



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
Seminário do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química



V-OKTOBER FÓRUM – PPGEQ

17, 18 E 19 DE OUTUBRO DE 2006

## SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO FLUXO PERMEADO EM MICROFILTRAÇÃO COM ESCOAMENTO TANGENCIAL

**Cleiton B. Porciúncula, Isabel C. Tessaro, Lígia D.F. Marckzak**

Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)  
R. Eng. Luis Englert, s/n. Campus Central. CEP: 90040-040 - Porto Alegre - RS - BRASIL,  
E-MAIL: {cleiton, isabel, ligia}@enq.ufrgs.br

**Palavras Chaves:** microfiltração, simulação fluidodinâmica, membranas

**Resumo:** O estudo de processos de separação alternativos tem crescido em vários ramos da Engenharia Química com o propósito de buscar alternativas economicamente mais viáveis que as existentes e que, ao mesmo tempo, causem menor impacto ambiental. Dentre estes processos, o uso de membranas destaca-se graças às características de flexibilidade, menor gasto energético, maior facilidade no tratamento de substâncias termolábeis, aplicação nas mais diversas áreas do conhecimento (desde a própria engenharia até a Medicina), alta seletividade, dentre outras. Apesar de existir um grande número de trabalhos experimentais neste campo (notadamente da microfiltração), estudos na área de simulação de processos de separação envolvendo membranas encontram-se em número bem inferior quando comparados com aqueles. O objetivo deste trabalho é realizar a simulação hidrodinâmica de um processo de microfiltração em escoamento confinado com e sem obstáculos à passagem de fluido utilizando um pacote computacional comercial (CFX). Os resultados obtidos serão comparados com resultados experimentais e, também, com os resultados de simulações realizados por outros autores. Pretende-se assim obter uma compreensão melhor da dinâmica envolvida no escoamento neste tipo de processo de separação. Apesar da complexidade dos fenômenos envolvidos, resultados preliminares mostraram que esta ferramenta apresenta grande potencial para a simulação dos problemas propostos.

### 1 INTRODUÇÃO

A simulação numérica de diversos problemas de separação tem crescido rapidamente nos últimos anos, nas mais diversas aplicações. Apesar de relativamente recente, simulação de processos de separação com membranas tem mostrado um grande potencial de aplicação.

O objetivo deste trabalho é introduzir a aplicação da ferramenta CFD (Computational Fluid Dynamics) na simulação de processos de separação por membranas. O presente trabalho baseia-se na simulação de um processo de microfiltração tangencial, com e sem barreiras, realizado por

Rahimi et al. (2005). Este trabalho trata da simulação do escoamento nestes módulos, com vistas a prever e entender melhor o comportamento hidrodinâmico nos mesmos. Os autores também realizaram a parte experimental, comparando-a posteriormente com os resultados obtidos na simulação numérica. Os resultados obtidos pelos referidos autores via simulação ficaram próximos àqueles obtidos experimentalmente, demonstrando o potencial de aplicação da ferramenta CFD (Computational Fluid Dynamics).

Outros autores também realizaram estudos semelhantes: Kromkamp et al (2005) estudaram, além da hidrodinâmica, os efeitos da polarização



por concentração na microfiltração tangencial usando um modelo para a difusão das partículas, baseado num mecanismo de migração induzida por cisalhamento; Wiley e Fletcher (1999) estudaram os efeitos de propriedades constantes e variáveis (viscosidade e difusividade) comparando-os com modelos de paredes permeáveis, verificando uma grande discrepância entre os resultados simulados, com propriedades constantes em face àqueles com modelos conhecidos que levam em conta a variação das propriedades.

A modelagem e simulação de eletro-ultrafiltração de albumina de soro bovino (BSA) foram investigadas por Venkataraman *et al.* (2002). Neste estudo os autores consideraram a influência dos efeitos viscolétricos na ultrafiltração da proteína. A principal conclusão alcançada foi que a concentração de soluto na superfície da membrana decresce com o aumento da intensidade do campo elétrico aplicado, ocasionando um aumento do fluxo permeado.

O estudo da polarização de concentração na separação de hidrogênio e metano por meio da técnica de permeação de gases foi realizado por Takaba e Nakal (2005). A previsão do fator de separação por meio da técnica de CFD concordou com os fatores obtidos através de experimentação. Entretanto, isto só ocorreu para baixos valores de permeabilidade, onde se assume escoamento ideal. Para fatores de separação de hidrogênio mais elevados, a simulação previu valores menores que os experimentais, demonstrando a importância da consideração de uma dinâmica não-ideal de escoamento para a simulação da permeação de gases.

O coeficiente de transferência de massa na separação de tricloroetano da água por pervaporação foi investigado por Liu *et al.* (2005). O processo foi simulado com e sem a adição de *baffles* no canal de escoamento utilizando a técnica CFD (pacote comercial Fluent); os resultados indicaram que a presença destes obstáculos aumentava o coeficiente de transferência de massa, da mesma forma prevista pela teoria e pelos resultados experimentais. Todavia, os valores simulados tiveram certa discrepância com aqueles obtidos experimentalmente, sobretudo para os maiores valores do número de Reynolds, indicando a necessidade de estudos mais aprofundados sobre turbulência na pervaporação e sua influência no coeficiente de transferência de massa.

## 2 MATERIAIS E MÉTODOS

A microfiltração é um processo de separação com membranas, muito utilizado nos dias atuais, nos mais diversos ramos da indústria. Aplica-se a microfiltração na separação de partículas com distribuição de tamanho superior a 0,1  $\mu\text{m}$ , através de uma estrutura microporosa. A força motriz neste tipo de processo é o gradiente de potencial químico expresso em termos de gradiente de pressão através da membrana.

O fluxo de permeado é calculado com base na equação de Darcy, em termos de pressão transmembrana:

$$J = L_p \Delta P = \frac{\Delta P}{\mu(R_m + R_c)} \quad (1)$$

onde  $J$  é o fluxo de permeado, em  $\text{m}^3 \text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ,  $L_p$  é a permeabilidade hidráulica da membrana, em  $\text{m}^2 \text{s kg}^{-1}$ ,  $\mu$  é a viscosidade da solução em  $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ,  $R_m$  e  $R_c$  são as resistências da membrana e da camada limite, respectivamente, em  $\text{m}^{-1}$ , e  $\Delta P$  é a pressão transmembrana, em Pa.

Na ausência de um soluto, a resistência total à passagem do escoamento é devida unicamente à resistência imposta pela membrana,  $R_m$ . No processo de filtração de soluções que contém um ou mais solutos a resistência total aumenta devido ao surgimento da resistência da camada limite  $R_c$ , causada pelos fenômenos de polarização por concentração (acúmulo de soluto próximo à superfície da membrana), e *fouling* (interação membrana-soluto, adsorção bloqueio de poros e/ou deposição de soluto).

Neste trabalho, foram investigados apenas a hidrodinâmica na presença ou ausência de barreiras físicas ao escoamento de água deionizada, bem como os efeitos turbulentos associados, sem a presença de polarização ou *fouling*.

### 2.1 MODELAGEM MATEMÁTICA

Inúmeros modelos de turbulência têm sido propostos de forma a uma melhor compreensão deste fenômeno. Em princípio, apenas as equações de Navier-Stokes seriam suficientes para a modelagem e simulação da turbulência, através de simulação numérica direta. Entretanto, o poder de processamento computacional atual ainda está muito longe daquele necessário para tal aplicação, visto que as escalas envolvidas (principalmente



para valores elevados do número de Reynolds) são muito menores do que os menores elementos de volume já trabalhados em malhas muito refinadas. Desta forma, são propostas equações adicionais, as quais juntamente com as equações do movimento permitem a captação da turbulência envolvida nos escoamentos. Estas equações são baseadas em considerações de flutuação de velocidades médias, modelos estatísticos e correlações algébricas semi-empíricas.

Um dos modelos de turbulência mais amplamente difundidos é o modelo de duas equações  $k$ - $\varepsilon$ , proposto por Launder e Spalding (1974). Este modelo baseia-se na resolução de dois termos: a energia cinética turbulenta ( $k$ , em  $m^2 \cdot s^{-2}$ ) e pela dissipação turbulenta ( $\varepsilon$ , em  $m^2 \cdot s^{-3}$ ). A energia cinética turbulenta representa a variância das flutuações de velocidade, ao passo que a dissipação turbulenta é a taxa na qual esta energia cinética é dissipada. Matematicamente este modelo é expresso pelas equações 2 e 3:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \varepsilon) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (3)$$

com

$$\mu_T = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4)$$

onde  $\mu_T$  é a viscosidade turbulenta, em  $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$ ,  $U$  é o vetor velocidade, em  $m \cdot s^{-1}$ ,  $C_\mu$ ,  $\sigma_k$ ,  $\sigma_\varepsilon$ ,  $C_{\varepsilon 1}$  e  $C_{\varepsilon 2}$  são constantes adimensionais do modelo de turbulência, ao passo que  $P_k$  em  $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-3}$ , representa a produção de turbulência devido às forças viscosas e de campo.

$P_k$  é dado pela seguinte equação:

$$P_k = \mu_T \nabla U \cdot (\nabla U + \nabla U^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot U (3\mu_T \nabla \cdot U + \rho k) + P_{kb} \quad (5)$$

Na Equação 5, o segundo termo representa a contribuição das forças viscosas, e o último termo,  $P_{kb}$ , representa a contribuição da força de campo para a produção de turbulência. Nas simulações realizadas, estes dois últimos termos não foram levados em consideração.

Para a simulação realizada neste trabalho, utilizou-se uma outra versão do modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$ , chamado RNG- $\kappa$ - $\varepsilon$ , o qual consiste na renormalização das equações de Navier-Stokes. As equações são as mesmas do modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$ , mas as constantes diferem da seguinte maneira:

$$C_{\varepsilon 1RNG} = 1,42 \cdot f_\eta \quad (6)$$

$$f_\eta = \frac{\eta \left( 1 - \frac{\eta}{4,38} \right)}{\left( 1 + \beta_{RNG} \eta^3 \right)} \quad (7)$$

$$\eta = \sqrt{\frac{P_k}{\rho C_{\mu RNG} \varepsilon}} \quad (8)$$

onde,  $C_{\varepsilon 1RNG}$ ,  $C_{\mu RNG}$ ,  $\beta_{RNG}$  e  $\eta$  são constantes do modelo RNG  $\kappa$ - $\varepsilon$ , da forma como estão implementadas no simulador (Ansys CFX 10.0).

## 2.2 SISTEMA DE MICROFILTRAÇÃO

Foram testados quatro tipos de configurações de módulo numa membrana de microfiltração com diâmetro de poro médio de  $0,22 \mu m$  e espessura de  $120 \mu m$ . A área delimitada pela membrana tem um comprimento de 8 cm e largura de 3 cm, perfazendo uma área de filtração de  $24 \text{ cm}^2$ , em módulos com as seguintes configurações: (a) célula sem barreira; (b) com barreiras trapezoidais grandes; (c) com barreiras trapezoidais pequenas e, (d) com barreiras íngremes dispostas em posições opostas conforme apresentado na Figura 1.

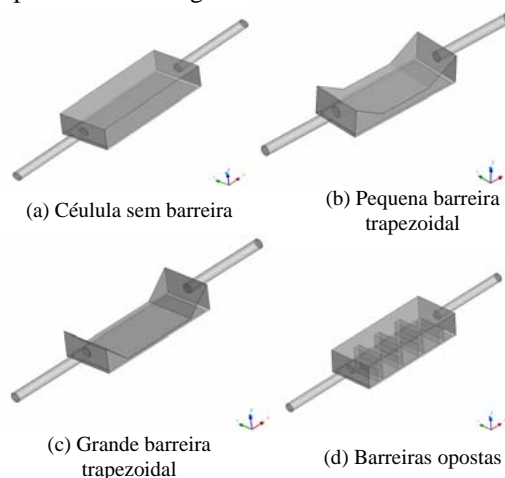


Figura 1 – Configurações do módulo de microfiltração



### 2.3 ESTRUTURA DA SIMULAÇÃO

A malha tridimensional contendo elementos tetraédricos de volume foi gerada, testando-se seis configurações de malha diferentes, de forma a verificar se os resultados eram afetados devido a diferentes números de elementos de volume. Este procedimento foi realizado apenas para o módulo sem barreira. A Tabela 1 resume cada configuração utilizada.

Tabela 1 – Configurações dos testes de malha

Teste	Número de tetraedros			
	Entrada	Saída	Membrana	Módulo
1	8490	8461	48460	48460
2	11533	11533	71017	119546
3	11794	11793	72576	128412
4	13643	13627	79364	137590
5	14073	14048	85378	153492
6	13510	13562	92751	159366

Para cada pressão transmembrana, foi avaliado o fluxo de permeado e os resultados comparados com os valores experimentais e de simulação obtidos pelos autores. Foram impostas condições de contorno de não deslizamento nas paredes do módulo, pressões na entrada e nas saídas de permeado e concentrado. Todas as simulações foram realizadas supondo-se estado estacionário.

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Tabela 2 apresenta os resultados obtidos para o fluxo de permeado médio na pressão transmembrana de 45,5 kPa, com os diferentes ajustes de malha descritos na Tabela 1.

Tabela 2 – Resultados do teste de malha para fluxo de permeado, em  $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$

Teste	Fluxo $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$	Varição em relação ao anterior (%)
1	349,8	-
2	348,0	0,5
3	347,7	0,1
4	348,8	0,3
5	348,3	0,2
6	347,7	0,2

O aumento de elementos de volume no módulo sem barreira não produziu alterações

significativas no fluxo de permeado médio, considerando-se este comportamento também nos outros módulos. As configurações do teste de malha 6 foram usadas para as simulações seguintes.

As Tabelas 3 a 6 mostram os resultados de fluxo de permeado médio de água deionizada, em  $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ , para cada pressão transmembrana, em kPa, e os desvios percentuais em relação aos valores experimentais e de CFD dos autores, e os desvios das simulações destes em relação aos seus próprios dados experimentais, para cada configuração de módulo utilizada

Tabela 3 – Fluxo de permeado para módulo sem barreira

$\Delta P$ kPa	Fluxo Permeado $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$			Desvios (%)		
	Exp.	CFD*	CFX	CFX-Exp	Exp-CFD*	CFX-CFD*
45,5	326	341	349,8	7,3	4,6	2,6
62,5	542	457	503,6	7,1	15,7	10,2
83,0	577	603	670,3	16,2	4,5	11,2
112,5	803	838	868,2	8,1	4,4	3,6
133,3	989	994	1037,9	4,9	0,5	4,4

\*Rahimi et al. (2005)

Tabela 4 – Fluxo de permeado para módulo com pequena barreira trapezoidal

$\Delta P$ kPa	Fluxo Permeado $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$			Desvios (%)		
	Exp.	CFD*	CFX	CFX-Exp	Exp-CFD*	CFX-CFD*
69,8	525	529	529,1	0,8	0,8	0,02
82,5	604	616	665,8	10,2	2,0	8,1
112,3	834	842	891,4	6,9	0,9	5,9
132	972	995	1026,2	5,6	2,4	3,1
141,3	1048	1059	1124,6	7,3	1,1	6,2

\*Rahimi et al. (2005)

Tabela 5 – Fluxo de permeado para módulo com grande barreira trapezoidal

$\Delta P$ kPa	Fluxo Permeado $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$			Desvios (%)		
	Exp	CFD*	CFX	CFX-Exp	Exp-CFD*	CFX-CFD*
44,3	326	334	337,5	3,5	2,5	1,0
60,3	415	449	474,2	14,3	8,2	5,6
81,3	567	607	636,3	12,2	7,1	4,8
100,3	699	749	791,5	13,2	7,2	5,7
120,8	850	903	951,7	11,9	6,2	5,4

\*Rahimi et al. (2005)



Tabela 6 – Fluxo de permeado para módulo com barreiras em posições opostas

$\Delta P$ kPa	Fluxo Permeado $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$			Desvios (%)		
	Exp.	CFD*	CFX	CFX-Exp	Exp-CFD*	CFX-CFD*
43,8	320	328	283,2	11,5	2,5	13,7
65,3	482	489	423,2	12,2	1,5	13,5
87,8	653	659	566,3	13,3	0,9	14,0
109,8	818	825	707,9	13,5	0,9	14,2
131,8	973	991	849,5	12,7	1,8	14,3
155,5	1142	1174	996,6	12,7	2,8	15,1

\*Rahimi et al. (2005)

O fluxo permeado médio resultante das simulações com CFX é maior do que o calculado por Rahimi et al. (2005) para o módulo sem barreira e para aqueles com barreiras trapezoidais pequenas e grandes. No módulo com barreiras em posições opostas, o valor do fluxo permeado médio calculado neste trabalho está sempre abaixo do valor calculado pelos autores e dos dados experimentais obtidos por eles. Os efeitos turbulentos provenientes de tais obstáculos podem ser os responsáveis pela obtenção de um fluxo permeado menor do que o esperado, provavelmente devido à presença de recirculação. A princípio, os resultados do CFX poderiam estar bem mais próximos dos resultados da simulação dos autores, visto que ambos usam o mesmo modelo de turbulência e as mesmas condições de contorno. É possível que a forma como as condições de contorno de pressão são aplicadas seja a responsável por estas diferenças encontradas nos resultados, já que o CFX permite que estas condições sejam aplicadas em mais de uma maneira.

As Figuras 2 a 5 mostram o resultado de distribuição de pressões sobre a superfície da membrana, para as diferentes configurações de módulo. Verifica-se que a presença de obstáculos ao escoamento nas Figuras 3, 4 e 5 afeta significativamente esta distribuição, a qual por sua vez afetará o fluxo de permeado. A presença de obstáculos causa um aumento súbito de pressão ao longo do módulo (e, portanto, uma diminuição na velocidade, já que a área de escoamento diminui), ocorrendo depois a recuperação de um perfil de pressões mais suave, correspondente à saída do obstáculo. A presença de mais barreiras conforme mostrado na Figura 5 leva a variações mais bruscas na distribuição de pressões sobre a membrana, o

que acarreta também na distribuição de fluxo permeado através dela. Os outros perfis de pressão expressos nas Figuras 3 e 4 se apresentam de maneira semelhante entre si e semelhantes também aos perfis do módulo sem barreiras, na Figura 2, ocorrendo apenas uma distribuição mais brusca à medida que se adicionam obstáculos ao escoamento, caracterizando a presença da turbulência.

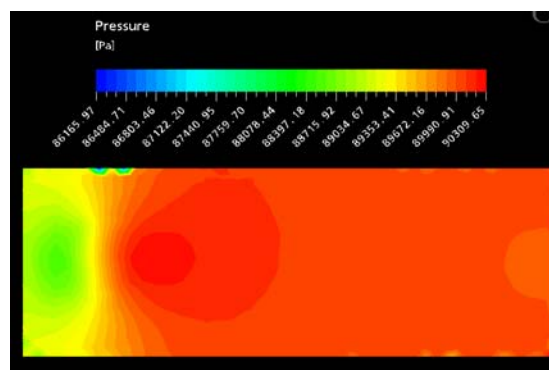


Figura 2 – Distribuição de pressões. Módulo sem barreiras –  $\Delta P=83kPa$

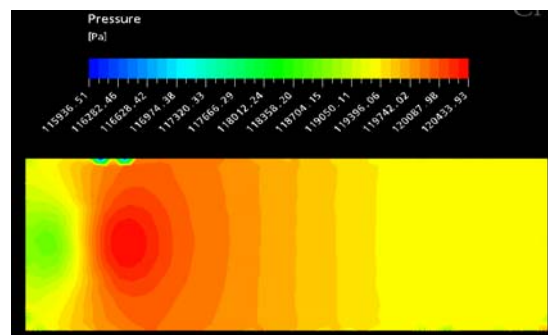


Figura 3 – Distribuição de pressões. Pequena barreira –  $\Delta P=112,25kPa$

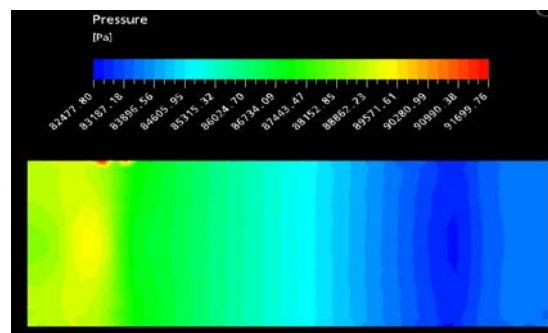


Figura 4 – Distribuição de pressões Grande barreira –  $\Delta P=81,25kPa$

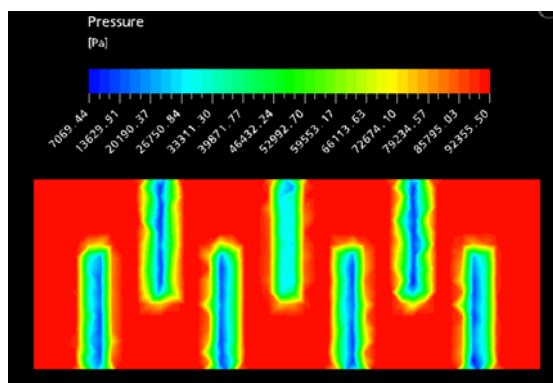


Figura 5 – Distribuição de pressões  
Obstáculos opostos –  $\Delta P=87,75\text{kPa}$

#### 4 CONCLUSÕES

A ferramenta utilizada possui um grande potencial para a simulação de processos de separação com membranas, visto que os resultados obtidos apresentaram uma boa previsão do comportamento real. Entretanto, estudos mais aprofundados usando outros modelos de turbulência são necessários, de forma a verificar como o sistema se comporta para cada caso.

As distribuições de pressão sobre a superfície da membrana mostram que a presença de barreiras ao escoamento provoca uma queda de pressão ao longo da estrutura, mas com uma pequena recuperação próxima à seção de saída. Estas distribuições dependem fortemente do campo de escoamento (e conforme mostrado, da geometria do módulo). Elas afetam diretamente o fluxo de permeado, já que a presença dos obstáculos gera efeitos turbulentos que podem ajudar na minimização da camada limite polarizada e do *fouling*. Estudos envolvendo a microfiltração de um componente, e não somente o escoamento de água pura, podem esclarecer melhor este comportamento.

#### REFERÊNCIAS

ANSYS® CFX 5.7.1 MANUAL. Particle Transport Theory, p. 162-163, Turbulence and Wall Function Theory, p.65-66, Flow in Porous Media, p.56-58.

KROMKAMP, J et al. A suspension flow model for hydrodynamics and concentration polarization in cross flow microfiltration. **Journal of Membrane Science**, v.253, p.67-79, maio/2005.

LAUNDER, B.E.; SPALDING, D.B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.3, p.269-289, março/1974.

LIU, Sean X.; PENG, M.; VANE, L. CFD simulation of effect of baffle on mass transfer in a slit-type pervaporation module. **Journal of Membrane Science**, v.265, p.124-136, novembro/2005.

LIU, Sean X.; PENG, M.; VANE, L. CFD modeling of pervaporative mass transfer in the boundary layer. **Chemical Engineering Science**, v.265, p.124-136, setembro/2004.

RAHIMI, M.; MADAENI, S.S.; ABBASI, K. CFD modeling of permeate flux in cross-flow microfiltration membrane. **Journal of Membrane Science**, v.59, p. 487-494, janeiro/2005.

TAKABA, H.; NAKAO S. Computational fluid dynamics study on concentration polarization in  $\text{H}_2/\text{CO}$  separation membranes. **Journal of Membrane Science**, v.249, p.5853-5857, março/2005.

VENKATARAMAN, K.; SUNANDO D.; SIRSHENDU D. Modeling and simulation of osmotic pressure controlled electro-ultrafiltration in a cross-flow system. **Journal of Membrane Science**, v.199, p.29-40, abril/2002.

WILEY, Dianne E.; FLETCHER, David. F. Techniques for computational fluid dynamics modeling of low in membrane channels. **Journal of Membrane Science**, v. 211, p. 127-137, março/1999.