

0649 –TM1

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA CAMADA POLARIZADA DE CONCENTRAÇÃO EM ESCOAMENTO LAMINAR ATRAVÉS DE MÓDULOS DE MEMBRANAS.

C.B.Porciúncula¹; I.C. Tessaro²; L.D.F. Marczak²

1- Departamento de Engenharia Química – Universidade Federal do Rio Grande do Sul
CEP: 90040-040 – Porto Alegre – RS – Brasil
Email: cleiton@enq.ufrgs.br
Telefone(053)9114-2135

2- Departamento de Engenharia Química – Universidade Federal do Rio Grande do Sul
CEP: 90040-040 – Porto Alegre – RS – Brasil
Telefone: (051) 3316-3315 – Fax: (051) 3316-3277 – Email: isabel,ligia@enq.ufrgs.br

RESUMO – Processos de separação envolvendo membranas têm sido uma alternativa na separação de diversos compostos, com aplicação em muitas áreas da engenharia, como tratamento de águas, indústria alimentícia, separação de gases e outras. Um dos problemas encontrados em tais processos é a diminuição do fluxo de permeado devido à formação de uma camada polarizada de concentração próxima à superfície da membrana, reduzindo a eficiência de separação. O objetivo deste trabalho é simular o fluxo de permeado usando um pacote de simulação fluidodinâmica computacional (CFX), baseado nas equações diferenciais de conservação de quantidade de movimento e massa, estudando inicialmente o escoamento laminar tangencial com propriedades constantes para um módulo com membrana plana sem espaçador. Os dados obtidos são comparados com dados experimentais de literatura, permitindo um melhor entendimento dos mecanismos envolvidos em tais processos.

PALAVRAS-CHAVE: membranas; polarização; simulação fluidodinâmica

ABSTRACT – Separation processes involving membranes have been an approach to the separations of several compounds with applications in many engineering areas such as water treatment, food industry and gas separation, among others. A common problem encountered in such processes is the reduction in the permeate flux due to formation of a concentration polarized layer near the membrane surface, decreasing the separation efficiency. The objective of this work is the simulation of the permeate flux with the aid of a computational fluid dynamics software (CFX), based on differential equations of mass and momentum, initially studying laminar cross flow with constant properties for non-spacer plane membrane module. The data obtained are compared with the ones from literature, allowing a better understanding about the mechanisms of these processes.

KEYWORDS: membranes; polarization; fluid dynamics simulation

1. INTRODUÇÃO

A crescente busca por alternativas de separação que sejam ao mesmo tempo economicamente viáveis e ambientalmente corretas tem tornado os processos de separação por membranas (PSM) uma rota promissora. Operações unitárias como destilação, extração com solventes, centrifugação, entre outras, possuem o inconveniente do alto custo energético envolvido, bem como a própria complexidade da operação inerente a cada área. A vantagem dos PSM é justamente sua simplicidade de operação, a economia energética envolvida (uma vez que não são necessárias mudanças de fase), alta seletividade e facilidade de *scale-up*.

Dois fatores são limitantes em processos envolvendo membranas: a polarização por concentração e o *fouling*. A polarização nada mais é do que uma camada limite de concentração formada próxima à superfície da membrana, ao passo que o *fouling* é a deposição de partículas sobre a superfície da membrana, penetrando ou sendo adsorvidas nos poros desta, diminuindo sua eficiência de separação. Tanto a camada polarizada quanto o *fouling* contribuem para a redução do fluxo de permeado. O uso de técnicas de simulação fluidodinâmica computacional (CFD) tem sido feito em algumas predições das características do escoamento bem como da camada limite de concentração em membranas.

Wiley e Fletcher (2003) realizaram simulações de escoamento em membrana com o intuito de comparar os diferentes valores obtidos desde a situação mais simples, com difusividade e viscosidade constantes, até a mais completa, onde estas propriedades são funções da concentração do soluto na suspensão. Eles obtiveram uma grande discrepância entre os dados obtidos com propriedades constantes e aqueles em que estas

variavam, indicando que a camada limite próxima à membrana é fortemente influenciada pela concentração do soluto na suspensão.

Rahimi (2005) e colaboradores estudaram o escoamento tangencial em membrana de microfiltração, usando ferramentas de CFD para prever o fluxo de permeado por meio de uma simulação tridimensional, e a distribuição de pressões sobre a membrana, realizando também um trabalho experimental para comparação de dados. Os resultados concordaram com os dados experimentais, mas dificuldades foram encontradas para uma modelagem mais realística da camada limite polarizada, o que ainda abre caminho para o desenvolvimento de novas técnicas de modelagem deste tipo de fenômeno.

Um estudo também de microfiltração tangencial em geometria bidimensional foi realizado por Kromkamp et al (2005). Nesse trabalho, admitiu-se que a difusão das micropartículas suspensas é governada por mecanismos de migração induzidos por cisalhamento. Tais mecanismos foram levados em conta através de expressões de difusividade e viscosidade variáveis com a fração volumétrica da partícula, onde o modelo da difusividade levava em conta a taxa de cisalhamento, o raio da partícula e sua fração volumétrica. Os resultados obtidos previram o aparecimento da camada polarizada de concentração para cada valor de pressão transmembrana usado, mostrando que a polarização já começa a surgir, neste sistema, próxima à entrada do escoamento.

No presente trabalho, a simulação do escoamento em estado estacionário de um processo de microfiltração tangencial será apresentada, com base nas equações de conservação de massa e quantidade de movimento, seguidos de um modelo de trajetória de partícula implementado no pacote computacional (implementação Lagrangiana), e da lei de Darcy para escoamento em meios

porosos. O objetivo é verificar se os valores de fluxo de permeado *versus* pressão para diferentes velocidades tangenciais concordam com os dados experimentais.

2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

As equações governantes do problema investigado são as equações da conservação da massa e da quantidade de movimento, assumindo escoamento permanente e incompressível:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F} \quad (2)$$

onde \mathbf{u} é o vetor velocidade, em m s^{-1} , t o tempo em s, ρ a massa específica do fluido, em kg m^{-3} e μ é a viscosidade do fluido, em Pa s . A força de superfície \mathbf{F} , em N, é a força gravitacional, a qual foi desprezada para as partículas, mas considerada no escoamento da água. Na modelagem do escoamento através da membrana levou-se em conta a teoria de escoamento em meios porosos (lei de Darcy generalizada para três dimensões) que está implementada no pacote computacional empregado, conforme expressa a Equação 3.

$$-\frac{\partial p}{\partial x_i} = \left(\frac{\mu}{k} \right) \mathbf{u}_i + K_{perda} \rho |\mathbf{u}| \mathbf{u}_i \quad (3)$$

onde k é a permeabilidade da Lei de Darcy, em m^2 , x_i é a posição, em metros e K_{perda} é a resistência através do meio poroso, em m^{-1} . Para a simulação da trajetória de partículas foi utilizado o seguinte modelo implementado no

simulador:

$$m_p \frac{dv_p}{dt} = \frac{1}{8} \pi \rho d^2 C_D |v_f - v_p| (v_f - v_p) + \frac{\pi d^3 \rho_f}{6} \frac{dv_f}{dt} + \frac{\pi d^3 \rho_f}{12} \left(\frac{dv_f}{dt} - \frac{dv_p}{dt} \right) \quad (4)$$

onde m_p é a massa da partícula, em kg, v_p sua velocidade, em m s^{-1} , d seu diâmetro, em m, C_D é o coeficiente de arraste, adimensional, e v_f é a velocidade do fluido, em m s^{-1} . Uma abordagem de turbulência também foi levada em consideração nesta primeira etapa, e o modelo k - ε foi utilizado na entrada e nas saídas de permeado e concentrado. Este modelo assume o aparecimento de uma variável denominada viscosidade turbulenta, a qual está relacionada com a energia cinética turbulenta através da seguinte equação:

$$\mu_T = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5)$$

onde μ_T é a viscosidade turbulenta, em Pa s , C_μ é uma constante do modelo de turbulência, adimensional, k é a energia cinética turbulenta por unidade de massa, em $\text{m}^2 \text{s}^{-2}$, e ε é a taxa de dissipação turbulenta, em $\text{m}^2 \text{s}^{-3}$.

O modelo assume que a viscosidade efetiva (μ_{eff} , em Pa s) do fluido na presença de turbulência é modificada, sendo, na verdade, uma soma da viscosidade quando em repouso ou em escoamento laminar e da viscosidade turbulenta:

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_T \quad (6)$$

As equações de conservação da quantidade de movimento finais levando-se em conta tais efeitos são:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (7)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (8)$$

Nas equações (7) e (8), σ_k , σ_ε , $C_{\varepsilon 1}$ e $C_{\varepsilon 2}$ são constantes adimensionais ajustadas automaticamente no simulador ou cujos valores podem ser alimentados como dados de entrada. O termo que incorpora a produção de turbulência, para um fluido incompressível e desprezando-se a turbulência devido à força gravitacional, está implementado conforme a seguinte equação:

$$P_k = \mu_T \nabla \mathbf{u} \cdot (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (9)$$

onde P_k é a produção de turbulência do sistema, em $\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-3}$ devido somente às forças viscosas.

3. METODOLOGIA NUMÉRICA

A microfiltração tangencial de uma suspensão de partículas de sílica em cloreto de sódio foi simulada para diferentes pressões a fim de verificar o comportamento do fluxo de permeado. Os resultados foram comparados com os dados obtidos a partir de experimentos de Räder (2003). O sistema consiste de uma membrana assimétrica com diâmetro de poro nominal igual a $0,2 \mu\text{m}$. O módulo sobre o qual

foi montada a geometria para a simulação possui as seguintes dimensões: 11,5 cm de comprimento, 4,5 cm de largura e 1 mm de altura. A temperatura de operação foi mantida em 25°C , o diâmetro médio das partículas de sílica é $6 \mu\text{m}$, e a massa específica média é $2370 \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$.

A fração volumétrica de alimentação de sílica é de $5 \cdot 10^{-5}$ ($100 \text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$), ao passo que a concentração de cloreto de sódio é de $0,001 \text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ e a velocidade de alimentação da suspensão nos valores de $0,16 \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ e $1,67 \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$. A faixa de pressão testada foi de 0,5 a 3,5 bar, realizando-se um experimento e uma réplica para cada velocidade. Os resultados foram comparados com as médias dos experimentos e réplicas para cada pressão. A presença de NaCl na suspensão possuía o objetivo original de mantê-la estável; todavia, para propósitos de simulação, foi levada em conta apenas a trajetória percorrida sem considerar possíveis efeitos de interação com as partículas de sílica ou com a membrana.

Uma malha computacional, consistindo de 33575 tetraedros e 14832 prismas como volumes de controle, foi gerada para a geometria do problema em questão. Um programa de geração de geometria e malha (ANSYS CFD) foi usado para tal fim. Os tetraedros são volumes usados para discretizar o domínio no escoamento livre ou em regiões onde não há grandes gradientes de velocidade, ao passo que os prismas são preferencialmente gerados próximos às paredes no intuito de modelar melhor o comportamento de camada limite. A presença de prismas produz uma solução mais robusta e aumenta a velocidade de convergência, mesmo que os efeitos de parede não sejam o objetivo principal do estudo.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A Tabela 1 mostra os resultados de fluxo de permeado em $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ para cada pressão, em bar, na velocidade tangencial de alimentação de $0,16 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, tanto experimentais quanto os obtidos a partir da simulação. Na Tabela 2 estão apresentados os dados para a velocidade tangencial de $1,67 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$.

Tabela 1 – Dados de fluxo de permeado ($L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$) versus pressão transmembrana (bar) a $0,16 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

ΔP (bar)	Exp.	Réplica	Média	Simulação
0,5	14,1	14,8	14,5	11,0
1,5	33,4	37,9	35,6	33,1
2,0	45,2	49,5	47,4	44,1
2,5	56,6	64,2	60,4	55,1
3,5	76,5	88,1	82,3	77,1

Tabela 2 – Dados de fluxo de permeado ($L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$) versus pressão transmembrana (bar) a $1,67 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

ΔP (bar)	Exp.	Réplica	Média	Simulação
0,5	16,6	16,3	16,5	11,4
1,5	35,0	40,0	37,5	34,6
2,0	49,2	54,3	51,8	46,3
2,5	64,7	64,4	64,6	57,9
3,5	82,6	87,4	85,0	81,2

Tanto na Tabela 1 quanto na Tabela 2 verifica-se que os resultados de fluxo de permeado gerados pelo simulador são sempre menores do que os experimentais. Apesar disso, o simulador conseguiu reproduzir o comportamento do sistema de maneira muito semelhante ao comportamento real, como ilustrado nas Figuras 1 e 2, que reproduzem os dados das tabelas anteriores. A teoria prevê que o comportamento entre pressão e fluxo de permeado seja uma reta e, a pressões elevadas, um declínio de fluxo de permeado seja mais acentuado do que para pressões transmembrana menores, devido ao aumento do efeito de polarização por concentração a pressões maiores. Em ambas as figuras observa-se que os dados gerados pelo simulador seguiram a tendência observada nos experimentos.

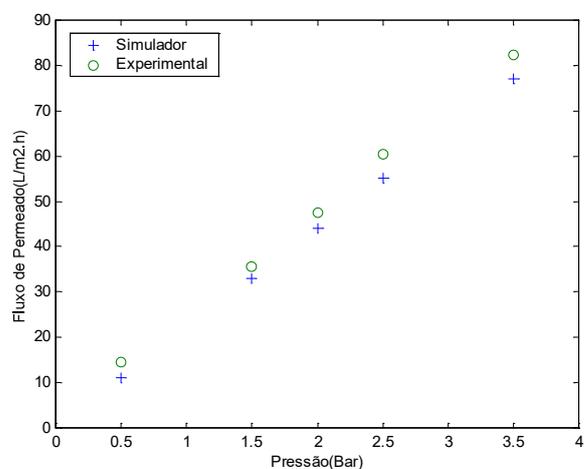


Figura 1 – Fluxo de permeado versus pressão para velocidade de $0,16 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

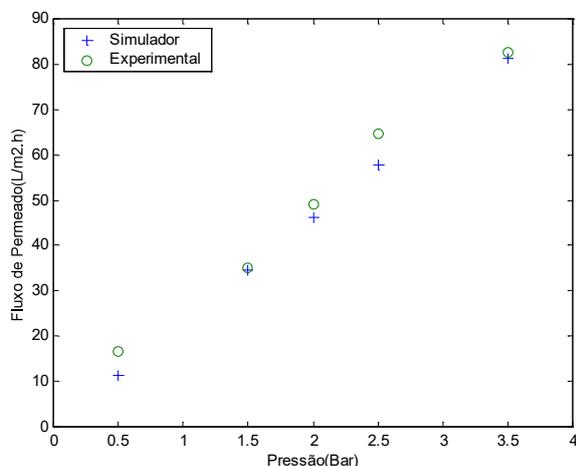


Figura 2 – Fluxo de permeado versus pressão para velocidade de $1,67\text{m s}^{-1}$

Não foi possível capturar a camada limite nas simulações realizadas, mas conseguiu-se reproduzir o comportamento do fluxo de permeado com desvios aceitáveis. As diferenças entre os experimentos e réplicas e entre os valores simulados e a média dos experimentos e réplicas para as velocidades de $0,16\text{m s}^{-1}$ e $1,67\text{m s}^{-1}$ estão mostrados nas Tabelas 3 e 4, respectivamente, com valores em ordem crescente de pressões.

Tabela 3 – Diferenças percentuais – $0,16\text{m s}^{-1}$

Diferença (%) experimentos e réplicas	Diferença (%) Simulação e média entre experimentos e réplicas
4,96	23,9
13,47	7,30
9,51	6,92
13,43	8,78
15,16	6,26

Tabela 4 – Diferenças percentuais – $1,67\text{m s}^{-1}$

Diferença (%) experimentos e réplicas	Diferença (%) Simulação e média entre experimentos e réplicas
1,81	30,79
14,29	7,65
10,37	10,58
0,46	10,30
5,81	4,52

Para o caso de velocidade tangencial de $0,16\text{m s}^{-1}$, é possível perceber que o desvio percentual entre experimento e réplica, para as duas últimas pressões, tende a crescer, o que ocorre de maneira oposta com o desvio entre os valores simulados e os obtidos via experimento. Apesar de não haver uma tendência sempre crescente de aumento de erro com a pressão devido ao decréscimo observado na pressão de 1,5 para 2 bar (de 3,47% para 9,51%), a tendência esperada é que o erro aumente com a pressão justamente devido à formação da camada polarizada de concentração e eventualmente da formação do *fouling*. Este último nada mais é do que a deposição irreversível de partículas sobre a superfície da membrana, semelhante a uma incrustação responsável pela redução de fluxo de permeado.

Para o caso de velocidade tangencial igual a $1,67\text{m s}^{-1}$, mostrado na Tabela 4, as maiores diferenças ocorreram nos valores intermediários de pressões, acontecendo praticamente o mesmo com as diferenças entre valores simulados e a média de experimentos e réplicas.

Com base nos resultados obtidos, é possível concluir que os desvios entre os dados simulados numericamente e aqueles devido aos experimentos são aproximadamente da mesma ordem de grandeza, o que torna os resultados obtidos pelo simulador compatíveis fisicamente com o que se esperou para o sistema de microfiltração tangencial estudado.

5. CONCLUSÕES

Neste trabalho foi realizada a simulação de um processo de microfiltração tangencial de partículas de sílica obtendo-se resultados de fluxo de permeado versus pressão condizentes com a realidade. A diferença percentual máxima para a velocidade mais baixa foi de 23,9%, ao passo que para a velocidade mais alta, de 30,79%. Devido a isto, melhorias na processo de simulação ainda são necessárias de forma a minimizar ainda mais os desvios obtidos dos resultados numéricos. Estas melhorias podem estar relacionadas tanto à qualidade da malha (número de volumes de controle tetraédricos ou prismáticos, refino e suavização da malha) quanto a ajustes na própria simulação, tais como: teste de outros modelos de turbulência, melhorias no controle de parâmetros para escoamento em meios porosos, dentre outros.

Para futuros trabalhos serão realizados estudos mais detalhados dos efeitos da camada limite de concentração sobre o fluxo de permeado e no desempenho dos processos de separação de membranas como um todo.

6. 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.; BASTIAANSE, A.; SWARTS, J.; BRANS, G.; VAN DER SMAN, R.G.M.; BOOM, R.M. A suspension flow model for hydrodynamics and concentration polarization in crossflow microfiltration. *J.Memb.Sc. The Netherlands*, v. 253, p. 67-79, 2005.

RÄDER, S.A. Estudo Teórico-Experimental do Processo de Microfiltração de Partículas de Sílica em Suspensão Aquosa. *Brasil*, 2003.

RAHIMI, M.; MADAENI, S.S.; ABBASI, K. CFD modeling of permeate flux in cross-flow microfiltration membrane. *J. Memb. Sc. Iran*, v. 255, p. 23-31, 2005.

WILEY, D.E.; FLETCHER, D.F. Techniques for computational fluid dynamics modeling of flow in membrane channels. *J.Memb.Sc.* v.211, p. 127-137, 2003.