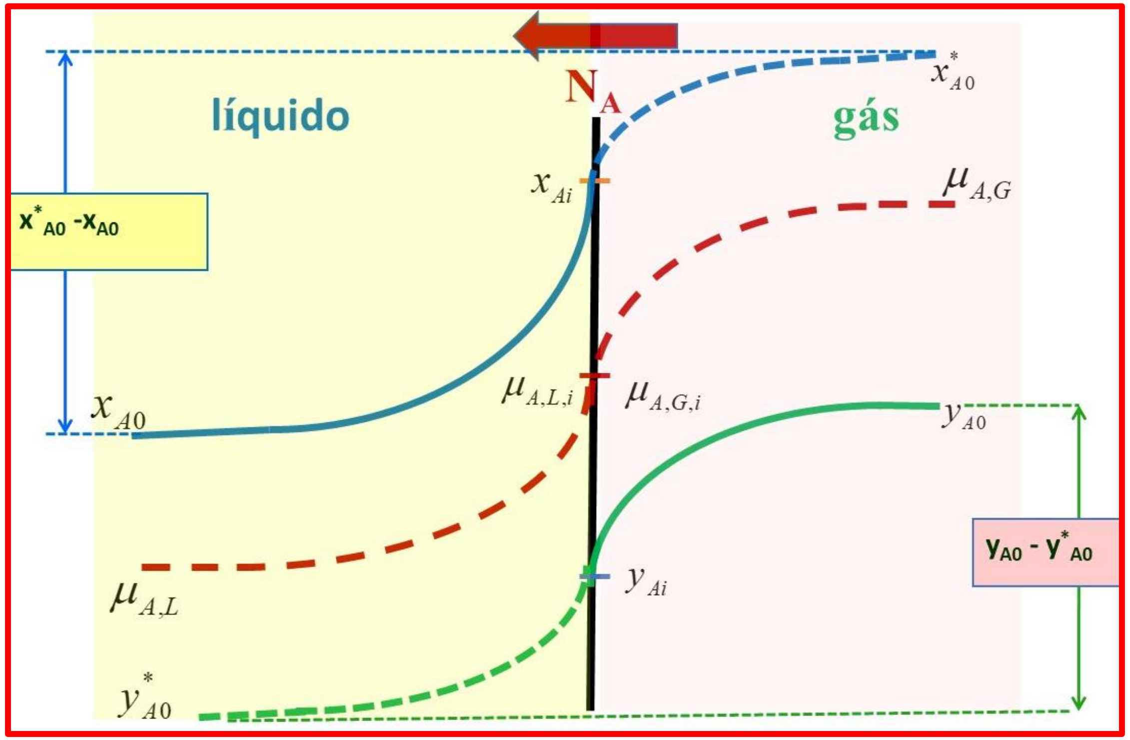
$$\boxed{\mu_{Ai,G}=\mu_{Ai,L}}$$

$$\boxed{y_{Ai}=mx_{Ai}}$$

Fluxos

$$\boxed{N_A=k_y\left(y_{A0}-y_{Ai}\right)}$$

$$\boxed{N_A=k_x\left(x_{Ai}-x_{A0}\right)}$$



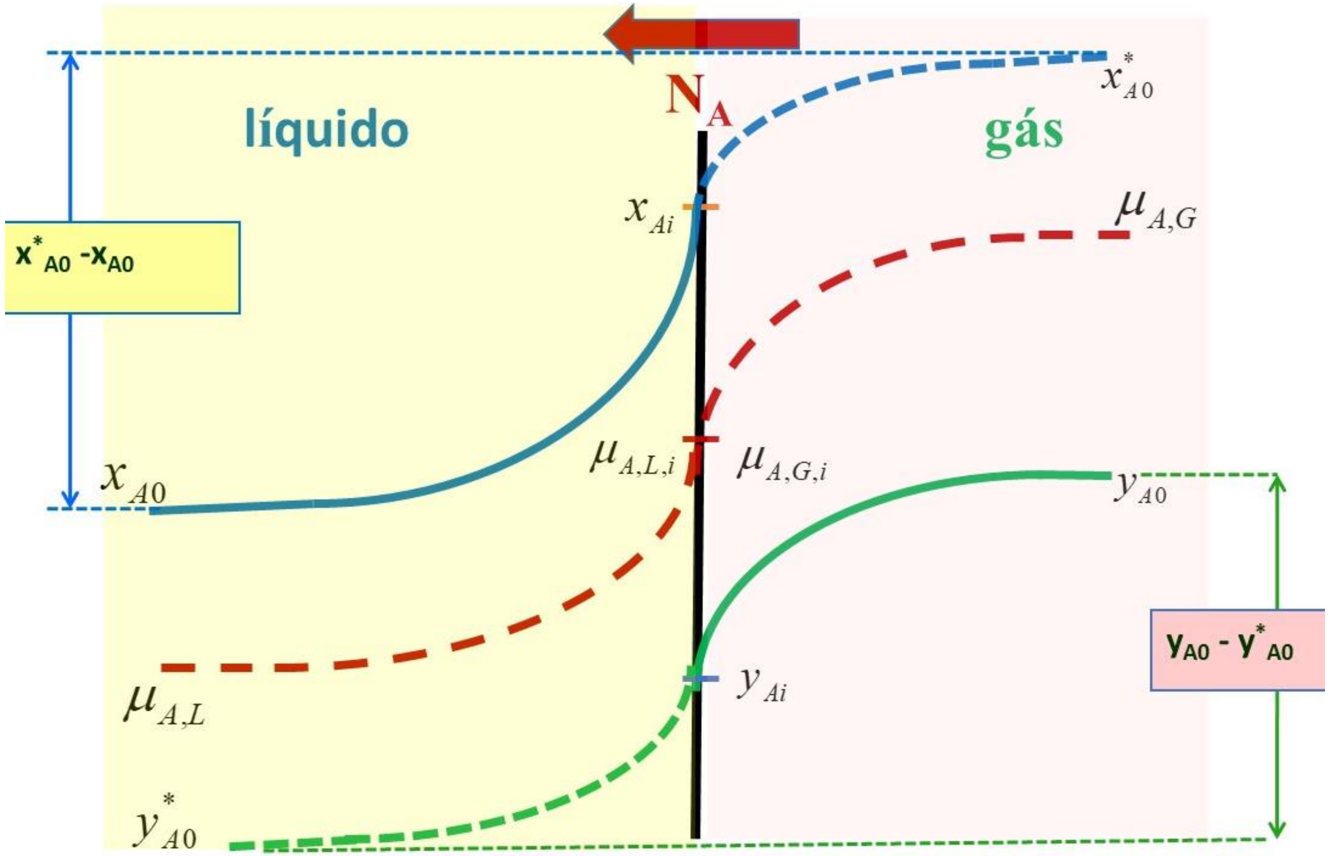
5.Coeficiente Global de Transporte de Massa

- Na interface: condição de equilíbrio (gás-líquido)

$$P_{Ai} = H_A \tilde{x}_{Ai}$$

$$\tilde{y}_{Ai} = \frac{H_A}{P} \tilde{x}_{Ai}$$

$$\tilde{y}_{Ai} = m \tilde{x}_{Ai}$$



Bibliografia

- Recomenda-se o artigo publicado na Regeq (): Coeficientes Convectivos De Transporte De Massa - de autoria do Prof. Wilson Miguel Salvagnini.