PQI – 3303 – Fenômenos de Transporte III – 2020
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA DA EPUSP

Modelos Para os Coeficientes Convectivos de Transporte de Massa

Correlações para o cálculo de coeficientes de transporte de massa são obtidas da analogia direta com os fenômenos de transferência de calor, principalmente no caso do escoamento turbulento.

1. Escoamento Turbulento

O estudo dos escoamentos turbulentos é efetuado com base nos Modelos de Turbulência desenvolvidos na Mecânica dos Fluidos.

Os mecanismos moleculares (difusivos) e os associados à turbulência (p. e. difusividade turbilhonar) definem o transporte de massa em superfícies e interfaces.

Analisemos o chamado perfil de velocidades universal, no caso do escoamento praticamente paralelo e próximo a uma parede fixa (vide figura 1). Subdivide-se a região em três zonas: a subcamada viscosa (ou laminar), localizada junto à parede, onde praticamente inexiste turbulência; a região turbulenta, distante da parede, onde predomina o transporte turbulento; e a zona de amortecimento, intermediária entre as duas anteriores, onde os dois mecanismos de transporte devem ser considerados.

Os fluxos de massa, calor e quantidade de movimento, na direção y, são expressos por:

$$
\begin{aligned}
n_A &= -(D_{AB} + \varepsilon_D)\frac{d\rho_A}{dy} \\
q'' &= -(\alpha + \varepsilon_H)\frac{d(\rho C_p T)}{dy} \\
\tau &= -(\nu + \varepsilon_V)\frac{d(\rho v)_x}{dy}
\end{aligned}
\qquad (1)
$$

onde ε_D , ε_H e ε_V são as difusividades turbilhonares.

As zonas são delimitadas pelos parâmetros adimensionais y^+ , e a velocidade u^+ , definidos por:

$$y^+ = \frac{u_0 y}{\nu} \qquad (2)$$

$$u^+ = \frac{v_x}{u_0} \qquad (3)$$

onde u_0 é a velocidade de atrito ("drift") , definida a partir da tensão de cisalhamento τ_0 na parede:

$$u_0 = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}} \qquad (4)$$

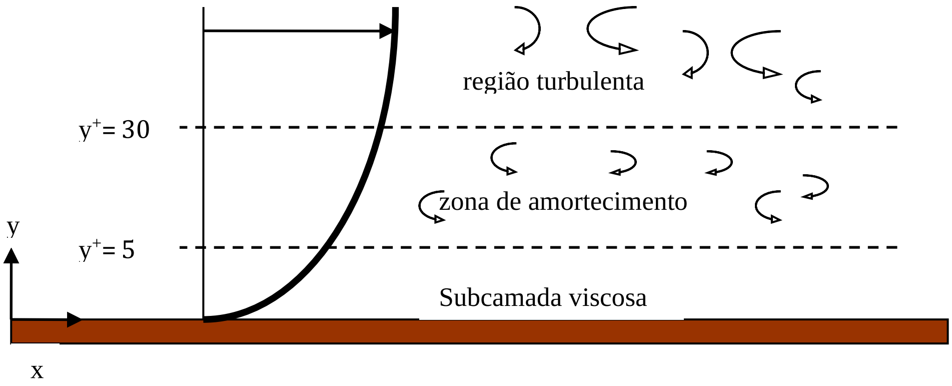

Figura 1 - Perfil de velocidades universal.

A tabela 1 apresenta as equações para o perfil de velocidades universal, para cada uma das zonas, segundo von Kármán (1939).

Tabela 1 - Perfil de velocidades universal.

subcamada viscosa	$u^+ = y^+$	$0 \langle y^+ \langle 5$
zona de amortecimento	$u^+ = 5 \ln y^+ - 3{,}05$	$5 \langle y^+ \langle 30$
região turbulenta	$u^+ = 2{,}5 \ln y^+ + 5{,}5$	$y^+ \rangle 30$

As diferentes analogias, a seguir apresentadas, foram desenvolvidas com base na interpretação do perfil de velocidade universal.

2. Analogias

2.1 Analogia de Reynolds

Trata-se de modelo desenvolvido com base experimental, no qual Reynolds considerou a turbulência como o único mecanismo determinante dos transportes de calor, massa e quantidade de movimento.

Considere o escoamento de um fluido no interior de um tubo, de diâmetro D, em regime turbulento, e com transporte de massa. A velocidade média de escoamento é V, a fração mássica do constituinte A no seio do fluido é x_A e na parede x_{AS} (constante). Especificam-se os seguintes fluxos macrocópicos de transporte de massa e quantidade de movimento:

A	$\mathbf{n_A}$	Fluxo de A na direção da parede
B	$\boldsymbol{\tau}$	Fluxo de quantidade de movimento na direção da parede
C	$\boldsymbol{\rho V (x_A - x_{AS})}$	Fluxo de A na direção do escomento
D	$\boldsymbol{\rho V (V - V_S)}$	Fluxo de quantidade de movimento na direção do escomento

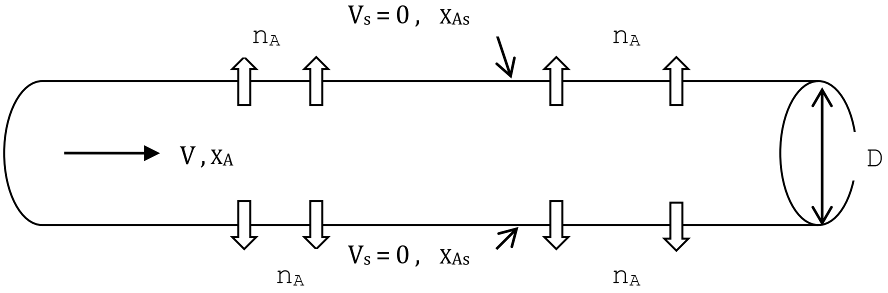

Figura 2 - Analogia de Reynolds

A analogia proposta por Reynolds é expressa pela relação:

$$\frac{A}{C} = \frac{B}{D} \Rightarrow \frac{n_A}{\rho V(x_A - x_{AS})} = \frac{\tau}{\rho V(V - V_S)} \qquad (5)$$

Das definições do coeficiente convectivo de transporte de massa e do fator de atrito, tem-se:

$$n_A = k_x(x_A - x_{AS}) \qquad (6)$$

$$\tau = \frac{f}{2}\rho V^2 \qquad (7)$$

Substituindo-se na equação (5), tem-se:

$$\frac{k_x(x_A - x_{AS})}{\rho V(x_A - x_{AS})} = \frac{f}{2} \Rightarrow k_x = \frac{f}{2}\rho V \qquad (8)$$

A equação acima permite o cálculo do coeficiente convectivo de transporte de massa k_x, exclusivamente a partir do fator de atrito no escomento considerado! Analogamente, no caso do transporte de calor, tem-se:

$$h = \frac{f}{2}\rho C_P V \qquad (9)$$

Os resultados podem ser expressos em termos dos adimensionais de Stanton:

$$\begin{aligned} St &= \frac{k_x}{\rho V} = \frac{k_\rho}{V} = \frac{f}{2} \\ St &= \frac{h}{\rho C_p V} = \frac{f}{2} \end{aligned} \qquad (10)$$

Reescrevendo-se a analogia de Reynolds, sendo $k_x = k_\rho/\rho$, tem-se:

$$k_\rho = \frac{f}{2}V \Rightarrow k_\rho \frac{D}{D_{AB}} = \frac{f}{2}V\frac{D}{D_{AB}}\frac{\nu}{\nu} \Rightarrow \frac{k_\rho D}{D_{AB}} = \frac{f}{2}\frac{VD}{\nu}\frac{\nu}{D_{AB}}$$

$$\boxed{Sh = \frac{f}{2}Re\,Sc} \qquad (11)$$

A analogia de Reynolds é bastante adequada para situações onde Sc → 1.

2.2. Analogia de Prandtl – Taylor

Numa sofisticação da analogia de Reynolds, Prandtl considerou os mecanismos de transporte referentes à subcamada viscosa, definido pela difusão molecular, e a região turbulenta , segundo a analogia de Reynolds. A equação resultante é expressa por:

$$\boxed{\mathrm{Sh} = \frac{(\mathrm{f}/2)\mathrm{Re\,Sc}}{1+5\sqrt{f/2}\,(Sc-1))}} \qquad (12)$$

2.3. Analogia de Von Kármán

Von Kármán, por sua vez, estendeu a analogia de Prandtl, incluindo a zona de amortecimento no modelo, resultando na equação abaixo:

$$\boxed{\mathrm{Sh} = \frac{(\mathrm{f}/2)\mathrm{Re\,Sc}}{1+5\sqrt{f/2}\,\{Sc-1+\ln[(1+5Sc)/6]\}}} \qquad (13)$$

2.4. Analogia de Colburn

Colburn desenvolveu um analogia semi-empírica a partir da de Prandtl e de extensa compilação de dados experimentais de transferência de calor e massa. Esta analogia é bastante empregada para os casos de escomentos em tubos e placas. Sem dúvida, é a mais conhecida analogia para transferência de calor. Expressa-se em termos dos fatores j_H (p/ transferência de calor) e j_m (transferência de massa):

$$\boxed{\frac{\mathrm{Sh}}{\mathrm{Re\,Sc}^{1/3}} = j_M} \qquad \boxed{\frac{\mathrm{Nu}}{\mathrm{Re\,Pr}^{1/3}} = j_H} \qquad \boxed{j_H = j_M = \frac{f}{2}} \qquad (14)$$

$$\boxed{Sh = \frac{f}{2}\mathrm{Re\,Sc}^{1/3}} \qquad (15)$$

É interessante observar que para Sc -> 1 todas as analogias recaem na de Reynolds.

3. Modelos de para Coeficientes de Transporte de Massa

3.1. Modelo do Filme

No modelo do filme proposto por Lewis e Whitman (1929), assume-se a existência de um filme estagnado no meio estagnado, próximo à interface/superfície, no qual o transporte de massa ocorre por difusão. Fora do filme, no meio fluido, a concentração da espécie é admitida como constante.

Assim, da equação de conservação para o constituinte A, admitindo-se o filme estagnado, regime permanente, densidade constante, unidimensional e ausência de reação química, tem-se, na direção y:

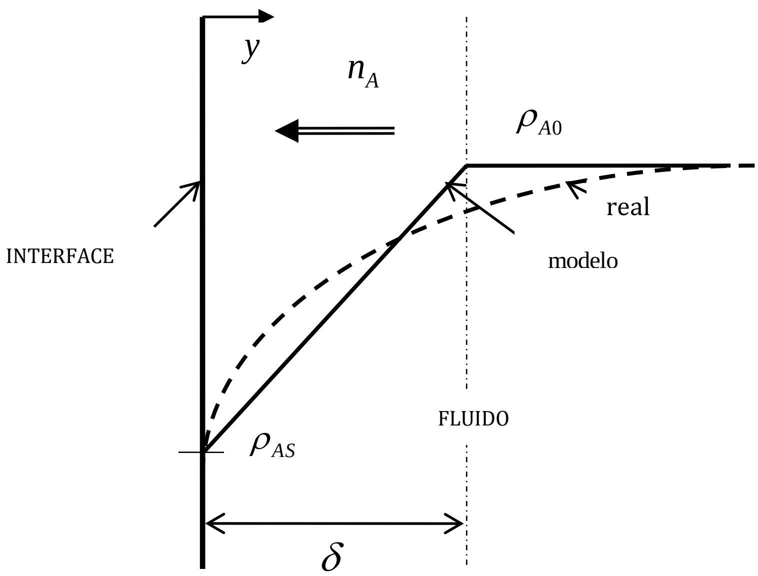

Figura 3 – Modelo do Filme

$$D_{AB}\frac{d^2\rho_A}{dy^2}=0 \tag{16}$$

E as condições de contorno são expressas por:

$$\begin{cases} y=0, & \rho_A=\rho_{AS} \\ y=\delta, & \rho_A=\rho_{A0} \end{cases}$$

O perfil de concentrações obtido da integração da equação (16) é expresso por:

$$\rho_A=\left(\frac{\rho_{A0}-\rho_{AS}}{\delta}\right)y+\rho_{AS} \tag{17}$$

No caso diluído:

$$n_A \cong j_A=-D_{AB}\left(\frac{d\rho_A}{dy}\right)_{y=0}=-D_{AB}\left(\frac{\rho_{A0}-\rho_{AS}}{\delta}\right) \tag{18}$$

da definição de k_ρ , $n_A=k_\rho(\rho_{A0}-\rho_{AS})$, resulta:

$$\boxed{k_\rho=\frac{D_{AB}}{\delta}} \tag{19}$$

A espessura do filme δ expressa a influência do escoamento no transporte de massa, mas não é determinado à priori. Este modelo, apesar de frágil do ponto de vista físico, é frequentemente empregado, principalmente no caso de alto transporte de massa e em sistemas com reação química.

3.2. Modelo de Higbie

Consideremos o processo de transferência de massa na fase líquida e na interface em contato com uma fase gasosa. O modelo Higbie (1935)- teoria da penetração - considera que pequenas porções do líquido são transportadas continuamente do seio do líquido para a interface, permanecendo em contato com a fase gás, durante um tempo, θ, no qual ocorre a transferência de massa por difusão, e depois são transportados para o seio do líquido.

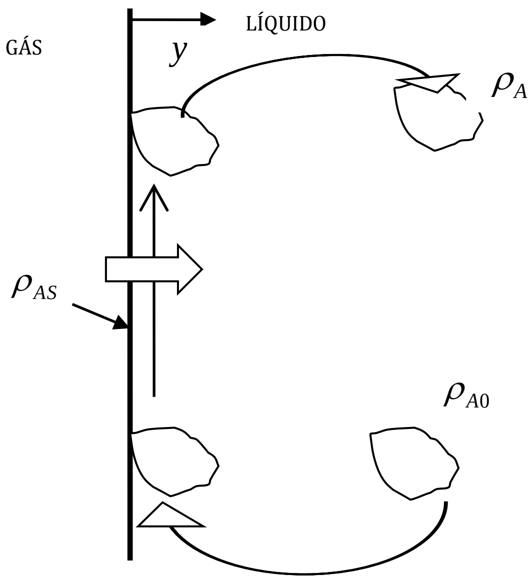

Figura 4 – Modelo de Higbie

Devido ao escoamento turbulento, o turbilhão deixa o meio líquido com concentração ρ_{A0} e atinge a superfície onde ocorre a difusão de A, cuja concentração na interface é ρ_{AS}. Decorrido o tempo de contato a porção de fluido retorna ao meio fluido com uma concentração média ρ_A. Equacionando-se esta descrição lagrangeana, tem-se para a porção de fluído:

$$\frac{D\rho_A}{Dt} = D_{AB}\frac{d^2\rho_A}{dy^2} \tag{20}$$

Com as seguintes condições de contorno e inicial:

$$\begin{cases} t = 0, & \rho_A = \rho_{A0} \\ t > 0 & \begin{cases} y = 0, & \rho_A = \rho_{AS} \\ y = \infty, & \rho_A = \rho_{A0} \end{cases} \end{cases}$$

A última condição é válida para o caso de baixo tempo de contato, o que de fato se observa na maioria dos casos.

Da integração da equação (20) resulta a seguinte expressão para o perfil de concentração:

$$\frac{\rho_{AS} - \rho_A}{\rho_{AS} - \rho_{A0}} = \operatorname{erf}\frac{y}{2\sqrt{t\,D_{AB}}} \tag{21}$$

Onde a função erf é definida por:

$$\operatorname{erf}\frac{y}{2\sqrt{t\,D_{AB}}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\frac{y}{2\sqrt{t\,D_{AB}}}} e^{-n^2}\,dn \tag{22}$$

Assim, para o fluxo de transporte de massa instantâneo na interface, no caso diluído, tem-se:

$$n_{A,\,y=0} \cong j_{A,y=0} = -D_{AB}\left(\frac{d\rho_A}{dy}\right)_{y=0} = \left(\rho_{AS} - \rho_{A0}\right)\sqrt{\frac{D_{AB}}{\pi\,t}} \tag{23}$$

O fluxo de transporte de massa médio é calculado, considerando-se o tempo de contato θ, pela equação:

$$\overline{n}_A = \frac{\int_0^\theta n_A\,dt}{\theta} = \frac{\left(\rho_{AS} - \rho_{A0}\right)}{\theta}\sqrt{\frac{D_{AB}}{\pi}}\int_0^\theta \frac{dt}{\sqrt{t}} = 2\left(\rho_{AS} - \rho_{A0}\right)\sqrt{\frac{D_{AB}}{\theta\,\pi}} \tag{24}$$

Resultando, para o coeficiente de transporte:

$$k_\rho = 2\sqrt{\frac{D_{AB}}{\theta\,\pi}} \tag{25}$$

O tempo de contato θ expressa a influência do escoamento no transporte de massa.

Comparando-se o modelo do filme e o de Higbie tem-se, respectivamente, $k_\rho \propto D_{AB}$ e $k_\rho \propto D_{AB}^{0,5}$. Experimentalmente observam-se resultados cujo expoentes da difusividade encontra-se entre os dois valores especificados.

O modelo de Higbie foi originalmente concebido para o transporte de massa de bolhas de gás em meio líquido, sendo o tempo de contato estimado com base no tempo decorrido para a bolha percorrer uma distância igual ao seu diâmetro.

3.3. Modelo de Danckwerts

Uma elegante sofisticação do modelo de Higbie foi proposta por Danckwerts em 1953, que sugeriu um modelo de renovação de superfície no qual propõe-se uma distribuição de idades para o tempo de contato de cada porção de líquido.

Neste modelo, admite-se que a probabilidade de uma porção deixar a superfície é independente do tempo no qual ela já está na mesma. A equação abaixo expressa o resultado para o coeficiente de transporte em função do parâmetro *s*, que é a fração da taxa de substituição da porção de líquido.

$$k_\rho = \sqrt{s\,D_{AB}} \qquad (26)$$

O expoente da difusividade é o mesmo que o do modelo de Higbie.