PQI –3303 – Fenômenos de Transporte III – 2016

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA DA EPUSP

Analogias para deteminação de Coeficientes Convectivos de Transporte de Massa

As equações de conservação estudadas nos Fenômenos de Transporte podem ser expressas na forma adimensionalizada.

Através da adimensionalização pode-se expressar os números adimensionais característicos, fundamentais na elaboração e generalização de correlações semi-empíricas para cálculo de coeficientes convectivos de transporte de calor e massa.

A aplicação da fluidodinâmica computacional (CFD), no estudo dos Fenômenos de Transporte, também utiliza as equações na sua forma generalizada, inclusive com modelos implícitos dependentes de alguns adimensionais.

1. Equação de Conservação Generalizada

$$\rho\frac{D\varphi}{Dt}=\frac{\partial\rho\varphi}{\partial t}+\mathrm{div}\,\rho\vec{v}\varphi=-\mathrm{div}\,\vec{j}_\Phi+\dot{\sigma}_{\forall_\Phi}$$

$$\frac{\partial\rho\varphi}{\partial t}+\mathrm{div}\left(\rho\vec{v}\varphi+\vec{j}_\Phi\right)=\dot{\sigma}_{\forall_\Phi} \qquad (1)$$

Substituindo-se a equação constitutiva da difusão, na sua forma genérica (Γ_φ = difusividade referente à propriedade φ):

$$\vec{j}_\Phi=-\rho\,\Gamma_\varphi\,\mathrm{gr\vec{a}d}\;\varphi \qquad (2)$$

na equação de conservação (4), tem-se:

$$\frac{\partial\rho\varphi}{\partial t}+\mathrm{div}\left(\rho\,\vec{v}\varphi-\rho\,\Gamma_\varphi\mathrm{grad}\;\varphi\right)=\dot{\sigma}_{\forall_\Phi}$$

$$\frac{\partial\rho\varphi}{\partial t}+\mathrm{div}\,\rho\left(\vec{v}\varphi-\Gamma_\varphi\mathrm{grad}\;\varphi\right)=\dot{\sigma}_{\forall_\Phi} \qquad (3)$$

O termo convectivo/difusivo, $\rho\left(\vec{v}\varphi-\Gamma_\varphi\mathrm{grad}\;\varphi\right)$, expressa na fronteira de um volume de controle, o fluxo de transporte da propriedade φ. NO caso de transporte de massa é expresso pelo fluxo de calor, no transporte de massa pelo fluxo total $\vec{n}_A$.

A tabela 1 apresenta as variáveis usualmente utilizadas nos FT's, as propriedades de transporte – difusividades – e os respectivos adimensionais.

Para a relação entre a difusividade Γ_φ da propriedade ϕ e difusividade de quantidade de movimento ν, tem-se :

Número de Prandtl, $\boxed{Pr = \dfrac{\nu}{\alpha}}$ (4)

onde: $\alpha = \dfrac{k}{\rho Cp}$

Número de Schmidt, $\boxed{Sc = \dfrac{\nu}{D_{AB}}}$ (5)

Tabela 1. Propriedades de transporte e adimensionais

Φ	Γ_φ	ν/Γ_φ
$\vec{v}$	ν	1
w_A	D_{AB}	Sc
c_pT	α	Pr

A equação (3) representa uma importante generalização, e pode, dependendo das condições de contorno, fornecer a mesma solução para propriedade φ, particularmente no caso Sc = Pr = 1 (que é uma boa aproximação para muitos gases).

2. Adimensionalização da Equação de Conservação Generalizada

Adimensionalizando-se as variáveis, tem-se:

$$\hat{\rho} = \frac{\rho}{\rho_0} \quad ; \quad \hat{\vec{v}} = \frac{\vec{v}}{v_0} \quad ; \quad \hat{\vec{r}} = \frac{\vec{r}}{L}; \quad \hat{t} = \frac{t}{t_0} \ ; \ \hat{\varphi} = \frac{\varphi - \varphi_0}{\Delta\varphi} = \frac{\varphi - \varphi_0}{\varphi_S - \varphi_0} \ ; \Rightarrow$$

$$\rho = \rho_0\,\hat{\rho} \quad ; \quad \vec{v} = v_0\,\hat{\vec{v}} \ ; \ \vec{r} = L\,\hat{\vec{r}} \ ; \quad t = t_0\,\hat{t} \quad ; \quad \varphi = \hat{\varphi}\,\Delta\varphi + \varphi_0$$

sendo ρ_0, v_0, L e t_0 parâmetros característicos (com valores constantes) do fenômenos em estudo.

Observa-se que os operadores **grad**, div e lap também são adimensionalizados:

$$\hat{\vec{\mathrm{grad}}} = L\,\vec{\mathrm{grad}} \quad ; \quad \hat{\mathrm{div}} = L\,\mathrm{div} \quad ; \ \hat{\mathrm{lap}} = \hat{\mathrm{div}}\,\hat{\vec{\mathrm{grad}}} = L^2\,\mathrm{lap}$$

Substituindo-se as variáveis adimensionalizadas na equação (3), tem-se:

$$\frac{1}{t_0}\frac{\partial \rho_0\,\hat{\rho}(\hat{\varphi}\Delta\varphi + \varphi_0)}{\partial \hat{t}} + \frac{1}{L}\hat{\mathrm{div}}\,\hat{\rho}\left(\rho_0 v_0\,\hat{\vec{v}}(\hat{\varphi}\Delta\varphi + \varphi_0) - \frac{\rho_0}{L}\Gamma_\varphi \hat{\mathrm{grad}}\,(\hat{\varphi}\Delta\varphi + \varphi_0)\right) = \dot{\sigma}_{\forall_\Phi}$$

$$\frac{\rho_0}{t_0}\left[\frac{\partial(\hat{\rho}\,\hat{\varphi}\Delta\varphi)}{\partial \hat{t}} + \frac{\partial \hat{\rho}\,\varphi_0}{\partial \hat{t}}\right] + \frac{\rho_0 v_0}{L}\hat{\mathrm{div}}\,\hat{\rho}\left(\hat{\vec{v}}(\hat{\varphi}\Delta\varphi + \varphi_0) - \frac{1}{v_0 L}\Gamma_\varphi \hat{\mathrm{grad}}\,(\hat{\varphi}\Delta\varphi + \varphi_0)\right) = \dot{\sigma}_{\forall_\Phi}$$

$$\frac{\rho_0}{t_0}\left[\Delta\varphi\frac{\partial(\hat{\rho}\hat{\varphi})}{\partial\hat{t}}+\varphi_0\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial\hat{t}}\right]+\frac{\rho_0 v_0}{L}\left[\Delta\varphi \hat{\mathrm{div}}\left(\hat{\rho}\hat{\vec{v}}\hat{\varphi}\right)+\varphi_0 \hat{\mathrm{div}}\left(\hat{\rho}\hat{\vec{v}}\right)-\hat{\mathrm{div}}\,\hat{\rho}\left(\frac{\Delta\varphi}{v_0 L}\Gamma_\varphi \hat{\mathrm{grad}}\,\hat{\varphi}\right)\right]=\dot{\sigma}_{\forall_\Phi}$$

Reagrupando-se os termos, resulta:

$$\varphi_0\frac{\rho_0 v_0}{L}\underbrace{\left[\frac{L}{t_0 v_0}\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial\hat{t}}+\hat{\mathrm{div}}\left(\hat{\rho}\hat{\vec{v}}\right)\right]}_{=0\text{ , continuidade}}+\frac{\rho_0\Delta\varphi}{t_0}\frac{\partial(\hat{\rho}\hat{\varphi})}{\partial\hat{t}}+\frac{\rho_0 v_0\Delta\varphi}{L}\left[\hat{\mathrm{div}}\left(\hat{\rho}\hat{\vec{v}}\hat{\varphi}\right)-\hat{\mathrm{div}}\,\hat{\rho}\left(\frac{\Gamma_\varphi}{v_0 L}\hat{\mathrm{grad}}\,\hat{\varphi}\right)\right]=\dot{\sigma}_{\forall_\Phi}$$

$$\frac{L}{v_0\, t_0}\frac{\partial(\hat{\rho}\hat{\varphi})}{\partial\hat{t}}+\hat{\mathrm{div}}\,\hat{\rho}\left(\hat{\vec{v}}\hat{\varphi}-\frac{\Gamma_\varphi}{v_0 L}\hat{\mathrm{grad}}\,\hat{\varphi}\right)=\frac{\dot{\sigma}_{\forall_\Phi}L}{\rho_0 v_0\Delta\varphi}$$

obtendo-se:

$$\boxed{\frac{1}{Sr}\frac{\partial\hat{\rho}\hat{\varphi}}{\partial\hat{t}}+\mathrm{div}\,\hat{\rho}\left(\hat{\vec{v}}\,\hat{\varphi}-\frac{1}{Pe}\hat{\mathrm{grad}}\,\hat{\varphi}\right)=\frac{\dot{\sigma}_{\forall_\Phi}L}{\rho_0\,\Delta\varphi\, v_0}} \qquad (6)$$

Define-se o número de Strouhal : $\boxed{Sr=\frac{t_0 v_0}{L}}$ (7)

e o número de <u>Peclet</u>:

$$\boxed{Pe=\frac{v_0 L}{\Gamma_\varphi}=\frac{\nu}{\Gamma_\varphi}\frac{v_0 L}{\nu}=Re\frac{\nu}{\Gamma_\varphi}} \qquad (8)$$

No caso de Pe >> 1, o termo difusivo de equação (6) pode ser desprezado em relação ao convectivo, facilitando-se, assim, a resolução das equações.

As equações de conservação (6) são, a rigor, aplicadas a uma única fase e a sua solução fica limitada pelas condições de contorno, definidas nas fronteiras(entradas, saídas, interfaces e/ou paredes) do volume de controle.

3. Adimensionalização da Equação de Continuidade para espécie A.

Adotando-se como medida de concentração de uma espécie química (A) a fração mássica ω_A , tem-se $\varphi = \omega_A$. Substituindo-se na equação (6), tem-se:

$$\frac{1}{Sr}\frac{\partial\hat{\rho}\,\hat{\omega}_A}{\partial\hat{t}}+\mathrm{di}\hat{\mathrm{v}}\,\hat{\rho}\left(\hat{\vec{v}}\,\hat{\omega}_A-\frac{1}{Pe}\hat{\mathrm{grad}}\,\hat{\omega}_A\right)=\frac{r_A L}{\rho_0\,\Delta\omega_A\, v_0} \qquad (9)$$

No caso: Pe = ReSc e $\dot{\sigma}_{\forall W}=r_A$ = velocidade das reações de (produão/consumo) da espécie A.

Identifica-se o último termo como número de Damköhler1, que expressa a razão entre o tempo característico de convecção, $t_C = \frac{L}{v_0}$, e o tempo característico de reação, $t_R = \frac{\rho_0\, \Delta\omega_A}{r_A}$.

$$\boxed{Da_1 = \text{Damköhler}_1 = \frac{r_A L}{\rho_0\, \Delta\omega_A\, v_0} = \frac{t_C}{t_R}} \tag{10}$$

Assim, a equação de (9) pode ser expressa por:

$$\boxed{\frac{1}{Sr}\frac{\partial \hat{\rho}\,\hat{\omega}_A}{\partial \hat{t}} + \text{di}\hat{\text{v}}\,\hat{\rho}\left(\hat{\vec{v}}\,\hat{\omega}_A - \frac{1}{Pe}\,\text{grâd}\ \hat{\omega}_A \right) = Da_1} \tag{11}$$

Uma outra forma de expressar a equação (4) é pela multiplicação da equação (9) pelo número de Peclet:

$$\frac{Pe}{Sr}\frac{\partial \hat{\rho}\,\hat{\omega}_A}{\partial \hat{t}} + \text{dîv}\,\hat{\rho}\left(Pe\ \hat{\vec{v}}\,\hat{\omega}_A - \text{grâd}\ \hat{\omega}_A\right) = \frac{r_A L}{\rho_0\, \Delta\omega_A\, v_0}\,\frac{v_0\, L}{D_{AB}} \tag{12}$$

Identifica-se o último termo como número de Damköhler2, que expressa a razão entre o tempo característico de difusão, $t_D = \frac{L^2}{D_{AB}}$, e o tempo característico de reação, $t_R = \frac{\rho_0\, \Delta\omega_A}{r_A}$.

$$\boxed{Da_2 = \text{Damköhler2} = \frac{r_A\, L^2}{\rho_0\, \Delta\omega_A D_{AB}} = \frac{t_D}{t_R}} \tag{13}$$

Assim, a equação (12) pode ser expressa por:

$$\boxed{\frac{Pe}{Sr}\frac{\partial \hat{\rho}\,\hat{\omega}_A}{\partial \hat{t}} + \text{dîv}\,\hat{\rho}\left(Pe\ \hat{\vec{v}}\,\hat{\omega}_A - \text{grâd}\ \hat{\omega}_A\right) = Da_2} \tag{14}$$

4. Resolução das Equações e Analogias

Muitas simplificações são necessárias para a resolução das equações de conservação apresentadas, principalmente no caso de escoamentos turbulentos.

Usualmente, nos cálculos de engenharia, empregam-se os coeficientes convectivos de transporte de calor, massa e quantidade de movimento (h ,k e f), para o cálculo dos respectivos fluxos.

Estes coeficientes são definidos nas interfaces/paredes e possibilitam o cálculo do fluxo de transporte global da propriedade φ (transporte devido ao escoamento e difusão).

Geralmente são baseados em correlações semi-empíricas, apresentadas na forma dos seguintes números adimensionais: *f* – fator de atrito -, *Nu* – Nusselt, *St* - Stanton -, *Sh* – Sherwood – e St_i – Stanton para massa.

$$\frac{1}{\mathrm{Sr}}\frac{\partial\hat{\rho}\hat{\varphi}}{\partial\hat{t}}+\mathrm{div}\,\hat{\rho}\underbrace{\left(\hat{\vec{v}}\,\hat{\varphi}-\frac{1}{\mathrm{Pe}}\,\mathrm{gr\hat{a}d}\;\hat{\varphi}\right)}_{\substack{\text{coeficiente convectivo}\\ (\text{escoamento}+\text{difusão})}}=\frac{\dot{\sigma}_{\forall_\Phi}\,L}{\rho_0\,\Delta\varphi\,v_0} \tag{15}$$

Os adimensionais Nu, para transferência de calor, e Sh, para transporte de massa, representam os gradientes adimensionalisados das respectivas propriedades φ’s na parede/interface:

$$\boxed{Nu=\left(gr\hat{\vec{a}}d\;\hat{T}\right)_{\hat{r}=0}} \quad \boxed{f=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left(gr\hat{\vec{a}}d\;\hat{v}\right)_{\hat{r}=0}} \quad \boxed{Sh=\left(gr\hat{\vec{a}}d\;\hat{w}_i\right)_{\hat{r}=0}} \tag{16}$$

Os números de Stanton são expressos pelas equações:

$$\boxed{St=\frac{Nu}{Pe}=\frac{Nu}{\mathrm{Re}.\mathrm{Pr}}} \quad \boxed{St_i=\frac{Sh}{Pe}=\frac{Sh}{\mathrm{Re}.Sc}} \tag{17}$$

As equações adimensionalizadas (15) e (16) ilustram o porquê das correlações em função dos adimensionais Re, Pr, Sc, Pe, Nu, Sh,St, f etc.. típicas de engenharia.