

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**Simulação Fluidodinâmica Computacional  
de Processos de Separação por  
Membranas**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Cleiton Bittencourt da Porciúncula

**Porto Alegre**

**2007**

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

# **Simulação Fluidodinâmica Computacional de Processos de Separação por Membranas**

Cleiton Bittencourt da Porciúncula

Dissertação de Mestrado apresentada como  
requisito parcial para obtenção do título de Mestre  
em Engenharia Química

Área de concentração: Fenômenos de Transporte e  
Operações Unitárias

**Orientadoras:**

**Prof<sup>ª</sup>. Dr<sup>ª</sup>. Lígia Damasceno Ferreira Marczak**

**Prof<sup>ª</sup>. Dr<sup>ª</sup>. Isabel Cristina Tessaro**

**Porto Alegre**

**2007**

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação *Simulação Fluidodinâmica Computacional de Processos de Separação por Membranas*, elaborada por Cleiton Bittencourt da Porciúncula, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Química.

Comissão Examinadora:

---

Prof. Dr. Argimiro Resende Secchi – DEQUI / UFRGS

---

Prof. Dr. Nilo Sérgio Medeiros Cardoso – DEQUI / UFRGS

---

Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli – DMPA / UFRGS

# **Agradecimentos**

A todos os que me ajudaram nesta jornada.

*“Sou como um menino que se diverte  
achando uma concha mais bonita aqui e ali,  
enquanto que o grande oceano da Verdade  
permanece indiferente à minha frente.”*

Sir Isaac Newton

## Resumo

Nos últimos anos, os processos de separação por membranas têm recebido atenção especial frente a outras alternativas de operações unitárias de separação. Isto se deve às várias características únicas típicas destes processos, o que os torna muito competitivos economicamente quando comparados com processos de separação já bem estabelecidos. A alta seletividade, flexibilidade de operação, maior facilidade para a separação de compostos termolábeis, dentre outras vantagens, trazem como consequência o uso das membranas como alternativas promissoras em vários ramos da Engenharia Química, e até mesmo em diversas áreas do conhecimento, tais como Medicina, Farmácia, Biotecnologia, Indústria Aeroespacial, dentre muitas outras. Aliada a estas características, as técnicas de simulação fluidodinâmica têm também crescido, principalmente devido ao aumento na capacidade de processamento dos computadores modernos. Por causa da ainda recente impossibilidade de obter-se uma solução analítica completa para a grande maioria dos escoamentos, as técnicas numéricas, quando combinadas com o pré-processamento (definição do problema físico e condições de contorno), processamento (solução das equações governantes) e pós-processamento (visualização e análise dos resultados), permitem a solução dos mais diversos tipos de problemas. No caso dos processos de separação envolvendo membranas, o grande interesse está focado no comportamento da camada limite de polarização por concentração, o qual é um fenômeno que comumente causa alguns problemas. Desta forma, o uso de uma ferramenta para a resolução de escoamentos complexos torna possível a compreensão destes fenômenos, aumentando em muito a qualidade do projeto e de possíveis tomadas de decisões em processos de separação envolvendo membranas. Neste trabalho, um programa de simulação fluidodinâmica comercial, chamado CFX, foi utilizado para realizar uma série de simulações de processos de separação com membranas, comparando-se os dados obtidos com aqueles presentes na literatura. Foram analisados alguns estudos de caso, dentre os quais: microfiltração tangencial de suspensão de partículas de sílica, escoamento de água em módulo de microfiltração para diferentes geometrias e ultrafiltração de soluto macromolecular (albumina de soro bovino ou BSA). Os resultados da microfiltração de partículas de

sílica e da ultrafiltração de BSA primeiramente foram comparados com dados experimentais, considerando-se a estrutura porosa da membrana nas simulações. Posteriormente os mesmos sistemas foram simulados levando-se em conta apenas o escoamento dentro do canal, e os resultados foram comparados com modelos clássicos de previsão de fluxo permeado presentes na literatura. Uma proposta para a simulação do fluxo através da correção do coeficiente de difusão da proteína BSA foi realizada, pois existem muito poucos modelos que tratam dos problemas relativos à separação de solutos de alta massa molar. Além disso, simulações de problemas envolvendo simples escoamentos foram também realizadas, de forma a avaliar o simulador frente às soluções analíticas destes problemas. Concluiu-se que o CFX é capaz de reproduzir resultados experimentais e teóricos com um bom grau de concordância, e que fatores como pressão transmembrana e parâmetros de turbulência afetam os resultados, bem como os desvios em relação aos experimentos e modelos testados.

## Abstract

In the last years, membrane separation processes have received a special attention when compared with other unit operations of separation. This is due to several unique features of these processes, which make them economically competitive with other even well-established separation processes. The high selectivity, the operation flexibility, the separation of thermo labile compounds, among other advantages, make the use of membranes a promising alternative in several branches of Chemical Engineering, and even in other areas of knowledge, such as Medicine, Pharmacy, Biotechnology, Aerospace Industry, among many others. Besides, the techniques of fluid dynamics simulation have also grown, especially due to increasing in computer processing capacity. Because of the impossibility in obtaining a complete analytical solution for most flow problems, a numerical procedure can be applied in order to achieve the solution. Concerning the membrane separation processes, the great interest is focused in the study of the concentration polarization boundary layer, a phenomenon that commonly causes flux decline and changes in membrane retention. Thus, the use of a tool which can be used to solve complex flow problems can help in the understanding of these phenomena, increasing the quality of the design of separation processes with membranes.

In this work, a commercial fluid dynamics software, CFX, was used to carry out many membrane processes simulations, and the data obtained were compared with ones available in the literature. The following case studies were investigated: cross flow microfiltration of silica particles suspension, flow of water in microfiltration modules with different geometries and ultrafiltration of macromolecular solute (bovine serum albumin, or BSA). The results of microfiltration of silica particles suspension and ultrafiltration of BSA were firstly compared with experimental data, considering the porous structure of the membrane in these simulations. Later on, the same systems were simulated taken into account only the flow within the channel, and the results were compared with classical models for permeate flux prediction presented in the literature. A model to simulate flux by means of the correction of the diffusion coefficient of BSA protein was carried out, since there are only few models to treat the problems about separation of solutes with high molar mass.



It has been concluded that CFX is able to reproduce experimental and theoretical results in a good concordance, and parameters such as transmembrane pressure and turbulence affect the results, as well as the deviations in relation to experiments and models tested.

# Sumário

<b>Resumo .....</b>	<b>vi</b>
<b>Abstract .....</b>	<b>viii</b>
<b>Sumário.....</b>	<b>x</b>
<b>1.Introdução .....</b>	<b>1</b>
<b>2.Membranas – Fundamentos Teóricos.....</b>	<b>3</b>
2.1 Processos de Separação por Membranas .....	3
2.2 Teoria do Transporte em Membranas de Micro e Ultrafiltração .....	11
2.2.1 Teoria da Torta .....	17
2.2.2 Teoria do Filme.....	17
2.2.2.1 Modelo da Camada de Gel.....	19
2.2.2.2 Modelo da Pressão Osmótica .....	21
2.2.2.3 Modelo das Resistências .....	23
2.2.2.4 Modelo da Difusão Hidrodinâmica Induzida por Cisalhamento.....	24
2.3 Métodos para melhoria do fluxo.....	27
<b>3.Mecânica de Fluidos Computacional – Metodologia Matemática e Revisão Bibliográfica.....</b>	<b>30</b>
3.1 Visão Geral da Tecnologia CFD ( <i>Computational Fluid Dynamics</i> ) .....	30
3.1.1 Metodologia CFD .....	32
3.1.2 Métodos de discretização numérica.....	35
3.1.3 Consistência, Estabilidade e Convergência .....	38
3.1.4 Níveis de formulação de modelos .....	38
3.2 Construção da malha.....	40
3.3 Turbulência .....	42
3.3.1 Escalas de turbulência .....	43
3.3.2 Modelos de turbulência .....	44
3.4 Aplicações de CFD em Processos de Separação por Membranas .....	47
<b>4.Avaliação do Simulador e Estudos de Caso .....</b>	<b>49</b>
4.1 Estudos de avaliação.....	49
4.1.1 Filme líquido descendente.....	49
4.1.2 Difusão em filme líquido descendente .....	52

4.2 Estudos de Caso – Processos de Separação por Membranas.....	54
4.2.1 Microfiltração tangencial de partículas de sílica .....	54
4.2.2 Microfiltração tangencial com barreiras ao escoamento .....	59
4.2.3 Ultrafiltração de soluto macromolecular .....	63
4.2.4 Ultrafiltração e a solução por similaridade.....	66
<b>5.Resultados e discussão.....</b>	<b>73</b>
5.1 Estudos de avaliação – escoamento de filme líquido descendente.....	73
5.2 Estudos de avaliação – difusão em filme líquido descendente .....	75
5.3 Microfiltração tangencial de partículas de sílica .....	76
5.4 Microfiltração tangencial com barreiras ao escoamento .....	78
5.5 Ultrafiltração de soluto macromolecular .....	91
5.6 Ultrafiltração e a solução por similaridade .....	94
<b>6.Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros.....</b>	<b>103</b>
<b>7.Bibliografia.....</b>	<b>106</b>
<b>Apêndice – Resultados das Simulações.....</b>	<b>111</b>
<b>Lista de Figuras .....</b>	<b>xii</b>
<b>Lista de Tabelas .....</b>	<b>xv</b>
<b>Lista de Símbolos, Siglas e Abreviaturas .....</b>	<b>xviii</b>

# Lista de Figuras

<b>Figura 2.1:</b>	Esquema do processo de separação usando membranas .....	4
<b>Figura 2.2:</b>	Diferentes configurações do escoamento tangencial: (a) concorrente (b) contracorrente (c) fluxo cruzado (d) mistura perfeita .....	12
<b>Figura 2.3:</b>	Operação de fluxo transversal .....	13
<b>Figura 2.4:</b>	Comportamento do fluxo permeado em função do tempo na filtração transversal .....	13
<b>Figura 2.5:</b>	Representação da formação de torta na filtração transversal .....	13
<b>Figura 2.6:</b>	Configurações mais comuns de módulos: (a) placa e quadro (b) espiral (c) capilar .....	14
<b>Figura 2.7:</b>	Diferentes arranjos do módulo capilar: (a) <i>inside-out</i> e (b) <i>outside-in</i> .....	16
<b>Figura 2.8:</b>	Esquema de formação da torta.....	17
<b>Figura 2.9:</b>	Esquema da formação do filme de concentração .....	18
<b>Figura 2.10:</b>	Representação da camada limite de concentração na membrana .....	18
<b>Figura 2.11:</b>	Representação da formação da camada de gel .....	20
<b>Figura 2.12:</b>	Esquema de formação da camada limite polarizada na microfiltração tangencial .....	25
<b>Figura 3.1:</b>	Fluxograma para resolução de um problema utilizando CFD .....	33
<b>Figura 3.2:</b>	Representação da discretização por diferenças finitas .....	35
<b>Figura 3.3:</b>	Balço de massa num volume finito.....	37
<b>Figura 3.4:</b>	Diferentes formatos para malhas .....	40
<b>Figura 3.5:</b>	Malha estruturada (a) e não-estruturada (b) .....	41
<b>Figura 3.6:</b>	Ordenação das células em malha estruturada (a) e não-estruturada (b) ....	41
<b>Figura 3.7:</b>	Refino da malha.....	42
<b>Figura 3.8:</b>	Adaptação da malha.....	42
<b>Figura 3.9:</b>	Flutuações de velocidade no escoamento turbulento .....	43
<b>Figura 4.1:</b>	Escoamento de filme líquido descendente: (a) detalhe da geometria e (b) malha gerada.....	50
<b>Figura 4.2:</b>	Escoamento em filme líquido descendente com transferência de massa ..	52
<b>Figura 4.3:</b>	Representação esquemática do módulo de microfiltração: (a) vista interna da placa superior (b) vista interna da placa inferior .....	55
<b>Figura 4.4:</b>	Modelo simplificado de geometria do módulo de microfiltração .....	56
<b>Figura 4.5:</b>	Malha para módulo de microfiltração .....	58
<b>Figura 4.6:</b>	Configurações do módulo de microfiltração: (a) sem barreira (b) pequena barreira trapezoidal (c) grande barreira trapezoidal (d) barreiras opostas .....	60
<b>Figura 4.7:</b>	Detalhe da membrana sobre a geometria de cada módulo .....	60
<b>Figura 4.8:</b>	Representação das malhas geradas para os diferentes módulos de microfiltração (a) sem barreira (b) pequena barreira trapezoidal (c) grande barreira trapezoidal (d) barreiras opostas.....	62
<b>Figura 4.9:</b>	Representação da malha para simulação de ultrafiltração de BSA .....	64
<b>Figura 4.10:</b>	Malhas para simulações bidimensionais com diferentes graus de refino próximo à superfície da membrana (a) 2880, (b) 3840, (c) 4800, (d) 6720, (e) 8640 e (e) 9600 hexaedros.....	69
<b>Figura 5.1:</b>	Perfil de velocidades no filme líquido descendente .....	74
<b>Figura 5.2:</b>	Perfil de velocidades no filme líquido descendente e perfil próximo à parede .....	74
<b>Figura 5.3:</b>	Perfil de concentração da difusão em filme líquido descendente.....	75

<b>Figura 5.4:</b> Testes de malha na pressão de 0,5 bar e velocidade de alimentação de $0,16 \text{ m s}^{-1}$ .....	76
<b>Figura 5.5:</b> Simulação, dados experimentais e a regressão linear realizada a partir dos dados de RÄDER (2003) na velocidade de $0,16 \text{ m s}^{-1}$ .....	77
<b>Figura 5.6:</b> Simulação, dados experimentais e a regressão linear realizada a partir dos dados de RÄDER (2003) na velocidade de $1,67 \text{ m s}^{-1}$ .....	77
<b>Figura 5.7:</b> Fluxo permeado médio para cada teste de malha .....	79
<b>Figura 5.8:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo sem barreira .....	80
<b>Figura 5.9:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo com pequena barreira trapezoidal .....	80
<b>Figura 5.10:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo com grande barreira trapezoidal .....	81
<b>Figura 5.11:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo com barreiras opostas .....	81
<b>Figura 5.12:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo sem barreira – condição de contorno modificada.....	83
<b>Figura 5.13:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo com pequena barreira trapezoidal – condição de contorno modificada .....	83
<b>Figura 5.14:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo com grande barreira trapezoidal – condição de contorno modificada.....	84
<b>Figura 5.15:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo com barreiras opostas – condição de contorno modificada .....	84
<b>Figura 5.16:</b> Campo de velocidades para módulo sem barreira à pressão transmembrana de 45,5kPa.....	86
<b>Figura 5.17:</b> Campo de velocidades para módulo com pequena barreira trapezoidal à pressão transmembrana de 69,75kPa.....	86
<b>Figura 5.18:</b> Campo de velocidades para módulo com grande barreira trapezoidal à pressão transmembrana de 44,25kPa.....	87
<b>Figura 5.19:</b> Campo de velocidades para módulo com obstáculos opostos, à pressão transmembrana de 43,75kPa.....	87
<b>Figura 5.20:</b> Campo vetorial para módulo sem barreira à pressão transmembrana de 45,5kPa.....	88
<b>Figura 5.21:</b> Campo vetorial para módulo com pequena barreira trapezoidal à pressão transmembrana de 69,75kPa.....	89
<b>Figura 5.22:</b> Campo vetorial para módulo com grande barreira trapezoidal à pressão transmembrana de 44,25kPa.....	89
<b>Figura 5.23:</b> Campo vetorial para módulo com obstáculos opostos à pressão transmembrana de 43,75kPa.....	90
<b>Figura 5.24:</b> Fluxo de permeado médio para cada teste de malha .....	91
<b>Figura 5.25:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana na ultrafiltração tangencial de BSA .....	92
<b>Figura 5.26:</b> Perfis de fração mássica de BSA em diferentes pressões transmebrana ...	93
<b>Figura 5.27:</b> Perfis de fluxo de permeado para cada configuração de malha .....	94
<b>Figura 5.28:</b> Perfis de fluxo de permeado para cada fração mássica na membrana.....	95
<b>Figura 5.29:</b> Perfis de fração mássica na metade do canal retangular.....	96
<b>Figura 5.30:</b> Perfis de fração mássica na saída canal retangular.....	96
<b>Figura 5.31:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para cada escala de turbulência, na intensidade turbulenta de 0,1%.....	98

<b>Figura 5.32:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para cada escala de turbulência, na intensidade turbulenta de 0,2%.....	98
<b>Figura 5.33:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para cada escala de turbulência, na intensidade turbulenta de 0,3%.....	99
<b>Figura 5.34:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para cada escala de turbulência, na intensidade turbulenta de 0,4%.....	99
<b>Figura 5.35:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para cada escala de turbulência, na intensidade turbulenta de 0,5%.....	100
<b>Figura 5.36:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> intensidade turbulenta para diferentes escalas, com $\phi_w = 20\phi_B$ .....	101
<b>Figura 5.37:</b> Fluxo permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para cada escala de turbulência, na intensidade turbulenta de 0,25%.....	102

## Lista de Tabelas

<b>Tabela 2.1:</b>	Alguns materiais usados em membranas de microfiltração .....	8
<b>Tabela 3.1:</b>	Níveis de formulação de modelos .....	39
<b>Tabela 3.2:</b>	Classificação dos modelos de turbulência .....	45
<b>Tabela 4.1:</b>	Testes de malha para microfiltração tangencial de suspensão de sílica ....	57
<b>Tabela 4.2:</b>	Faixas de pressão transmembrana testadas.....	61
<b>Tabela 4.3:</b>	Configurações dos testes de malha para os módulos da Figura 4.6 .....	61
<b>Tabela 4.4:</b>	Configurações dos testes de malha para módulo de ultrafiltração da proteína BSA .....	64
<b>Tabela 4.5:</b>	Configurações dos testes de malha para ultrafiltração bidimensional.....	69
<b>Tabela 5.1:</b>	Máximos desvios percentuais entre experimentos e simulações para diferentes pressões transmembrana – I.....	82
<b>Tabela 5.2:</b>	Máximos desvios percentuais entre experimentos e simulações para diferentes pressões transmembrana – II.....	85
<b>Tabela A.1:</b>	Perfil de velocidades no filme líquido descendente .....	111
<b>Tabela A.2:</b>	Perfil de concentração da difusão em filme líquido descendente .....	112
<b>Tabela A.3:</b>	Valores de fluxo de permeado médio para cada teste de malha – microfiltração de suspensão de sílica.....	113
<b>Tabela A.4:</b>	Valores de fluxo de permeado <i>versus</i> pressão transmembrana experimentais e de simulação para velocidade de entrada igual a 0,16 m s <sup>-1</sup> .....	113
<b>Tabela A.5:</b>	Valores de fluxo de permeado <i>versus</i> pressão transmembrana experimentais e de simulação para velocidade de entrada igual a 1,67 m s <sup>-1</sup> .....	113
<b>Tabela A.6:</b>	Fluxo de permeado médio para cada teste de malha – microfiltração com e sem barreiras .....	114
<b>Tabela A.7:</b>	Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo sem barreira – condição de interface .....	114
<b>Tabela A.8:</b>	Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo com pequena barreira trapezoidal – condição de interface.....	114
<b>Tabela A.9:</b>	Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo com grande barreira trapezoidal – condição de interface .....	115
<b>Tabela A.10:</b>	Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo com barreiras opostas – condição de interface .....	115
<b>Tabela A.11:</b>	Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo sem barreira – condição de contorno modificada .....	115
<b>Tabela A.12:</b>	Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo com pequena barreira trapezoidal – condição de contorno modificada.....	116
<b>Tabela A.13:</b>	Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo com grande barreira trapezoidal – condição de contorno modificada.....	116
<b>Tabela A.14:</b>	Fluxo permeado <i>versus</i> pressão transmembrana para módulo com barreiras opostas – condição de contorno modificada .....	116
<b>Tabela A.15:</b>	Fluxo de permeado para cada teste de malha – ultrafiltração de BSA ....	117
<b>Tabela A.16:</b>	Fluxo de permeado <i>versus</i> pressão transmembrana na ultrafiltração tangencial de BSA.....	117
<b>Tabela A.17:</b>	Perfis de fração mássica de BSA em diferentes pressões transmembrana – I .....	117

<b>Tabela A.18:</b> Perfis de fração mássica de BSA em diferentes pressões transmembrana – II .....	118
<b>Tabela A.19:</b> Perfis de fluxo de permeado para cada configuração de malha – ultrafiltração bidimensional de BSA - I .....	118
<b>Tabela A.20:</b> Perfis de fluxo de permeado para cada configuração de malha – ultrafiltração bidimensional de BSA - II .....	119
<b>Tabela A.21:</b> Fluxo permeado em função do comprimento do canal ( $\phi_w = 20\phi_B$ ) – microfiltração de suspensão de sílica.....	119
<b>Tabela A.22:</b> Fluxo permeado em função do comprimento do canal ( $\phi_w = 40\phi_B$ ) – microfiltração de suspensão de sílica.....	120
<b>Tabela A.23:</b> Fluxo permeado em função do comprimento do canal ( $\phi_w = 60\phi_B$ ) – microfiltração de suspensão de sílica.....	120
<b>Tabela A.24:</b> Fluxo permeado em função do comprimento do canal ( $\phi_w = 80\phi_B$ ) – microfiltração de suspensão de sílica.....	121
<b>Tabela A.25:</b> Fluxo permeado em função do comprimento do canal ( $\phi_w = 100\phi_B$ ) – microfiltração de suspensão de sílica.....	121
<b>Tabela A.26:</b> Perfis de fração mássica na metade do canal retangular para $\phi_w = 0,00504$ .....	122
<b>Tabela A.27:</b> Perfis de fração mássica na metade do canal retangular para $\phi_w = 0,01008$ .....	123
<b>Tabela A.28:</b> Perfis de fração mássica na metade do canal retangular para $\phi_w = 0,01512$ .....	124
<b>Tabela A.29:</b> Perfis de fração mássica na metade do canal retangular para $\phi_w = 0,02016$ .....	125
<b>Tabela A.30:</b> Perfis de fração mássica na metade do canal retangular para $\phi_w = 0,0252$ .....	126
<b>Tabela A.31:</b> Perfis de fração mássica na saída do canal retangular para $\phi_w = 0,00504$ .....	127
<b>Tabela A.32:</b> Perfis de fração mássica na saída do canal retangular para $\phi_w = 0,01008$ .....	128
<b>Tabela A.33:</b> Perfis de fração mássica na saída do canal retangular para $\phi_w = 0,01512$ .....	129
<b>Tabela A.34:</b> Perfis de fração mássica na saída do canal retangular para $\phi_w = 0,02016$ .....	130
<b>Tabela A.35:</b> Perfis de fração mássica na saída do canal retangular para $\phi_w = 0,0252$ .....	131
<b>Tabela A.36:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 25% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,1% .....	132
<b>Tabela A.37:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 50% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,1% .....	132
<b>Tabela A.38:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 75% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,1% .....	133
<b>Tabela A.39:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 25% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,2% .....	133



<b>Tabela A.40:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 50% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,2% .....	134
<b>Tabela A.41:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 75% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,2% .....	134
<b>Tabela A.42:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 25% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,3% .....	135
<b>Tabela A.43:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 50% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,3% .....	135
<b>Tabela A.44:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 75% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,3% .....	136
<b>Tabela A.45:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 25% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,4% .....	137
<b>Tabela A.46:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 50% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,4% .....	137
<b>Tabela A.47:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 75% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,4% .....	138
<b>Tabela A.48:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 25% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,5% .....	138
<b>Tabela A.49:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 50% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,5% .....	139
<b>Tabela A.50:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 75% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,5% .....	139
<b>Tabela A.51:</b> Fluxo de permeado médio no comprimento <i>versus</i> intensidade turbulenta para diferentes escalas, com $\phi_w = 20\phi_B$ .....	140
<b>Tabela A.52:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 25% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,25% .....	140
<b>Tabela A.53:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 50% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,25% .....	141
<b>Tabela A.54:</b> Fluxo de permeado <i>versus</i> comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 75% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,25% .....	141

# Lista de Símbolos, Siglas e Abreviaturas

- a      parâmetro da relação de Sherwood, adimensional; raio de partícula, m; constante da relação entre pressão osmótica e concentração; constante do perfil linear de velocidades do filme líquido descendente,  $s^{-1}$
- $A$       constante de proporcionalidade entre fluxo e força motriz; área da membrana,  $m^2$
- $A_m$       área total da membrana,  $m^2$
- $A_T$       área transversal ao escoamento,  $m^2$
- b      parâmetro da relação de Sherwood, adimensional
- BSA    Bovine Serum Albumin
- c      parâmetro da relação de Sherwood, adimensional
- $C$       concentração,  $kg\ m^{-3}$
- $C_A$       concentração do componente A,  $kg\ m^{-3}$
- $C_1, C_2$     constantes de integração
- $C_{A0}$       concentração do componente A no início da coordenada de referência,  $kg\ m^{-3}$
- $C_P$       concentração de soluto na corrente de permeado,  $kg\ m^{-3}$
- $C_B$       concentração de soluto no escoamento *bulk*,  $kg\ m^{-3}$
- $C_{cl}$       concentração de soluto na camada limite,  $kg\ m^{-3}$
- $C_m$       concentração de soluto na superfície da membrana,  $kg\ m^{-3}$
- $C_g$       concentração da camada gel,  $kg\ m^{-3}$
- $C_D$       coeficiente de arraste, adimensional
- $C_{\epsilon/RNG}$     parâmetro do modelo RNG- $k$ - $\epsilon$ , adimensional
- $C_{\epsilon1}, C_{\epsilon2}, C_{\mu}$     constantes do modelo de turbulência  $k$ - $\epsilon$ , adimensionais
- CFD    Computational Fluid Dynamics

$d$	parâmetro da relação de Sherwood, adimensional; diâmetro da partícula, m
$d_h$	diâmetro hidráulico, m
$d_p$	diâmetro de partícula, m
$D$	difusividade, $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
$\bar{D}$	difusividade adimensional
$D(\phi)$	difusividade dependente de $\phi$ , $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
$D_\phi$	difusividade da variável $\phi$ , $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
$D_{AB}$	difusividade do componente A no componente B, $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
$D_B$	difusividade browniana, $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
$D_{corr}$	difusividade corrigida, $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
$D_{eff}$	difusividade efetiva, $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
$D_0$	difusividade induzida por cisalhamento, $\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
$e$	constante numérica igual a 2,718281
$E$	potencial elétrico, V; erro de truncamento nas coordenadas espaciais, adimensional
$f$	notação de função
$f_\eta$	parâmetro do modelo RNG- $k$ - $\varepsilon$ , adimensional
$F$	força motriz
$F$	função
$F_P$	vazão mássica de permeado, $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$
$F_{Rt}$	vazão mássica supondo retenção total, $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$
$F_{cons}$	taxa de consumo de soluto, $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$
$F_{Reexp}$	vazão mássica supondo retenção experimental, $\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$
$g$	aceleração gravitacional, $\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$

$I$	intensidade de turbulência, adimensional
$J$	fluxo permeado, $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ (volumétrico) ou $kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ (mássico)
$J_{lim}$	fluxo permeado limite, $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$
$J_m$	fluxo mássico, $kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$
$J_v$	fluxo volumétrico, $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$
$J_{exp}$	fluxo mássico experimental, $kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$
$J_i$	fluxo de cargas elétricas, $C \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$
$k$	condutividade térmica, $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$ , energia cinética turbulenta, $m^2 \cdot s^{-2}$ ; permeabilidade da lei de Darcy, $m^2$ , constante de Boltzmann, $J \cdot K^{-1}$
$k_c$	coeficiente de transferência de massa, $m \cdot s^{-1}$
$K$	constante de Kozeny-Carman, $m^{-4}$
$K_{perda}$	coeficiente empírico de perda, $Pa \cdot m^{-1}$
$l$	espessura da membrana, m; escala de turbulência, m
$l_d$	escala dissipativa de Kolmogorov, m
$L$	comprimento característico do módulo retangular, m
$L_T$	escala de turbulência, m
$L_P$	permeabilidade hidráulica, $m^3 \cdot m^{-1} \cdot s^{-1} \cdot Pa^{-1}$
$m_p$	massa da partícula, kg
$M$	massa molar, $kg \cdot kmol^{-1}$
$n$	parâmetro empírico, adimensional
$N$	número de graus de liberdade por unidade de volume
$n_p$	número de poros da membrana, adimensional
$O$	erro de truncamento no tempo, adimensional
$p$	perímetro molhado, m

$P$	pressão, Pa
$P_k$	termo de produção de turbulência, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-3}$
$P_{kb}$	termo de produção de turbulência da força de campo, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-3}$
$Pr_T$	número de Prandtl turbulento, adimensional
PSM	Processos de Separação por Membranas
$q''$	fluxo de calor, $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$
$r$	raio do poro da membrana, m
$R$	retenção, adimensional; resistividade elétrica, $\Omega\cdot\text{m}$ ; constante universal dos gases perfeitos, $\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{K}^{-1}$
$Re$	número de Reynolds, adimensional
$R_{obs}$	retenção observada, adimensional
$R_m$	resistência intrínseca da membrana, $\text{m}^{-1}$
$R_T$	resistência total ao escoamento através da membrana, $\text{m}^{-1}$
$R_{cl}$	resistência da camada limite polarizada, $\text{m}^{-1}$
$Re_L$	número de Reynolds médio no comprimento $L$ , adimensional
$S$	área superficial interna total, $\text{m}^2$
$Sc$	número de Schmidt, adimensional
$Sh$	número de Sherwood, adimensional
$Sc$	número de Schmidt, adimensional
$Sc_T$	número de Schmidt turbulento, adimensional
$S_\phi$	termo fonte da variável $\phi$ , $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$
$t$	tempo, s
$T$	temperatura absoluta, K
$u$	componente de velocidade na direção $x$ , $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

$U$	velocidade na corrente livre, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\mathbf{U}$	vetor velocidade, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$v$	componente de velocidade na direção $y$ , $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ , função, escala de velocidade, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$v_f$	velocidade do fluido, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$v_{med}$	velocidade média, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$v_{max}$	velocidade máxima, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$V_P$	volume total de permeado, $\text{m}^3$
$V_R$	velocidade resultante, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$v_p$	velocidade da partícula, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$v_y$	componente de velocidade na direção $y$ , $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$v_w$	fluxo permeado, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\bar{v}_w$	fluxo permeado adimensional
$\bar{v}_y$	componente de velocidade adimensional na direção $y$
$v_z$	componente de velocidade na direção $z$ , $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$\bar{v}(\phi_B)$	fluxo permeado adimensional em função de $\phi_B$
$w$	componente de velocidade na direção $z$ , $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
$x$	coordenada espacial longitudinal, $\text{m}$
$\bar{x}$	comprimento adimensional do módulo retangular
$x_A, x_B$	fração molar dos componentes A e B na corrente de alimentação, adimensional
$y$	coordenada espacial transversal, $\text{m}$
$\bar{y}$	coordenada espacial adimensional transversal
$y_A, y_B$	fração molar dos componentes A e B na corrente de permeado, adimensional
$\infty$	infinito

# Lista de Símbolos Gregos

$\alpha_{A/B}$	fator de separação de uma mistura de componentes A e B, adimensional
$\beta_{RNG}$	parâmetro do modelo RNG- $k$ - $\varepsilon$ , adimensional
$\Gamma$	Função gama
$\delta$	espessura da camada de torta, m, espessura da camada limite de concentração, m; espessura do filme líquido, m
$\varepsilon$	porosidade, adimensional; taxa de dissipação de energia, $m^2 \cdot s^{-3}$
$\Delta P$	diferença de pressão, Pa
$\Delta \pi$	diferença de pressão osmótica, Pa
$\Delta \pi(C_m)$	diferença de pressão osmótica à concentração $C_m$ , Pa
$\Delta t$	intervalo de tempo, s
$\Delta x$	discretização na direção x
$\Delta y$	discretização na direção y
$\eta$	variável de semelhança; parâmetro do modelo RNG- $k$ - $\varepsilon$ , adimensional
$\eta(\phi)$	viscosidade dinâmica relativa da solução, adimensional
$\mu$	viscosidade dinâmica, Pa·s
$\mu_0$	viscosidade dinâmica do fluido puro, Pa·s
$\mu_T$	viscosidade dinâmica turbulenta, Pa·s
$\mu(\phi)$	viscosidade dinâmica dependente de $\phi$ , Pa·s
$\bar{\mu}(\phi)$	viscosidade dinâmica adimensional dependente de $\phi$
$\nu$	difusividade da quantidade de movimento ou viscosidade cinemática, $m^2 \cdot s^{-1}$
$\pi$	constante numérica igual a 3,141592...; pressão osmótica, Pa
$\rho$	massa específica, $kg \cdot m^{-3}$

$\rho_p$	massa específica da partícula, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
$\rho_f$	massa específica do fluido, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	constantes do modelo de turbulência $k$ - $\varepsilon$ , adimensionais
$\Sigma$	símbolo de somatório
$\tau$	tensão de cisalhamento, Pa, tortuosidade dos poros da membrana, adimensional
$\bar{\tau}$	tensão de cisalhamento média, Pa
$\tau_w$	tensão de cisalhamento na parede, Pa
$\phi$	fração mássica ou volumétrica, adimensional; função
$\phi_B$	fração mássica de soluto na corrente <i>bulk</i>
$\phi_i$	valor no nó “i” da função $\phi$
$\phi_P$	fração mássica de soluto na corrente de permeado <i>bulk</i>
$\phi_w$	fração mássica na parede, adimensional



# Capítulo 1

## Introdução

A necessidade de separar uma miríade de substâncias nas indústrias químicas levou ao desenvolvimento de vários processos de separação. Dentre estes, os processos de separação por membranas (PSM) são os mais recentes; até há aproximadamente duas décadas os processos envolvendo membranas não eram considerados tão importantes como são hoje, tendo se expandido para várias áreas: na indústria alimentícia (processamento de soro de queijo, clarificação e purificação de sucos e vinhos), na indústria farmacêutica (obtenção de enzimas, antibióticos e vitaminas), para obtenção de água potável (osmose inversa), no tratamento de efluentes, na separação de gases de baixo ponto de ebulição, em aplicações diversas na medicina (hemodiálise, órgãos artificiais), entre outras.

As vantagens do uso dos processos de separação com membranas são várias, destacando-se: baixo consumo de energia, a separação pode ser levada a cabo de forma contínua, facilidade de *scale-up*, combinação com processos de separação de forma a otimizar as condições de operação, não são necessários aditivos ou substâncias químicas, etc. A principal limitação do uso de membranas são os fenômenos de polarização por concentração e *fouling*, os quais causam uma diminuição no fluxo permeado ao longo do tempo e, muitas vezes, diminuem o tempo de vida útil da membrana. A polarização por concentração consiste na formação de uma camada limite de concentração próxima à superfície da membrana, ao passo que o *fouling* é a deposição, adsorção e/ou acúmulo de partículas sobre a superfície ou no interior dos poros das membranas. Este fenômeno, diferentemente da polarização, é irreversível e aumenta de intensidade com o passar do tempo.

A modelagem e a simulação de PSM é uma tarefa complexa, pois, à medida que o processo ocorre, as propriedades de permeabilidade e seletividade da membrana vão sendo alteradas, bem como as propriedades da solução (viscosidade, massa específica, condutividade elétrica, entre outras).

O desenvolvimento de modelos matemáticos com o objetivo de descrever corretamente os mecanismos da formação da camada limite polarizada é de extrema importância, pois pode auxiliar na previsão e na descoberta de técnicas para atenuar estes fenômenos. Face a isto, as ferramentas de dinâmica de fluidos computacional (CFD, *Computational Fluid Dynamics*), aliadas a bons modelos de previsão de fluxo permeado e polarização, são capazes de simular o comportamento hidrodinâmico de um sistema de separação com membranas, bem como os fenômenos envolvidos nestes (turbulência, transferência de massa, queda de pressão através do módulo, etc.). O amplo uso da ferramenta CFD pelo meio industrial é também relativamente recente, mas, graças ao desenvolvimento de computadores cada vez mais robustos em termos de processamento, simulações de fenômenos complexos podem ser agora dinamicamente realizadas em computador. A dispersão de poluentes num determinado ambiente, a previsão meteorológica e o escoamento supersônico em aeronaves são exemplos muito comuns de aplicação da ferramenta CFD no meio industrial.

O objetivo deste trabalho está centrado na simulação de PSM, especificamente micro e ultrafiltração, mediante o uso de um simulador comercial (ANSYS CFX) e na comparação dos resultados obtidos com resultados experimentais, de modelos teóricos de previsão de fluxo permeado e do comportamento da camada limite disponíveis na literatura. A motivação para o desenvolvimento deste trabalho encontra-se no fato de que existe um grande número de estudos puramente experimentais em comparação com aqueles de simulação numérica. Desta forma, procura-se compreender melhor os fenômenos envolvidos na separação por membranas, através de simulação fluidodinâmica, já que é uma área de crescente avanço mundial e pouco aplicada a tais fenômenos.

Este trabalho está estruturado da seguinte forma:

- Capítulo 2: revisão bibliográfica dos principais processos de separação envolvendo membranas, com ênfase na micro e ultrafiltração, bem como de trabalhos desenvolvidos nestas áreas, juntamente com a modelagem matemática envolvida.
- Capítulo 3: fundamentação sobre a ferramenta CFD, envolvendo a modelagem empregada, técnicas numéricas, geração de malha e suas principais características.
- Capítulo 4: apresentação das simulações para validação do simulador bem como os estudos de caso investigados durante o decorrer do trabalho.
- Capítulo 5: apresentação e discussão dos resultados obtidos na validação e em cada um dos sistemas de separação estudados.
- Capítulo 6: principais conclusões obtidas e sugestões para trabalhos futuros.

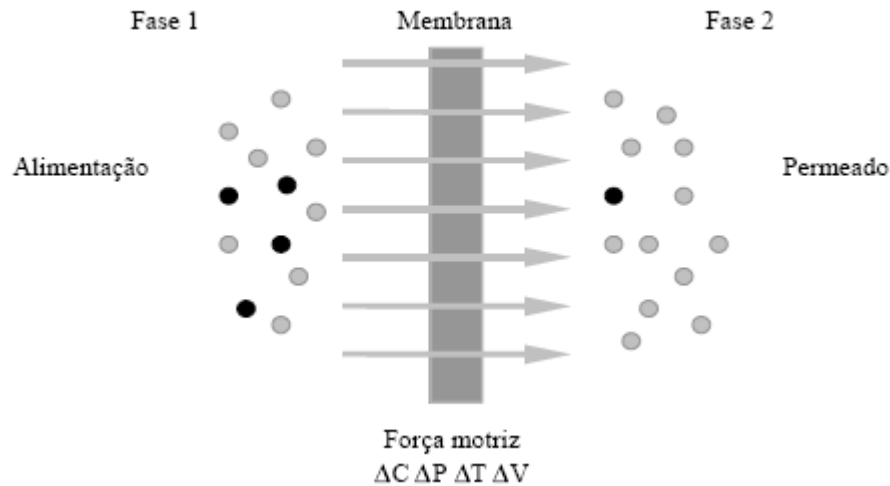
## **Capítulo 2**

### **Membranas - Fundamentos Teóricos**

Neste capítulo serão apresentados os principais fundamentos teóricos dos processos de separação envolvendo membranas, com referência a alguns trabalhos desenvolvidos principalmente nas áreas de micro e ultrafiltração, tanto na parte experimental quanto na parte de simulação numérica.

#### **2.1 Processos de Separação por Membranas**

Membranas podem ser consideradas como barreiras seletivas que separam duas fases distintas, restringindo total ou parcialmente o transporte de um ou mais componentes através destas fases. Existem muitos processos baseados em membranas com diferentes princípios e mecanismos de separação, cobrindo uma ampla faixa de tamanho de substâncias. Todavia, todos possuem uma característica em comum, que é a membrana e sua capacidade de reter um ou mais componentes enquanto o restante a atravessa. Este transporte de componentes através de uma barreira seletiva é possível graças à existência de um gradiente de potencial químico, o qual, dependendo do tipo de operação, pode ser: diferença de concentração, pressão, temperatura ou potencial elétrico. A Figura 2.1 mostra um esquema simplificado de como este processo ocorre.



**Figura 2.1:** Esquema do processo de separação usando membranas.

A fase 1 consiste da alimentação, contendo os componentes a serem separados. A fase 2 é a corrente de permeado, e contém os componentes que passam pela membrana. Um fator crucial para o desempenho da separação pela membrana é a seletividade, que é uma variável que expressa justamente a facilidade com que um determinado componente é separado em relação a outro. Ela pode ser expressa por dois parâmetros: a retenção ( $R$ ) ou o fator de separação ( $\alpha$ ). A retenção é dada por:

$$R = 1 - \frac{C_P}{C_B} \quad (2.1)$$

onde  $C_P$  é a concentração do componente no permeado, e  $C_B$  é a concentração do componente na alimentação ou escoamento *bulk*. Desta forma, uma retenção igual a 1 ou 100% indica que o soluto foi totalmente retido pela membrana, caracterizando uma separação ideal; uma retenção igual a zero indica que o soluto passou completamente pela membrana. No caso de misturas de líquidos ou gases, a seletividade é mais comumente expressa em termos do fator de separação. Para uma mistura de dois componentes A e B quaisquer, tem-se:

$$\alpha_{A/B} = \frac{y_A / y_B}{x_A / x_B} \quad (2.2)$$

onde  $y_A$  e  $y_B$  são as concentrações dos componentes A e B no permeado,  $x_A$  e  $x_B$  as concentrações na alimentação, sendo que o valor de  $\alpha$  deve ser maior do que a unidade. Se a taxa de permeação do componente A é maior do que a de B, o fator de separação é expresso como  $\alpha_{A/B}$ , caso contrário, é expresso como  $\alpha_{B/A}$ . Se  $\alpha_{A/B} = \alpha_{B/A}$ , não ocorre separação.

Existem várias maneiras de se classificar uma membrana. Uma membrana pode ser porosa ou não-porosa, e, quanto à morfologia, ser simétrica ou assimétrica. Quanto a sua natureza, pode ser biológica ou sintética. Membranas porosas contêm poros fixos na faixa de 0,1 a 10 nm para ultrafiltração e 2 a 100 nm para microfiltração. A seletividade é principalmente determinada pela dimensão dos poros, mas a escolha do material influencia

profundamente a extensão dos fenômenos envolvidos na separação de um componente, como a formação da camada limite polarizada e o *fouling*. Assim, a escolha do material para uma dada separação deve levar em conta a prevenção de ocorrência do *fouling*. No caso de processos realizados em temperaturas elevadas, a resistência térmica do material também deve ser considerada.

Membranas não-porosas são usadas na permeação de gases e pervaporação, e podem ser tanto simétricas quanto assimétricas. As membranas simétricas, tanto porosas quanto não-porosas, possuem uma espessura na faixa de 10 a 200  $\mu\text{m}$  e a resistência à transferência de massa é determinada pela espessura total da membrana. Uma diminuição na espessura resulta num aumento do fluxo permeado. As membranas assimétricas consistem de uma camada de topo muito densa, da ordem de 0,1 a 0,5  $\mu\text{m}$ , suportada por uma subcamada porosa com uma espessura em torno de 50 a 150  $\mu\text{m}$ . Tais membranas combinam a alta seletividade de uma membrana densa com a alta taxa de permeação de uma membrana muito fina. A maior parte das membranas empregadas no meio industrial é sintética, ao passo que membranas biológicas são encontradas na natureza.

O transporte de componentes através da membrana ocorre devido a uma diferença de potencial existente nesta barreira seletiva que separa alimentação e permeado, e esta força motriz é diferente para cada tipo de processo de separação, sendo que a taxa de permeação é, em geral, proporcional a esta força motriz. O mecanismo de transporte pode ser classificado como passivo ou ativo.

No transporte passivo, os componentes são transferidos de um potencial mais alto para um mais baixo, na presença ou ausência de um agente transportador. Se existir um agente transportador, passa-se a ter então o transporte facilitado. O transporte de um componente através da membrana é intensificado na presença de um agente transportador através da formação de um complexo entre ambos, o qual se difunde através da barreira seletiva. Mecanismos além da difusão livre fazem com que ocorra um aumento no transporte através da barreira seletiva.

No transporte ativo, os componentes são transferidos de um potencial mais baixo para um mais alto, ocorrendo somente se energia for adicionada ao sistema, o que pode ser feito através de uma reação química, por exemplo. No caso de misturas multicomponentes, não é possível obter os fluxos em termos de simples equações fenomenológicas, pois as forças motrizes envolvidas estão acopladas umas às outras, indicando que a permeação de cada componente não é independente uma da outra. Assim, um gradiente de pressão através da membrana resulta, além de um fluxo de permeado, um fluxo mássico e um gradiente de concentração de soluto próximo à superfície. Todavia, para a maioria dos processos, o fluxo de permeado pode ser considerado proporcional à força motriz aplicada, quando são desprezados possíveis efeitos de interação do soluto com a membrana, resultando assim numa relação fenomenológica linear, cuja expressão geral é dada pela Equação (2.3):

$$J = -A \frac{dF}{dx} \quad (2.3)$$

onde  $J$  é o fluxo mássico ou volumétrico de permeado,  $A$  é uma constante que depende da natureza da força motriz aplicada, e  $dF/dx$  é a força motriz, expressa como o gradiente de  $F$  em relação à coordenada perpendicular à direção de transporte,  $x$ . Esta equação é extremamente genérica, uma vez que ela descreve o transporte de qualquer propriedade: massa, energia, quantidade de movimento e energia elétrica. Para cada um dos casos, têm-se as clássicas equações fenomenológicas de transporte:

- Fluxo de massa: Lei de Fick

$$J_m = -D \frac{dC}{dx} \quad (2.4)$$

- Fluxo volumétrico de líquido: Lei de Darcy

$$J_v = -L_P \frac{dP}{dx} \quad (2.5)$$

- Fluxo de calor: Lei de Fourier

$$q'' = -k \frac{dT}{dx} \quad (2.6)$$

- Fluxo de quantidade de movimento: Lei de Newton

$$J = -\nu \frac{d(\rho u)}{dx} \quad (2.7)$$

- Fluxo elétrico: Lei de Ohm

$$J_i = -\frac{1}{R} \frac{dE}{dx} \quad (2.8)$$

Nas equações anteriores,  $D$  é difusividade mássica,  $L_P$  é a permeabilidade hidráulica,  $k$  é a condutividade térmica,  $\nu$  é a difusividade de quantidade de movimento e  $1/R$  é a condutividade elétrica. Nestas equações, o transporte é considerado a partir de um ponto de vista puramente macroscópico, nas quais as interações moleculares não são levadas em conta na modelagem do fenômeno. Além da força motriz, a própria membrana é um fator determinante na seletividade e no fluxo, pois sua natureza direciona o tipo de aplicação, variando desde a separação de partículas microscópicas, até a separação de moléculas de formas ou tamanhos semelhantes.

Os principais processos de separação por membranas existentes são: microfiltração, ultrafiltração, nanofiltração, osmose inversa, diálise, eletrodialise, pervaporação, permeação de gases e processos envolvendo membranas líquidas. Será feita a seguir uma breve descrição

de cada um deles, sendo que a micro e ultrafiltração serão comentadas com maiores detalhes posteriormente, sobretudo no que diz respeito ao processo de transporte através destas membranas.

## Microfiltração

A microfiltração é o processo envolvendo membranas que mais se assemelha a uma filtração convencional. O tamanho dos poros varia na faixa de 0,05 a 10  $\mu\text{m}$ , o que o torna adequado para reter suspensões e emulsões, além de muitas bactérias e microorganismos cujo tamanho é dessa ordem de grandeza. De acordo com PERRY (1999), parte do sucesso da microfiltração se deve à sua habilidade em separar microorganismos da água em processos de purificação. Seu emprego vai desde uso em laboratório, até a esterilização de fluidos de uso injetável em aplicações médicas. Também é empregada na separação e recuperação de partículas em processos industriais, tais como a recuperação de dióxido de titânio de pigmentos (ZHAO *et al* (2005)). Outra aplicação da microfiltração é a produção de semicondutores (BAKER *et al* (1991)), onde o acúmulo de partículas de sujeira entre os dispositivos representa um risco para uma operação segura destes. A microfiltração de várias correntes do processo, principalmente daquelas que empregam água, é uma maneira de reter as impurezas que, eventualmente, depositar-se-iam nos dispositivos eletrônicos.

O transporte através de membranas de microfiltração pode ser descrito pela Lei de Darcy, onde o fluxo através da membrana é diretamente proporcional à pressão aplicada, conforme Equação (2.5). A permeabilidade contém uma série de fatores que dependem das características intrínsecas da membrana, como: porosidade, tamanho dos poros e tortuosidade. A viscosidade do líquido permeado também pode ser incluída nesta constante. Devido à presença de uma força motriz, que no caso da microfiltração é a pressão aplicada, tanto o solvente como algumas partículas de soluto permeiam através da estrutura da membrana. A capacidade de rejeição das partículas de soluto dependerá do tamanho e distribuição dos poros, que é diferente para cada tipo de membrana. Posteriormente, será descrito com mais detalhes os aspectos da teoria do transporte tanto em membranas de micro como de ultrafiltração.

Um dos principais problemas encontrados na microfiltração é o declínio do fluxo permeado, o qual é causado pela polarização por concentração e *fouling*. Fenômenos de adsorção também influenciam a intensidade do *fouling*, pois dependem do material de que é feita a membrana. Assim, a escolha de uma substância adequada como matéria-prima na fabricação da membrana é um fator importante a ser considerado.

Vários tipos de materiais são usados no preparo de membranas de microfiltração. De acordo com MULDER (1996), tais membranas podem ser cerâmicas (baseadas principalmente em alumina e zircona) e poliméricas, as quais podem ser hidrofóbicas e hidrofílicas. A Tabela 2.1 apresenta alguns materiais usados na fabricação das membranas de microfiltração.

**Tabela 2.1:** Alguns materiais usados em membranas de microfiltração

Membranas hidrofóbicas	Membranas hidrofílicas	Membranas cerâmicas
Politetrafluoroetileno (PTFE, teflon)	Ésteres celulósicos	Alumina ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ )
Polifluoreto de vinilideno (PVDF)	Policarbonato (PC)	Zircona ( $\text{ZrO}_2$ )
Polipropileno (PP)	Éter de sulfona/polisulfona (PES/PSF)	Titânia ( $\text{TiO}_2$ )
Polietileno (PE)	Poliâmida alifática (PA)	Carbeto de silício (SiC)

## Ultrafiltração

A faixa de tamanho de poros para membranas de ultrafiltração varia de 0,05  $\mu\text{m}$  a 1 nm, sendo, portanto, utilizada para separar macromoléculas, colóides, e solutos com massas molares de poucos milhares de Dalton. Tanto a ultra quanto a microfiltração são processos onde a rejeição é principalmente determinada pelo tamanho e formato dos solutos relativos ao tamanho dos poros das mesmas, e o transporte do solvente é diretamente proporcional à pressão aplicada. Membranas de ultrafiltração possuem uma estrutura assimétrica com uma camada de topo com poros e porosidade superficial menores, resultando uma maior resistência hidrodinâmica. Esta camada de topo possui uma espessura normalmente menor do que 1  $\mu\text{m}$ . Uma das grandes aplicações da ultrafiltração é a separação de emulsões óleo-água: a membrana retém a fase oleosa ao passo que a água e outros componentes que estejam numa concentração muito diminuta são removidos na corrente de permeado.

O transporte em membranas de ultrafiltração também pode ser descrito da mesma forma que para membranas de microfiltração, sendo diretamente proporcional à pressão aplicada. Alguns materiais usados na fabricação de membranas de microfiltração também são usados para as membranas de ultrafiltração, dentre os quais: polifluoreto de vinilideno, acetato de celulose, poliamidas alifáticas, etc.

## Nanofiltração e Osmose inversa

Tanto a nanofiltração como a osmose inversa são muitas vezes consideradas como um único processo, uma vez que os princípios básicos são os mesmos. São empregados quando solutos de baixa massa molar, como sais inorgânicos ou pequenas moléculas orgânicas, devem ser separados de um solvente. A diferença básica entre ambas está no tamanho do soluto e na configuração da membrana. Membranas para nanofiltração possuem tamanho de poros menor que 2 nm, espessura da camada de topo ao redor de 1  $\mu\text{m}$  e da subcamada ao redor de 150  $\mu\text{m}$



e pressão de operação da ordem de 10 a 25 bar; além da dessalinização de águas, são empregadas na remoção de micropoluentes e na retenção de pigmentos de tintas da indústria têxtil. Membranas para osmose inversa são usadas para produção de água ultrapura na indústria eletrônica, e para a concentração de sucos de fruta e açúcares na indústria alimentícia, além da concentração de leite em indústrias de processamento de leite e derivados. A faixa de operação está na ordem de 15 a 25 bar para dessalinização de águas com alta concentração de sais e de 40 a 80 bar no tratamento de água salgada e que apresente menor teor de sais.

## Diálise

A diálise é um PSM no qual o soluto se difunde de um lado da membrana (alimentação) até o outro lado (dialisado ou permeado) de acordo com o gradiente de concentração entre ambos. A separação é obtida por meio de diferentes taxas de difusão através da membrana, devido às diferenças em tamanho e solubilidade. As membranas usadas em diálise devem ser as mais finas possíveis, de forma que seja possível obter altos valores de fluxo. A principal aplicação é na hemodiálise, onde a membrana atua como uma espécie de rim artificial capaz de remover componentes tóxicos de baixa massa molar, como uréia, creatinina, fosfatos e ácido úrico; isto é feito bombeando-se o sangue por meio de um dialisador que contém a membrana. A espessura de tais membranas varia de 10 a 100  $\mu\text{m}$ , e, além da purificação do sangue, a diálise pode ser usada na redução do teor alcoólico da cerveja, na dessalinização de enzimas e coenzimas, na recuperação de álcalis (como hidróxido de sódio) e na recuperação da polpa gerada nas indústrias de papel e celulose.

## Eletrodiálise

A eletrodiálise resulta no emprego de membranas trocadoras de íons, catiônicas ou aniônicas, dispostas alternadamente entre o cátodo e o ânodo. Pela aplicação de uma diferença de potencial elétrico entre os eletrodos, irá ocorrer a migração dos cátions em direção ao cátodo e dos ânions em direção ao ânodo, resultando na formação de duas correntes: uma rica em íons e a outra diluída. As membranas empregadas em eletrodiálise são poliméricas, não-porosas e possuem espessura entre 10 e 500  $\mu\text{m}$ . Entre suas principais aplicações destacam-se a dessalinização de águas salobras, a separação de aminoácidos e a produção de sal.

## Pervaporação

Na pervaporação, um líquido puro ou uma mistura de líquidos entra em contato com a membrana do lado da alimentação à pressão atmosférica e o componente que tem afinidade com a membrana é retirado, no lado do permeado, como fase vapor. A força motriz para este processo é o gradiente de pressão parcial do componente, a qual pode ser estabelecida pela aplicação de vácuo no lado permeado ou por meio de gás de arraste. As membranas usadas na pervaporação são não-porosas e com espessura da ordem de 0,1  $\mu\text{m}$ . Tipicamente, três etapas compreendem a pervaporação: sorção seletiva para dentro da membrana no lado da alimentação, difusão seletiva através da membrana e dessorção em uma fase vapor no lado do permeado. Dessa forma, a pervaporação é um processo que envolve, além das considerações hidrodinâmicas, também a transferência de massa e calor. A barreira imposta pela membrana é

a interface onde ocorre a mudança de fase sofrida pelo sistema, a qual é a chave da separação. Os principais usos da pervaporação encontram-se na desidratação de solventes, purificação da água através da remoção de compostos orgânicos voláteis (LIU *et al* (2005)) e separação entre compostos orgânicos como uma alternativa à destilação; também é usada na separação de compostos polares de não-polares, saturados de insaturados, e na separação de isômeros. Finalmente, destaca-se que a pervaporação é um processo particularmente vantajoso para a separação de misturas azeotrópicas, o que seria inviável através da destilação.

## Permeação de gases

A permeação de gases é um processo que consiste na separação de gases de uma determinada mistura e é usada com dois tipos de membranas, porosas e não-porosas. Na separação com membranas porosas, quando o escoamento é viscoso, não ocorre separação porque o livre caminho médio das moléculas de gás é muito pequeno em relação ao tamanho do poro. À medida que o tamanho dos poros diminui, a trajetória pela qual as moléculas atravessam a membrana torna-se maior. Este tipo de escoamento é chamado de escoamento de Knudsen e depende da temperatura, pressão transmembrana, raio, número e formato dos poros e do tamanho das moléculas. No caso de membranas não porosas, a separação dependerá da diferença entre as permeabilidades dos gases que atravessam a membrana. A espessura das membranas situa-se em torno de 0,1  $\mu\text{m}$  e o diâmetro dos poros é menor que 1  $\mu\text{m}$  para permeação de gases em membranas porosas. A permeação de gases possui aplicação nas seguintes áreas: recuperação de gás hidrogênio e hélio, separação da mistura metano e dióxido de carbono, obtenção de hidrogênio da mistura hidrogênio-monóxido de carbono (TAKABA e NAKAO, (2005)), remoção de nitrogênio do ar, remoção de água (secagem), remoção de vapores orgânicos a partir do ar, desidratação de ar comprimido, além de outras.

## Membranas líquidas

Existem dois tipos de membranas líquidas: as imobilizadas e as emulsionadas. Nas primeiras, onde o filme líquido está imobilizado dentro dos poros de uma membrana porosa, que serve como um suporte para a camada do filme líquido; sua preparação consiste na impregnação dos poros com um solvente orgânico adequado. No segundo tipo, a membrana líquida está em emulsão e é preparada a partir da mistura de duas fases imiscíveis (óleo e água, por exemplo) dando origem a gotas de diâmetro entre 0,5 e 10  $\mu\text{m}$ , que se tornam mais estáveis quando da adição de um surfactante. Em geral, as membranas líquidas são usadas na remoção de íons específicos, como cádmio, cobre, níquel, chumbo, nitrato e cromato, além da remoção de gases, separação da mistura de nitrogênio e oxigênio, remoção de ácido sulfídrico, monóxido e dióxido de carbono, dióxido de enxofre e amônia. Aplica-se também na separação de líquidos orgânicos e na remoção do fenol em sistemas de tratamento de efluentes.

## 2.2 Teoria do Transporte em Membranas de Micro e Ultrafiltração

Tanto nos processos de microfiltração como de ultrafiltração, são empregadas membranas porosas cuja faixa de tamanho de poros varia de 2 nm a 10  $\mu\text{m}$ , aproximadamente. Dependendo do tipo de estrutura da qual é constituída a membrana, uma grande variedade de formatos de geometria de poros é possível. Em membranas de microfiltração estas estruturas porosas encontram-se distribuídas quase que uniformemente ao longo da espessura da membrana, e a resistência ao escoamento através dos poros está intrinsecamente ligada à espessura total da membrana. Já no caso da ultrafiltração, as membranas geralmente possuem uma estrutura assimétrica onde a camada de topo porosa é que determina a resistência ao transporte.

A existência de diferentes geometrias de poros possibilita que diferentes modelos matemáticos sejam desenvolvidos para descrever e prever o transporte de forma adequada. Um dos modelos mais simples é aquele que considera a membrana como uma estrutura composta por vários poros cilíndricos perpendiculares ou oblíquos à superfície da mesma. O comprimento dos poros é aproximadamente igual à espessura da membrana, e considerando que todos possuam o mesmo raio, o fluxo através dos poros pode ser descrito por meio da clássica equação de Hagen-Poiseuille:

$$J = \left( \frac{\varepsilon r^2}{8\mu\tau} \right) \frac{\Delta P}{l} \quad (2.9)$$

onde  $J$  representa o fluxo de permeado,  $\varepsilon$  a porosidade da membrana,  $r$  é o raio dos poros,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica da solução,  $\tau$  é a tortuosidade (para poros cilíndricos e perpendiculares, a tortuosidade é igual a um),  $l$  é a espessura da membrana e  $\Delta P$  é a pressão transmembrana.

A Equação (2.9) mostra o efeito da estrutura da membrana sobre o transporte devido à presença dos termos que representam a porosidade, tortuosidade e espessura da barreira seletiva. Comparando-se com a Equação (2.5) da lei de Darcy para fluxo através de meios porosos, pode-se atribuir um significado à permeabilidade hidráulica  $L_P$ , obtendo-se:

$$L_P = \frac{\varepsilon r^2}{8\mu\tau} \quad (2.10)$$

A porosidade nada mais é do que a área de cada poro dividida pela área total da membrana,  $A_m$  multiplicado pelo número de poros  $n_P$ :

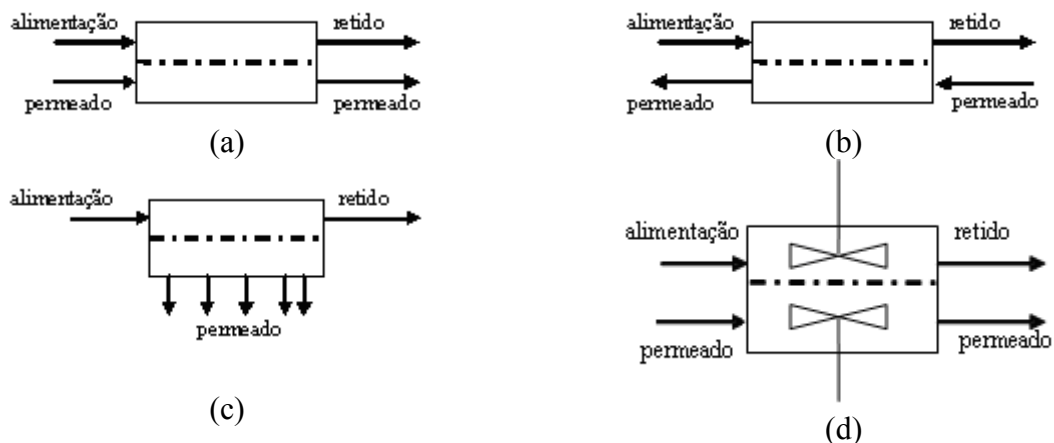
$$\varepsilon = \frac{n_P \pi r^2}{A_m} \quad (2.11)$$

As equações (2.9) a (2.11) descrevem bem o transporte através de membranas cuja maioria dos poros possui uma estrutura semelhante à de poros cilíndricos e paralelos (as quais são um pequeno número), mas não descrevem bem o transporte para o restante de estruturas cujos formatos de poros são diferentes ou de geometrias mais complexas. Um outro tipo de estrutura porosa que ilustra este exemplo é aquele que consiste em um leito de esferas compactadas e próximas umas das outras. O fluxo para este caso é melhor descrito pela equação de Kozeny-Carman:

$$J = \frac{\varepsilon^3}{K\mu S^2(1-\varepsilon)^2} \frac{\Delta P}{l} \quad (2.12)$$

onde a porosidade  $\varepsilon$  é representada pela fração volumétrica de poros ou de vazios (os espaços entre as esferas compactadas),  $S$  é a área superficial interna total e  $K$  é a constante de Kozeny-Carman, que depende do formato dos poros e da tortuosidade. Outra configuração é aquela semelhante a uma matriz esponjosa, com características tanto de poros cilíndricos quanto de leito de esferas compactadas. Neste caso o fluxo pode ser descrito tanto pela equação de Hagen-Poiseuille quanto pela de Kozeny-Carman.

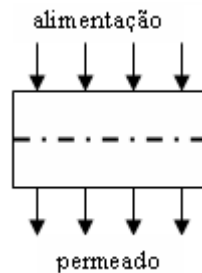
A operação de um sistema de micro e ultrafiltração depende de duas características principais: configuração do escoamento e tipo de módulo no qual a membrana encontra-se acondicionada. Quanto à configuração de escoamento, existem duas formas principais: tangencial ou fluxo cruzado (*cross-flow*), e transversal ou perpendicular (*dead-end*). No primeiro, a suspensão flui paralela à superfície da membrana, e o permeado é recolhido separadamente da corrente de concentrado. A filtração tangencial pode ser realizada de quatro maneiras diferentes, conforme ilustrado na Figura 2.2:



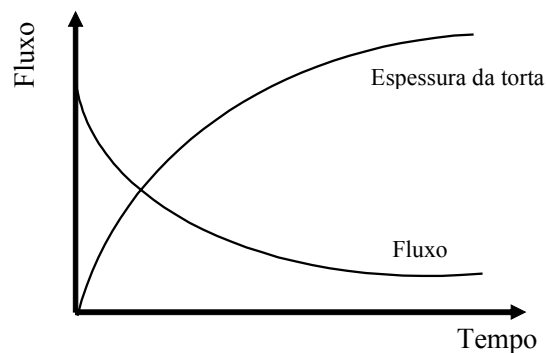
**Figura 2.2:** Diferentes configurações do escoamento tangencial: (a) concorrente (b) contracorrente (c) fluxo cruzado (d) mistura perfeita

A Figura 2.2a ilustra o processo em correntes paralelas ou concorrente, já na Figura 2.2b o processo é contracorrente, na Figura 2.2c as correntes de alimentação e permeado estão defasadas em  $90^\circ$ , e finalmente, a Figura 2.2d é uma representação do processo de filtração tangencial com mistura perfeita. A corrente de alimentação flui perpendicular à membrana, e o permeado retirado sai na mesma direção que a alimentação.

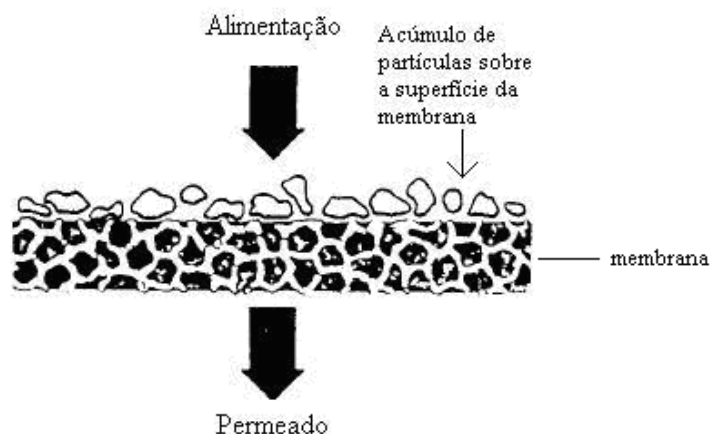
A operação de filtração transversal é ilustrada na Figura 2.3 abaixo. Neste tipo de operação, toda a alimentação é forçada a atravessar a membrana, fazendo com que ocorra um depósito de soluto sobre a superfície desta, aumentando a concentração do componente na alimentação e diminuindo drasticamente o valor do fluxo de permeado à medida que passa o tempo (Figura 2.4). A diminuição do fluxo é devido à formação de uma camada de torta sobre a superfície da membrana justamente devido ao depósito de soluto que cresce à medida que ocorre a operação, conforme ilustrado na Figura 2.5.



**Figura 2.3:** Operação de fluxo transversal



**Figura 2.4:** Comportamento do fluxo permeado em função do tempo na filtração transversal

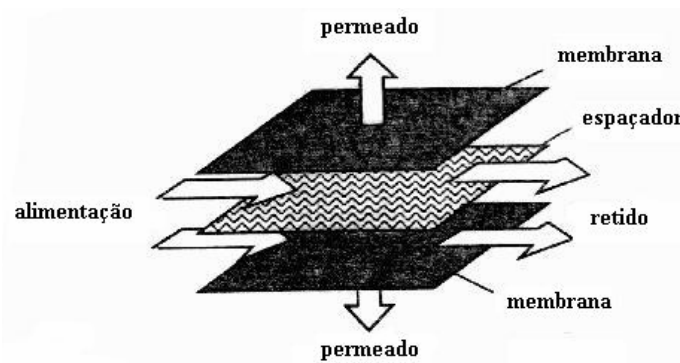


**Figura 2.5:** Representação da formação de torta na filtração transversal (BAKER *et al.*(1991))

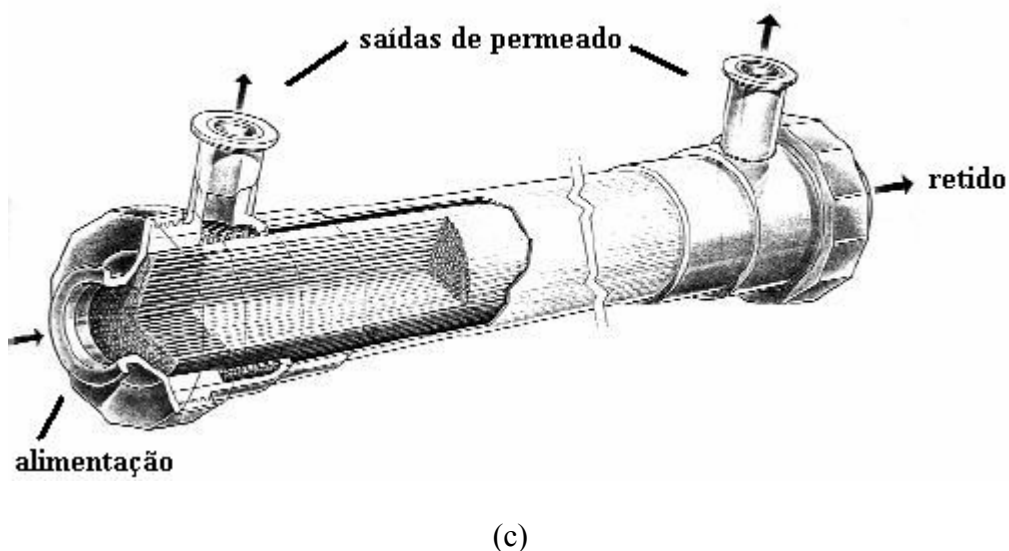
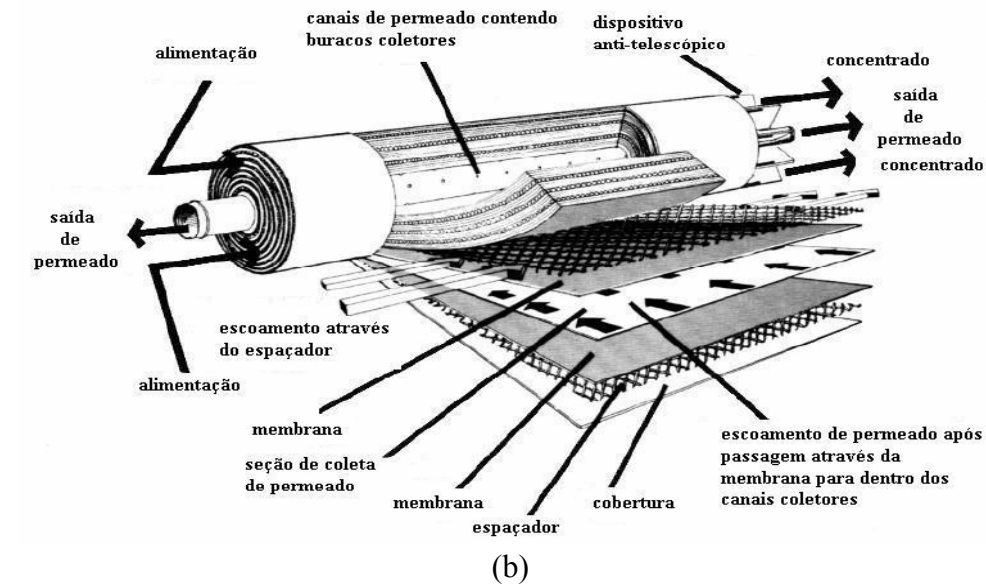
Para aplicações industriais, é preferível a operação tangencial devido à existência de uma menor tendência à formação de *fouling*, quando comparada com a operação de

escoamento transversal. De forma geral, a operação em modo transversal é aplicável quando a alimentação possui baixa concentração de sólidos, de preferência abaixo de 0,1%, e a operação em modo tangencial pode ser empregada quando o teor de sólidos encontra-se acima de 0,5% (BAKER *et al* (1991)). Diversas combinações dos modos de operação citados podem ser realizadas, podendo existir até mesmo diferentes arranjos de operação tangencial com transversal, com ou sem recirculação, com um ou múltiplos passes e arranjos em série, paralelo e cascata. O arranjo final do sistema dependerá de fatores como: natureza do material a ser filtrado, concentração da alimentação, qualidade desejada do permeado, tempo de operação e principalmente custo.

Existem vários tipos de configuração de módulos presentes em um sistema de separação com membranas. O módulo é a estrutura ou suporte onde fica acondicionada a membrana, e sua geometria influencia fortemente muitos parâmetros de separação; em estudos de simulação fluidodinâmica computacional a geometria é uma das peças chave para a previsão e entendimento do comportamento hidrodinâmico em escoamentos que envolvem meios porosos. A maior parte dos módulos baseia-se em duas geometrias de membranas: plana e tubular. Enquanto módulos espirais e de placa e quadro envolvem membranas planas, módulos de fibra oca e capilar baseiam-se em configurações de membranas tubulares. Em geral, um sistema não consiste somente de um único módulo, mas de um grande número de módulos arranjados de maneira apropriada. A escolha da configuração de módulo assim como o seu arranjo, dependerá especialmente de considerações econômicas baseadas em parâmetros de engenharia que são diferentes para cada problema. Aspectos como a facilidade de manutenção e limpeza, tipo de separação, facilidade de operação, possibilidade de aumento da escala e troca de todo o sistema devem ser levados em conta para uma escolha adequada do tipo de módulo. A Figura 2.6 ilustra os três tipos de configurações de módulos mais comuns: placa e quadro, espiral e capilar.



(a)



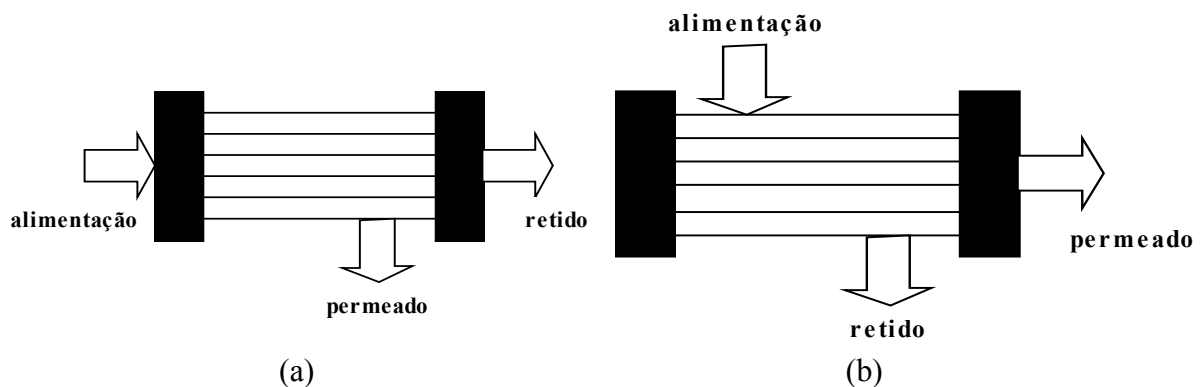
**Figura 2.6:** Configurações mais comuns de módulos: (a) placa e quadro, (b) espiral (c) capilar. (PERRY, (1999))

Na Figura 2.6a um esquema simplificado da configuração de placa e quadro é mostrado. Esse tipo de configuração consiste em conjuntos de duas membranas acondicionadas num formato de sanduíche com as faces da alimentação localizadas em cada lado de um dispositivo que separa cada camada de membrana da outra, chamado de espaçador. A densidade de empacotamento – superfície da membrana por volume de módulo situa-se entre 100 a 400  $\text{m}^2\cdot\text{m}^{-3}$ . As correntes de permeado são recolhidas em direções perpendiculares à alimentação e de cada lado do espaçador, numa configuração semelhante à do escoamento tangencial. Dependendo do tipo de equipamento, dezenas ou centenas deste tipo de arranjo podem ser dispostos de forma adequada.

A Figura 2.6b ilustra a configuração de módulo espiral, ou *spiral-wound*. O princípio no qual se baseia o módulo espiral é muito semelhante àquele presente no módulo de placa e quadro. Pode-se dizer que consiste num módulo de placa e quadro enrolado ao redor de um

tubo coletor central, como se fosse também um sanduíche. A membrana e os espaçadores são grudados de forma a manterem uma estrutura semelhante a um envelope compacto. Tanto na configuração placa e quadro quanto na espiral, os espaçadores atuam também como promotores de turbulência.

O módulo capilar que está ilustrado na Figura 2.6c consiste de um conjunto de estruturas cilíndricas capilares muito finas agrupadas dentro do módulo. As extremidades livres do conjunto são recobertas com agentes como resinas epóxi, poliuretanas ou borracha de silicone, de forma a evitar que os capilares fiquem expostos ao ar livre. Dois tipos de arranjos são possíveis: no primeiro, a alimentação entra dentro dos capilares e o permeado é recolhido pelo lado do casco, com o retido sendo retirado também pela abertura dos capilares (arranjo *inside-out*) e o segundo com a alimentação e o retido entrando e saindo pelo lado do casco, respectivamente, e o permeado sendo retirado através dos orifícios dos capilares (arranjo *outside-in*). Os dois arranjos estão ilustrados nas Figuras 2.7a e 2.7b.



**Figura 2.7:** Diferentes arranjos do módulo capilar: (a) *inside-out* e (b) *outside-in*.

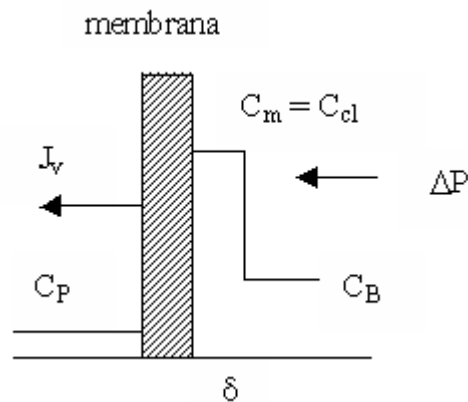
A escolha entre estes dois arranjos é especialmente baseada no tipo de aplicação que se deseja, sendo que fatores como pressão de operação, qualidade do produto e tipo de membrana disponível são pontos importantes a considerar. Quando são usadas membranas porosas de micro ou ultrafiltração, os capilares em geral apresentam um gradiente ou distribuição de tamanho de poros ao longo da estrutura. Desta forma, a localização dos poros menores determinará que tipo de arranjo será usado. Módulos capilares apresentam densidade de empacotamento entre  $600$  a  $1.200 \text{ m}^2\text{m}^{-3}$ . Um outro tipo de configuração, denominada módulos de fibra oca, possui as mesmas características de arranjo geométrico que os módulos capilares; a diferença entre estes dois tipos resulta no fato de que arranjos de fibra oca podem alcançar uma densidade de empacotamento de até  $30.000 \text{ m}^2\text{m}^{-3}$ . Tais módulos são em geral empregados quando a corrente de alimentação é relativamente limpa, como no caso dos processos de permeação de gases e pervaporação, além de processos de dessalinização, desde que a corrente tenha passado por um pré-tratamento adequado.

A seguir serão abordados alguns modelos matemáticos relativos à formação de camada limite bem como modelos que procuram explicar o declínio do fluxo de permeado decorrente da formação da camada polarizada de concentração e do *fouling*.



### 2.2.1 Teoria da Torta

De acordo com VAN DEN BERG (1988) o acúmulo de soluto próximo à membrana pode ser descrito de duas maneiras: a primeira assumindo-se que ocorra a formação de uma camada de torta semelhante ao que acontece nos processos de filtração convencionais; e a segunda, assumindo que se desenvolva um perfil de concentração ou filme de soluto. De acordo com a teoria da torta, uma camada estagnada de concentração constante forma-se próxima à superfície da membrana, conforme mostrado na Figura 2.8. A espessura desta camada depende de fatores como pressão aplicada e concentração da alimentação.



**Figura 2.8:** Esquema de formação da torta

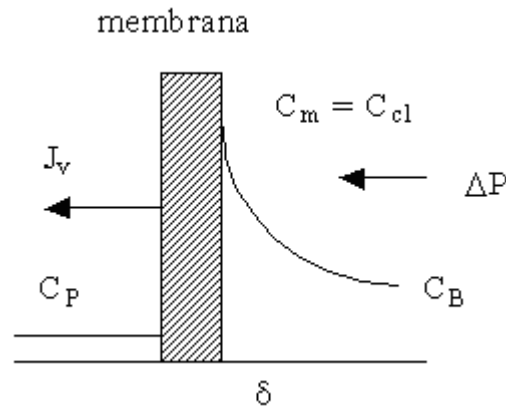
Na Figura 2.8  $J_v$  é o fluxo de permeado,  $C_p$  a concentração de soluto na corrente de permeado,  $C_m$  e  $C_{cl}$  a concentração de soluto na superfície da membrana e na camada limite, respectivamente,  $C_B$  a concentração no escoamento livre,  $\Delta P$  é a pressão transmembrana e  $\delta$  é a espessura da camada de torta. Para o caso de um processo de filtração transversal sem mistura perfeita, a concentração na camada limite pode ser calculada com base num simples balanço de massa através da membrana:

$$C_B R_{obs} V_P = \delta A C_{cl} \quad (2.13)$$

Na Equação acima,  $R_{obs}$  é a retenção observada (definida pela Equação (2.1)),  $V_P$  é o volume total de permeado e  $A$  é a área da membrana.

### 2.2.2 Teoria do Filme

Nesta abordagem, assume-se a formação de um perfil de concentração próximo à superfície da membrana, na forma de uma camada de filme estagnado dando origem a uma camada limite polarizada agora com espessura  $\delta$  variável, conforme mostra a Figura 2.9:

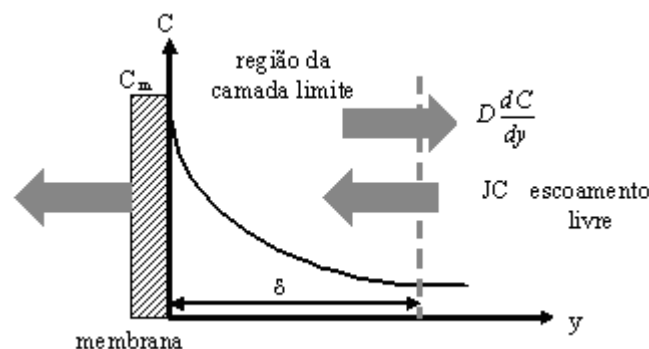


**Figura 2.9:** Esquema da formação do filme de concentração

O soluto que fica retido gradualmente se acumula sobre a membrana, aumentando, portanto, a concentração e dando origem a um fluxo difusivo no sentido de retornar ao escoamento livre da solução, até que a partir de certo tempo, as condições de estado estacionário são alcançadas. Desta forma, o fluxo advectivo até a superfície da membrana será contrabalançado pelo fluxo de soluto através desta e mais o fluxo difusivo a partir da membrana até a região de escoamento livre ou *bulk*, dando origem ao perfil de concentração ilustrado na Figura 2.9. Matematicamente, este fenômeno é expresso da seguinte forma:

$$JC = -D \frac{dC}{dy} + JC_P \quad (2.14)$$

onde  $C$  é a concentração de soluto na camada limite,  $C_P$  é a concentração de soluto no permeado,  $D$  é a difusividade do soluto na solução e  $y$  é a distância a partir da superfície da membrana. Na Equação (2.14), o termo do lado esquerdo representa o fluxo de soluto a partir da solução em direção à membrana; o primeiro termo do lado direito representa o fluxo mássico de soluto devido ao gradiente de concentração existente dentro do filme; finalmente, o segundo termo do lado direito da Equação (2.14) é o fluxo de soluto que atravessa a membrana e sai na corrente de permeado. A Figura 2.10 ilustra a equação acima:



**Figura 2.10:** Representação da camada limite de concentração na membrana

Esta equação pode ser integrada com a aplicação das seguintes condições de contorno:

$$C|_{y=0} = C_m \quad (2.15)$$

$$C|_{y=\delta} = C_B \quad (2.16)$$

obtendo-se, após resolução:

$$J = \left( \frac{D}{\delta} \right) \ln \left( \frac{C_m - C_P}{C_B - C_P} \right) \quad (2.17)$$

A relação  $D/\delta$  é também conhecida como o coeficiente de transferência de massa,  $k_c$ , cujo valor é estimado a partir de correlações semi-empíricas adimensionais (GEKAS e HALLSTRÖM (1987)), baseadas no número de Sherwood:

$$Sh = \frac{k_c d_h}{D} = a Re^b Sc^c \left( \frac{d_h}{L} \right)^d \quad (2.18)$$

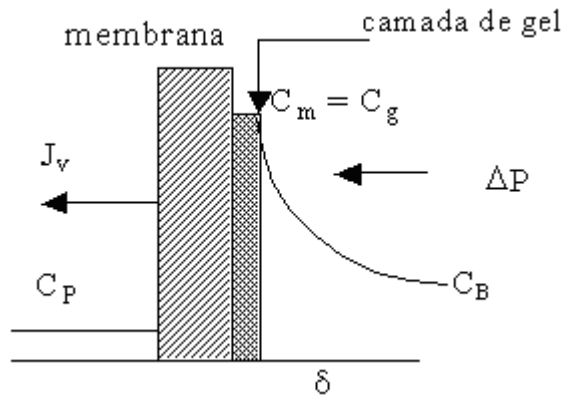
onde  $Sh$  é o número de Sherwood,  $d_h$  é o diâmetro hidráulico,  $Re$  é o número de Reynolds,  $Sc$  é o número de Schmidt,  $L$  é o comprimento característico do canal de escoamento, e as constantes  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , e  $d$  são parâmetros adimensionais que dependem do regime de escoamento (se é laminar, turbulento ou misto). Os autores comentam que muitas destas correlações, as quais são correlações obtidas a partir de escoamentos em superfícies lisas de tubos, são usadas para a estimativa do coeficiente de transferência de massa em superfícies porosas, que é o caso das membranas, e em regiões onde a difusividade e viscosidade variam fortemente com a concentração de soluto. Eles apresentam uma série de modificações de tais correlações com vistas a serem aplicáveis em escoamentos sobre meios porosos, para diferentes faixas de número de Reynolds e número de Schmidt. Todavia, muitos autores utilizam a correlação do número de Sherwood para a estimativa do coeficiente de transferência de massa experimental. Como exemplo disso, FONTES (2005) realizou diversos experimentos de microfiltração de solutos macromoleculares sob condições de regime laminar e turbulento. Os solutos empregados foram as gomas Xantana e Guar, e os resultados obtidos relacionando o número de Sherwood *versus* o número de Reynolds foram comparados com modelos de outros pesquisadores.

A partir da Teoria do Filme vários modelos foram determinados com o objetivo de prever o fluxo permeado através da membrana. Entre estes modelos cita-se o modelo da camada gel, o modelo da pressão osmótica e o modelo das resistências, os quais serão brevemente apresentados a seguir.

### 2.2.2.1 Modelo da Camada de Gel

O modelo da camada gel baseia-se na teoria do filme para descrever a polarização de concentração. Neste modelo, assume-se que a concentração próxima à superfície da membrana não ultrapassa um valor limite, denominado de concentração gel,  $C_g$ , conforme

ilustrado na Figura 2.11. Assim, um aumento da pressão aplicada resultará somente num aumento da espessura da camada de gel, sem aumentar o fluxo, de forma que este atingirá um valor limite.



**Figura 2.11:** Representação da formação da camada de gel

O fenômeno de formação de gel tende a ser mais comum na ultrafiltração, pois em geral os solutos empregados são macromoléculas, as quais apresentam baixa difusividade; obtêm-se desta forma altos valores de retenção, o que facilita que o soluto quase que totalmente retido atinja uma concentração muito alta e constante próximo à superfície da membrana, que é a concentração de gel. Como o modelo assume retenção total, fazendo-se  $C_p = 0$  na Equação (2.17), obtém-se:

$$J_{\text{lim}} = \left( \frac{D}{\delta} \right) \ln \left( \frac{C_g}{C_B} \right) \quad (2.19)$$

onde  $J_{\text{lim}}$  é o fluxo limite e a concentração sobre a membrana,  $C_m$ , foi substituída pela concentração na camada de gel,  $C_g$ .

Apesar deste modelo ser considerado importante para o desenvolvimento da teoria de polarização por concentração e fluxo limite, especialmente no processo de ultrafiltração, ele tem sido contestado por alguns autores (WIJMANS *et al* (1984) e WIJMANS *et al* (1985) *apud* MULDER (1996)) que determinaram que a concentração gel não apresenta um valor constante, mas sim dependente da concentração *bulk* e da velocidade de escoamento tangencial.

O modelo da camada de gel apresenta algumas limitações. Segundo NAKAO *et al* (1979) *apud* BOWEN e JENNER (1995), que mediram a concentração da camada de gel em estado estacionário, verificaram que esta não é constante, mas função da concentração *bulk* e da velocidade tangencial. Da mesma forma, BLATT *et al* (1970) e PORTER (1972a) *apud* BOWEN e JENNER (1995) verificaram que a ultrafiltração coloidal é várias vezes maior do que o valor previsto pelo modelo de polarização de gel.

TRETTIN e DOSHI (1980) resolveram analiticamente a equação que descreve a ultrafiltração polarizada por gel, usando um método integral. Eles relatam a dificuldade de se

encontrar dados experimentais confiáveis na área de ultrafiltração macromolecular, pois é extremamente difícil medir a concentração “gel”. Além, disso, expressões que relacionem a dependência da difusividade e viscosidade com a concentração de soluto nem sempre são adequadas para a maioria dos casos. Todavia, os valores previstos pela solução obtida encontram-se próximos aos dados experimentais de fluxo na ultrafiltração de albumina de soro bovino (*Bovine Serum Albumin*, BSA).

TRETTIN (1980) também procurou ampliar os princípios teóricos da teoria do filme de forma a explicar melhor as diferenças encontradas entre os processos de ultrafiltração coloidal e molecular, além de propor uma nova abordagem para o entendimento do fenômeno da polarização gel. Ele avaliou o comportamento do fluxo limite e da pressão osmótica na ultrafiltração de soluções macromoleculares, fazendo comparações com o modelo de gel e da teoria do filme.

VLADISAVLJEVIC *et al* (1995) estudaram o declínio do fluxo permeado e a resistência da camada de gel usando partículas de óxido de alumínio. Foi descoberto que a resistência da camada de gel iguala a resistência da membrana em poucos segundos, concomitante a uma queda do fluxo permeado pela metade do valor inicial.

### 2.2.2.2 Modelo da Pressão Osmótica

O modelo da pressão osmótica considera que o declínio do fluxo permeado durante o processo de filtração deve-se principalmente ao aumento da pressão osmótica da solução próxima à superfície da membrana, a qual por sua vez é dependente da concentração. Quando comparados com soluções de sais com baixa massa molar à mesma concentração, soluções de componentes de alta massa molar apresentam baixos valores de pressão osmótica. Todavia, a filtração de uma solução de componentes macromoleculares quase sempre leva ao acúmulo de material próximo à superfície da membrana, como já mencionado anteriormente, e portanto a concentração do componente aumenta até valores muito elevados. Como consequência, a pressão osmótica de soluções macromoleculares concentradas aumenta drasticamente, e a partir daí seus efeitos já não podem mais ser ignorados. A equação para o fluxo de permeado que representa este modelo é dada por:

$$J = \frac{\Delta P - \Delta \pi}{\mu R_m} \quad (2.20)$$

Na equação acima, o termo  $\Delta P$  corresponde à diferença de pressão hidráulica através da membrana, ao passo que o termo  $\Delta \pi$  corresponde à diferença de pressão osmótica através da membrana,  $R_m$  é a resistência da membrana e  $\mu$  é a viscosidade dinâmica. O valor de  $\Delta \pi$  é determinado pela concentração de soluto na superfície da membrana, expressa por  $C$ , a qual, para valores elevados, assume a seguinte forma:

$$\pi = aC^n \quad (2.21)$$

onde  $a$  é uma constante e  $n$  é um fator exponencial maior do que 1. No caso de soluções diluídas, tem-se a equação de van't Hoff:

$$\pi = \frac{CRT}{M} \quad (2.22)$$

onde  $R$  é a constante universal dos gases perfeitos,  $T$  a temperatura absoluta e  $M$  é a massa molar.

Diversos autores aplicaram o modelo da pressão osmótica em estudos de modelagem e simulação de processos de ultrafiltração. GEKAS *et al* (1993) usaram a abordagem da pressão osmótica na simulação numérica de ultrafiltração transiente de BSA em módulo plano, usando para tanto a adição de um termo fonte com vistas a contabilizar a adsorção de soluto na superfície da membrana. A Equação (2.21) foi aproximada por um polinômio de terceiro grau.

Uma aproximação polinomial de terceiro grau também foi usada por GOODING e ALEXANDER (1985) para a simulação transiente de BSA, mas agora num módulo de fibra oca, com o objetivo de estudar como a queda de pressão axial e longitudinal no módulo influencia o fluxo de permeado.

FLETCHER e WILEY (2004) usaram uma correlação linear de  $\pi$ , com base na fração mássica de soluto, no estudo da influência da força gravitacional sobre a osmose inversa. BELLARA e CUI (1998) usaram uma relação de polinômios de terceiro grau na fração volumétrica para expressar o efeito da pressão osmótica na ultrafiltração de BSA em membranas tubulares, de forma a determinar a taxa de crescimento da camada limite polarizada ao longo da membrana. NAKAO e KIMURA (1981) e TANDON *et al* (1994) também usaram o modelo da pressão osmótica em seus estudos de modelagem de ultrafiltração de açúcares e proteínas, respectivamente.

JÖNSSON e JÖNSSON (1996) propuseram um modelo termodinâmico geral de polarização por concentração, baseado no balanço entre uma força devido ao gradiente de pressão osmótica e uma força de fricção devido ao escoamento de fluido ao redor de cada partícula. Um modelo de esferas coloidais eletricamente carregadas também foi usado, de forma a contabilizar efeitos como pH e força iônica. A vantagem desta nova abordagem é que combina as predições do modelo de pressão osmótica para solutos de baixa massa molar sem interação entre si, com a abordagem da teoria da torta usada para solutos com alta massa molar e cujas partículas possuem algum grau de interação.

VLADISAVLJEVIC e RAJKOVIC (1999) estudaram a ultrafiltração de solutos macromoleculares onde o coeficiente de transferência de massa dependia da concentração, bem como da viscosidade da suspensão. Uma modelagem matemática da pressão osmótica levando em conta tais efeitos foi realizada. Sob a mesma diferença de pressão transmembrana, o fluxo permeado da suspensão é menor do que o fluxo do solvente puro devido ao acúmulo de partículas de soluto retidas sobre a superfície da membrana. No decorrer da ultrafiltração, este acúmulo acarreta um aumento na pressão osmótica a qual cancela em parte a pressão

aplicada, diminuindo assim a eficiência de operação do sistema. A nova abordagem realizada teve como objetivo compreender melhor as causas deste comportamento.

De forma geral, os fatores que podem levar a um declínio do fluxo de permeado devido aos efeitos da pressão osmótica de acordo com VAN DEN BERG (1988) são: baixos valores de retenção, altas concentrações na alimentação, baixos valores do coeficiente de transferência de massa devido à pequena difusividade do soluto (soluto macromolecular) ou ao baixo grau de mistura na interface membrana-solução.

### 2.2.2.3 Modelo das Resistências

O declínio do fluxo é mais marcante nos processos de micro e ultrafiltração, quando comparado com processos como permeação de gases e pervaporação. Fatores como a polarização por concentração, adsorção de soluto sobre a membrana, formação da camada de gel e bloqueio de poros contribuem cada qual com uma resistência adicional à passagem de solvente pela membrana. Matematicamente pode-se dizer que:

$$J = \frac{\Delta P}{\mu R_T} \quad (2.23)$$

onde  $R_T$  é a resistência total ao escoamento através da membrana. Um tipo especial de resistência é aquela justamente devido à formação da camada limite,  $R_{cl}$ :

$$J = \frac{\Delta P}{\mu(R_m + R_{cl})} \quad (2.24)$$

onde  $R_{cl}$  é a resistência da camada limite. A partir da Equação (2.24), pode-se considerar a camada limite como uma solução concentrada através da qual as moléculas do solvente permeiam, e onde a permeabilidade desta camada estagnada é dependente da concentração e da massa molar do soluto. A resistência exercida por esta camada é muito maior na ultrafiltração, devido à presença de solutos macromoleculares, do que quando há solutos de baixa massa molar, como no caso da osmose inversa. Como a camada limite é caracterizada por um perfil de concentração, a resistência exercida também o será, e a obtenção desse perfil de resistência deverá ser integrada ao longo do comprimento da membrana (MULDER (1996)).

CHENG e WU (2001) apresentaram um modelo de resistência da camada limite, o qual inclui o efeito da pressão osmótica sobre o fluxo permeado, na presença de uma camada limite polarizada por concentração. O modelo é semelhante ao proposto por GEKAS *et al.* (1993) *apud* SECCHI *et al.* (1999). Os autores também realizaram experimentos usando solução aquosa de dextrana T500 como solução de teste para o modelo, que conseguiu reproduzir relativamente bem os dados experimentais. O novo modelo proposto tem como ponto de partida a modificação da Equação (2.24), adicionando-se o efeito da pressão osmótica:

$$J = \frac{\Delta P - \Delta\pi(C_m)}{\mu(R_m + R_{cl})} \quad (2.25)$$

onde  $C_m$  é a concentração de soluto na superfície da membrana e  $\Delta\pi(C_m)$  é a diferença de pressão osmótica nesta concentração. A variação da difusividade e da viscosidade da solução com a concentração de dextrana foi considerada no modelo.

NAKAO *et al* (1979) *apud* BOWEN e JENNER (1995) estudaram também o efeito da polarização por concentração usando um modelo de resistência adaptado da teoria da filtração da torta. Dextrana e polietilenoglicol foram usados em experimentos de forma a validar o modelo. Foi assumido um perfil degrau e independente do tempo para a concentração de soluto, desconsiderando-se quaisquer mecanismos de retro transporte de soluto da membrana para a solução.

PERSOON e NILSSON (1991) estudaram a dependência da resistência ao fluxo imposta pela camada limite, através de uma abordagem de resistências em série, através de características da membrana como permeabilidade e tamanho de poro nominal. Para tanto, realizaram uma série de experimentos com membranas com diferentes tamanhos de poro nominal, em função das resistências hidráulicas da membrana e da camada de *fouling*. Uma proteína comercial foi usada como soluto. Concluiu-se que para minimizar os efeitos dos depósitos de proteína sobre a membrana, a aplicação de baixos valores de pressão transmembrana e o uso de membranas cujos poros possuam tamanhos elevados são alternativas necessárias.

#### 2.2.2.4 Modelo da Difusão Hidrodinâmica Induzida por Cisalhamento

DAVIS e LEIGHTON (1987) propuseram um modelo no transporte de partículas através de paredes porosas por meio de um mecanismo de difusão hidrodinâmica induzido por cisalhamento. Neste trabalho, os autores abordam o fato de que, no escoamento laminar em estado estacionário, a difusão de partículas dentro da camada limite é balanceada pelo fluxo advectivo de partículas que migram na direção da parede porosa, devido ao escoamento do fluido que vai na direção desta parede. Nas condições de escoamento desenvolvido, faz-se um balanço de quantidade de movimento para uma tensão de cisalhamento constante, o que requer que o perfil de velocidade na suspensão seja linear. No caso de escoamento confinado, isso ocorre quando a camada de partículas formada é muito pequena se comparada com a meia altura do canal de escoamento. Assume-se assim que a camada concentrada de partículas se comporta como um fluido newtoniano cuja viscosidade depende apenas da fração volumétrica local:

$$\tau = \mu_0 \eta(\phi) \frac{du}{dy} \quad (2.26)$$

onde  $u$  é a velocidade paralela à parede,  $\mu_0$  é a viscosidade do fluido puro,  $\eta(\phi)$  é a viscosidade relativa da solução, ou a razão entre a viscosidade local e a do fluido puro,



$\mu(\phi)/\mu_0$ . A Equação (2.26) pode ser integrada mediante a condição de contorno de não deslizamento, em que  $u = 0$  em  $y = 0$ , uma vez que  $\tau$  é constante. O balanço de partículas, por sua vez, é dado como:

$$D \frac{d\phi}{dy} + v_w \phi = 0 \quad (2.27)$$

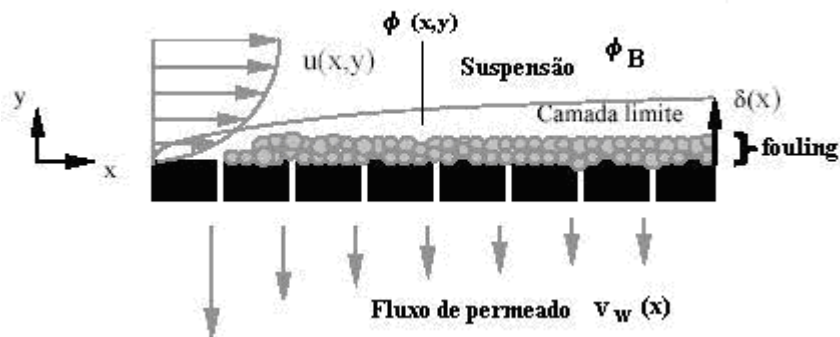
onde  $v_w$  é o fluxo de permeado, cujo valor assume-se como sendo conhecido,  $\phi$  é a fração volumétrica de partículas e  $D$  é o coeficiente de difusão hidrodinâmica. Na Equação (2.27), o primeiro termo representa a migração para fora da parede porosa devido à difusão hidrodinâmica induzida pela tensão de cisalhamento, ao passo que o segundo termo é o fluxo advectivo devido à permeação para dentro da parede. Esta equação é semelhante à Equação (2.14) da Teoria do Filme, mas considerando-se que nenhuma partícula atravessa a parede e, portanto, que a fração delas na corrente de permeado é zero. O coeficiente de difusão hidrodinâmica depende da fração volumétrica, do raio das partículas, do perfil de velocidade e da tensão de cisalhamento, sendo expresso por:

$$D = \left| \frac{du}{dy} \right| a^2 \bar{D}(\phi) \quad (2.28)$$

onde  $a$  é o raio das partículas e  $\bar{D}$  é a difusividade adimensional, expressa como:

$$\bar{D} = \frac{D\mu}{\tau a^2} \quad (2.29)$$

Abordagem semelhante foi feita por DAVIS e SHERWOOD (1990), para encontrar uma solução por similaridade para a microfiltração tangencial em estado estacionário. Com base nas equações de conservação de massa global e por componente e levando em conta também os efeitos do cisalhamento na parede durante o transporte de partículas, os autores obtiveram uma solução para o problema ilustrado na figura abaixo:



**Figura 2.12:** Esquema de formação da camada limite polarizada na microfiltração tangencial

As equações diferenciais de balanço usadas foram:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (2.30)$$

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left( D(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = 0 \quad (2.31)$$

A Equação (2.30) é a equação da continuidade para fluido incompressível, e a Equação (2.31) corresponde ao balanço de massa de partículas com base nos termos de advecção e difusão. O cisalhamento na camada limite exercido pelo escoamento tangencial da suspensão é igual ao cisalhamento na parede,  $\tau_w$ :

$$\mu(\phi) \frac{\partial u}{\partial y} = \tau_w \quad (2.32)$$

As seguintes condições de contorno devem ser aplicadas para resolver simultaneamente as equações (2.30) e (2.31):

$$\phi|_{y \gg \delta} = \phi_b \quad (2.33a)$$

$$u|_{y=0} = 0 \quad (2.33b)$$

$$v\phi = D(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{y=0} \quad (2.33c)$$

$$\phi|_{y=0} = \phi_w \quad (2.33d)$$

$$v|_{y=0} = -v_w \quad (2.33e)$$

As condições de contorno (2.33a) e (2.33b) indicam que fora da camada limite a fração de partículas é igual à fração da suspensão, e que a velocidade axial na parede da membrana é igual a zero (condição de não-deslizamento), respectivamente. A condição (2.33c) declara que não há fluxo de partículas através da membrana, ou seja, que a retenção é total. Por fim, as condições de contorno (2.33d) e (2.33e) indicam que na superfície da membrana, a fração volumétrica de soluto e a velocidade transversal são valores conhecidos. Entretanto, atenção deve ser levada em conta nestas duas últimas condições de contorno, pois na determinação de ambas, o sistema fica super especificado. Isso ocorre porque o sistema de equações diferenciais parciais descrito pelas equações (2.30) e (2.31) necessita de quatro condições de contorno para sua completa especificação, ao passo que existem cinco condições. Desta forma, ou especifica-se a fração de sólidos na superfície da membrana e resolve-se o perfil de fluxo de permeado, ou a partir de um fluxo conhecido, procura-se obter a distribuição de fração volumétrica em função de  $x$  e  $y$ .

ROMERO e DAVIS (1988) ampliaram esta análise admitindo que duas camadas de partículas são formadas: uma camada estagnada abaixo de uma camada dinâmica de partículas escoando paralelamente à superfície da membrana; a partir de uma posição crítica sobre esta, a camada dinâmica de partículas não consegue mais aceitar outras que tentem migrar da suspensão em direção à membrana, quando uma fração delas na superfície tenha alcançado um valor máximo. Todavia, aumentando-se o cisalhamento sobre a camada mais concentrada, aumenta-se o movimento de partículas nesta camada, levando a valores maiores de difusão hidrodinâmica de forma que a camada superior aumenta de tamanho, conseguindo “receber” mais partículas da suspensão.

A mesma abordagem de difusão hidrodinâmica e induzida por cisalhamento foi usada por HUISMAN e TRÄGARDH (1999a) e KROMKAMP *et al* (2005). Os primeiros realizaram experimentos e simulações numéricas para investigar o comportamento do fluxo limite na microfiltração tangencial de partículas de sílica, ao passo que os últimos usaram o modelo de treliças de Boltzmann. Neste modelo, parte-se da discretização da teoria cinética, movendo-se quantidades discretas de fluido sobre uma estrutura regular semelhante a uma treliça, ou armação com espaçamentos discretos. As partículas então colidem umas com as outras, e a cada colisão ocorre o movimento da partícula para um ponto adjacente. Unindo-se este conceito com as equações da conservação, é possível modelar-se muitos fenômenos físicos reais.

## 2.3 Métodos para melhoria do fluxo

De acordo com VAN DEN BERG (1988) e MULDER (1996) existem alguns métodos para a melhoria do fluxo de permeado, que são:

- Adaptação das condições de operação no equipamento

A filtração transversal ou *dead-end* é aquela na qual não há mistura perfeita e as condições são menos favoráveis para a manutenção do desenvolvimento do fluxo, uma vez que se caracterizam por levarem a baixos valores do coeficiente de transferência de massa, facilitando a polarização e o *fouling*. Promotores de turbulência (chicanas ou *baffles*) também promovem um aumento do coeficiente de transferência de massa. Mais precisamente, a presença de espaçadores bem como sua orientação geométrica apresenta profundos efeitos no escoamento; experimentos com uma rede de espaçadores para obtenção de correlações para prever o coeficiente de transferência de massa foram realizados por COSTA *et al.* (1994). Promotores de turbulência estáticos foram usados nos experimentos de microfiltração tangencial de leite desnatado, levados a cabo por KRSTIC *et al* (2004).

- Mudança das condições de alimentação

Soluções mais concentradas tendem a facilitar a deposição de soluto sobre a membrana. O aumento da concentração modifica as propriedades de transporte tais como difusividade mássica e viscosidade. Contudo, quando o objetivo é concentrar soluções deve-se determinar a máxima concentração a partir da qual o fluxo permeado cai drasticamente; também é aconselhado se trabalhar com baixos fatores de concentração. Velocidades de

alimentação maiores dificultam o depósito de material e a alteração de parâmetros como o pH da suspensão pode alterar o comportamento das partículas sólidas no meio, resultando em menores chances de polarização, dependendo de cada caso.

- Tratamento da membrana

Tratamentos químicos podem alterar as características de superfície da membrana de forma a torná-la menos suscetível à adsorção. A remoção *in situ* da camada limite pode ser possível pelo uso de enzimas hidrolíticas aplicadas na superfície. A pré-adsorção da membrana por um componente que possa ser facilmente removido ou o uso de membranas de superfícies hidrofílicas (onde proteínas são menos facilmente adsorvidas) são outras maneiras de reduzir a queda do fluxo permeado.

- Métodos de limpeza

A limpeza periódica de membranas é necessária mesmo para um sistema operando em condições ótimas, pois a membrana acumula sujeiras com o tempo de uso. Existem basicamente quatro tipos de limpeza: a limpeza hidráulica, que inclui a retrolavagem, pressurização e despressurização alterando-se a direção do escoamento numa dada frequência; a limpeza mecânica, que consiste na remoção mecânica ou manual de depósitos mediante uma haste com esponjas ou outro componente limpador; a limpeza química, onde se aplicam ácidos, álcalis, detergentes, desinfetantes e agentes complexantes diversos de forma a remover total ou parcialmente os depósitos de soluto; e por fim a limpeza elétrica, que é a aplicação de um campo elétrico através da membrana, onde as partículas ou moléculas carregadas serão forçadas a migrarem na direção do campo, para longe da superfície da membrana. A vantagem deste último método é que pode ser aplicado durante o andamento do processo de filtração, mas arranjos especiais no módulo e o uso de membranas condutoras de eletricidade são necessários. A conclusão de que a aplicação de um campo elétrico na membrana resulta em melhorias no fluxo e diminuição da concentração de soluto sobre a superfície desta, foi confirmada também em trabalho de simulação desenvolvido por KARTHIK *et al* (2002), onde a eletroultrafiltração de proteína de soro bovino foi simulada levando-se em conta propriedades constantes e variáveis, dependentes da concentração local da proteína.

Um outro método de limpeza é o uso de ultra-som. Nesse sentido, LAMMINEN *et al.* (2006) trabalharam com um transdutor embutido oposto à superfície da membrana, o qual era capaz de induzir cavitação por meio da geração de ultra-som. Foram testadas diferentes faixas de potências, e verificou-se que o sistema transdutor era capaz de aumentar o valor do fluxo permeado, à medida que a potência do sistema era aumentada. Os testes foram realizados com a aplicação de uma camada de *fouling* usando partículas de sulfato de poliestireno, cujo diâmetro era de 0,53  $\mu\text{m}$ .

LI *et al.* (2003) aplicaram uma técnica ultra-sônica, não destrutiva e em tempo real para medida *in situ* e não invasiva do estudo do *fouling* e limpeza na ultrafiltração. Foram empregadas membranas de polisulfona, tendo como alimentação o efluente de uma estação de tratamento. Medidas de fluxo permeado e da estrutura da membrana por meio de microscopia

---

corroboraram os resultados encontrados a partir da técnica empregada. Esta técnica consistia em fazer com que a camada de *fouling* produzisse um eco a partir de um sinal diferencial de ultra-som, comparando-se com sinais de ondas de referência.

Verifica-se que há um grande número de trabalhos no sentido de esclarecer os fenômenos hidrodinâmicos e de transferência de massa na camada limite de processos de separação com membranas; todavia, uma abordagem geral que se aplique a qualquer caso ainda não foi encontrada devido às diferentes configurações existentes e mesmo por causa da complexidade dos fenômenos envolvidos no processo. Nesse sentido, o uso de simulação fluidodinâmica computacional aparece como um auxílio na compreensão dos fenômenos relacionados aos processos de separação com membranas, de forma que este trabalho vem a ser um estudo complementar com o objetivo de melhorar o entendimento de tais fenômenos.

## Capítulo 3

# Mecânica de Fluidos Computacional – Metodologia Matemática e Revisão Bibliográfica

Neste capítulo serão abordados alguns aspectos relacionados à simulação fluidodinâmica, sendo apresentadas também as metodologias matemáticas empregadas na maioria das simulações. Finalmente, serão apresentados alguns trabalhos aplicados na área de processos de separação por membranas.

### 3.1 Visão geral da tecnologia CFD (*Computational Fluid Dynamics*)

O recente avanço na capacidade de processamento dos computadores, bem como o surgimento de modernas técnicas numéricas, tem produzido um aumento no uso da simulação fluidodinâmica computacional. A complexidade das equações de conservação de quantidade de movimento, energia e massa, e outras equações (equações cúbicas de estado, correlações empíricas, taxas de reações químicas) tornava, a apenas poucas décadas atrás, inviável a solução de uma série de problemas de engenharia, devido à baixa capacidade computacional.

As aplicações da simulação computacional de processos envolvendo fluidos e transferência de calor são muitas. Um exemplo é o da indústria aeroespacial, onde a aerodinâmica de aviões e foguetes deve ser determinada de forma que fatores como sustentação, arraste e turbulência possam ser previstos antes da construção do aparato final. Desta forma, pode ser verificado se a potência e o formato das turbinas são adequados para manter a aeronave no ar ou se a forma da asa é apropriada para um determinado tipo de voo. Muitos destes testes foram e ainda são feitos nos chamados *túneis de vento*. Estes testes são extremamente caros, além de consumirem muito tempo no desenvolvimento de um projeto emergindo uma das vantagens oferecidas pela simulação. Todavia, em algumas situações mais

complicadas onde a simulação ainda não fornece resultados satisfatórios, o uso do túnel de vento é necessário. A combinação entre simulação e experimentação é de importância fundamental no desenvolvimento e na otimização de processos. Alguns outros exemplos de áreas de pesquisa nas quais a dinâmica de fluidos computacional vem sendo utilizada foram apresentadas por SHAW (1992):

- *projeto de mísseis* - assim como em aviões, o conhecimento dos fenômenos inerentes ao voo é de extrema importância, sobretudo para equipamentos de grande importância militar;
- *vazamentos em reatores nucleares* - devido à impossibilidade de realizar experimentos por questões de segurança, técnicas de CFD também se aplicam neste caso, onde o conhecimento do comportamento de um vapor radioativo é crucial em termos de tomada de decisões;
- *chamas em queimadores* - o conhecimento da dinâmica da combustão é importante para o melhor projeto de queimadores em caldeiras, fornalhas, turbinas de foguetes, fornos industriais e outros equipamentos que envolvam combustão;
- *circulação de ar em câmaras de combustão* - o ar a ser utilizado numa câmara de combustão deve ser o mínimo necessário para que a própria combustão se inicie e se mantenha, operando o mais perto possível de condições ótimas; assim, fatores como perda de carga e distribuição de velocidades no interior das câmaras são importantes;
- *escoamento de ar refrigerante em equipamentos elétricos* - dispositivos elétricos dissipam calor devido ao efeito Joule e este calor deve ser retirado de forma a evitar um superaquecimento do dispositivo;
- *dispersão de poluentes em rios, oceanos e na atmosfera* - simulação de prováveis acidentes com produtos perigosos é uma interessante aplicação das técnicas de CFD, onde o conhecimento da dispersão de determinado poluente sobre um curso de água ou no ar ambiente deve ser conhecido para fins de segurança;
- *previsão do clima* - constitui-se em uma das áreas de maior impacto; simulações computacionais do clima são de extrema importância para a agricultura e medidas de controle ambiental.

Basicamente, existem três maneiras de se resolver um problema envolvendo mecânica de fluidos e processos de transferência de calor e massa: métodos analíticos, métodos numéricos e métodos experimentais.

Os métodos analíticos são aqueles usados na obtenção de formas fechadas de equações diferenciais parciais. Assim, as soluções obtidas podem ser expressas como funções matemáticas conhecidas. O grande problema dos métodos analíticos é que são aplicáveis a casos muito simples que geralmente não acontecem na maioria dos processos de interesse. Normalmente, muitas hipóteses simplificativas devem ser feitas de forma a obter-se uma solução exata, e isto causa um afastamento da descrição real do problema.

Os métodos numéricos, por sua vez, foram a grande solução de muitos problemas da engenharia e das ciências exatas como um todo, pois conseguem aquilo que os métodos analíticos são incapazes: resolver problemas cuja complexidade é bem maior, sob as mais variadas condições. Isto, aliado aos pacotes de geometria embutidos em simuladores presentes no mercado, permite uma visualização simples do fenômeno físico, sob variadas condições. Porém, a grande desvantagem de tais métodos é o tempo computacional gasto para a resolução dos problemas. Mesmo simulações relativamente simples podem levar alguns minutos para que as iterações cheguem a um nível de convergência ou erro numérico aceitável. Além disso, problemas como estabilidade e consistência, que serão abordados mais adiante, podem dificultar a obtenção de resultados fisicamente coerentes. Nem todas as técnicas numéricas existentes são apropriadas para todos os tipos de problemas e, desta forma, a escolha de uma ou mais técnicas dependerá fortemente do tipo de problema que se deseja resolver.

Os métodos experimentais possuem a vantagem de lidar com sistemas reais; quando muitas dificuldades estão envolvidas, impedindo o uso de técnicas analíticas e/ou numéricas, a experimentação apresenta-se como o único caminho possível. Comparando-se os três métodos em termos de custo, os experimentais, em geral, são os mais onerosos, pois envolvem muitos gastos com equipamentos e energia. Os métodos analíticos possuem custo praticamente zero, uma vez que a grande maioria das técnicas é de conhecimento público e foram desenvolvidas há anos e encontram-se bem consolidadas. Os métodos numéricos, por sua vez, possuem apenas custo computacional, muito inferior aos custos da experimentação.

### 3.1.1 Metodologia CFD

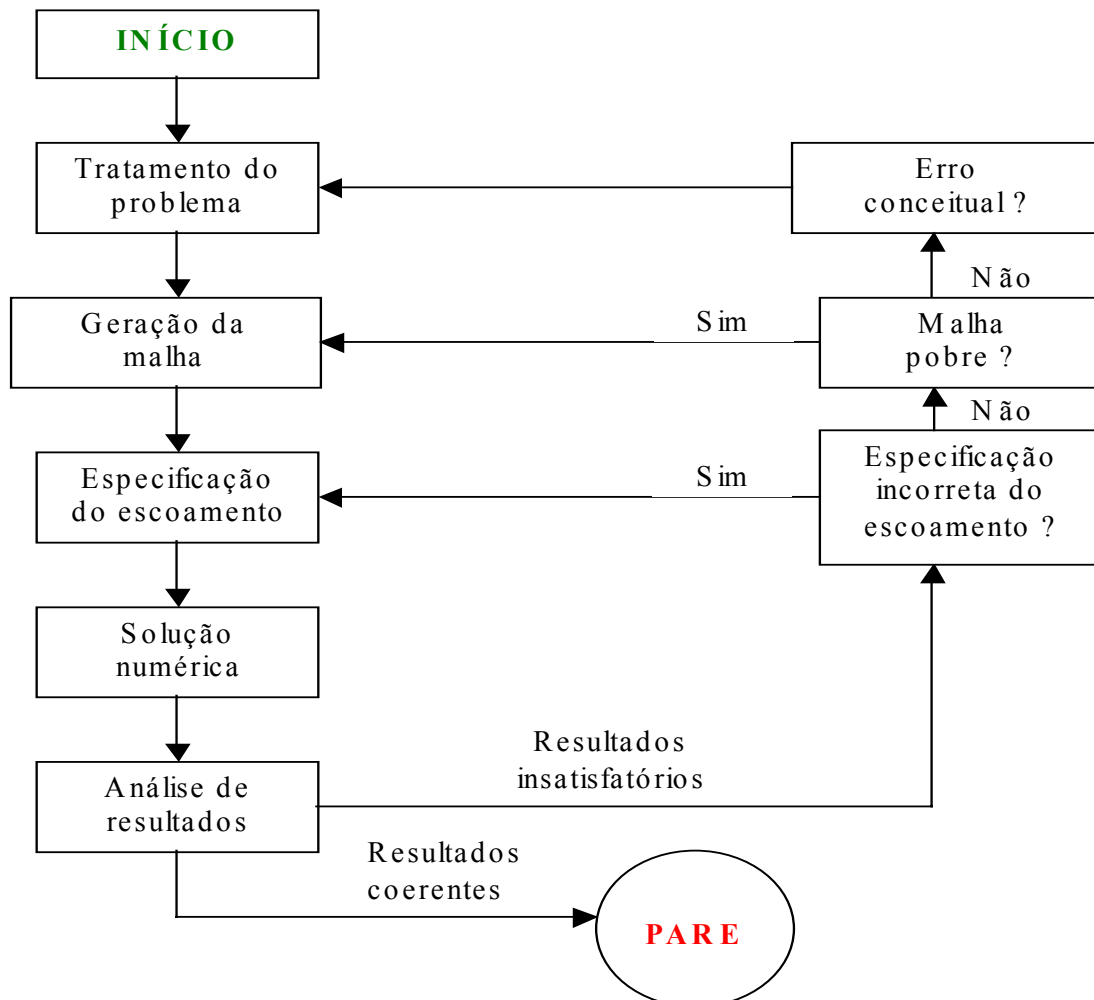
Atualmente existe uma variedade de programas e pacotes computacionais desenvolvidos por grandes companhias que são usados na resolução de uma grande quantidade de problemas. Apesar de existirem diferenças entre os programas, todos eles são baseados nos mesmos princípios físicos e matemáticos, e o que muda, muitas vezes, de um para outro, é a forma de implementação numérica e o tratamento gráfico das soluções. Assim, as seguintes ações estão envolvidas, independente do tipo de simulação ou programa empregado:

- a construção de uma grade de pontos, ou um conjunto de volumes ou elementos, nos quais as variáveis a serem calculadas são armazenadas;
- a especificação das condições inicial e de contorno apropriadas;
- a especificação das propriedades físicas do fluido contidas nas equações, as quais podem variar com os parâmetros de interesse;
- a especificação dos parâmetros de controle que afetam a solução numérica das equações (número máximo de iterações, convergência desejada, métodos alternativos de solução).

O processo de solução de um problema físico usando CFD pode ser resumido conforme o fluxograma apresentado na Figura 3.1, o qual foi proposto por SHAW (1992),



onde se tem um conjunto de passos a serem seguidos até a obtenção da solução. É importante ressaltar que muitos problemas não são facilmente resolvidos apenas obedecendo a um conjunto de regras simples, e que muitas considerações feitas para um problema podem não ser adequadas para outro.



**Figura 3.1:** Fluxograma para resolução de um problema utilizando CFD

O tratamento do problema envolve, inicialmente, uma idéia geral do mesmo, com a verificação do tipo de problema: transiente ou estacionário, a definição das variáveis envolvidas e da geometria. O passo seguinte consiste na geração da malha e na especificação do escoamento de tal forma a estabelecer as equações governantes, as condições inicial e de contorno, as propriedades físicas (constantes ou não) e as relações constitutivas (equações de estado, equações de transporte e equações de taxas de reações químicas). Finalmente, tem-se a implementação do algoritmo e a resolução do problema através das técnicas numéricas empregadas no simulador.

A resolução de um problema de CFD, independentemente do software, consiste de três etapas: pré-processamento; solução numérica do problema e pós-processamento.

Toda a atividade envolvida na montagem e elaboração de um problema de CFD antes da etapa de solução numérica é denominada de pré-processamento. Nas atividades mostradas no fluxograma da Figura 3.1, o pré-processamento inclui as etapas de tratamento do problema, geração da malha e especificação do escoamento (geometria), além da definição do método numérico a ser empregado bem como os parâmetros necessários para a resolução.

A geração da malha consiste na subdivisão do domínio em várias partes ou pedaços, onde as equações serão discretizadas e resolvidas. Se a geometria for tridimensional, então o espaço em questão será composto por uma miríade de pequenos elementos de volume cujo tamanho é fixo ou variável, de acordo com a geometria em estudo e das características do problema. A parte mais difícil e também a mais importante do pré-processamento é a construção da geometria e a geração da malha. A qualidade deste trabalho final influenciará fortemente a qualidade da solução e a facilidade para obtê-la. A geometria pode ser construída a partir de pacotes separados das mesmas empresas que desenvolvem o simulador ou mesmo usando programas de outras companhias, notadamente aquelas que trabalham com programas de desenho (por exemplo CAD). Teoricamente, quanto maior o número de subdivisões numa geometria, melhor esta é representada, pois cada porção estará cada vez mais tendendo a um valor infinitesimal, o que, a princípio, leva a resultados mais precisos. Todavia, na prática, isto nem sempre ocorre: malhas muito concentradas (com muitas subdivisões) ou muito refinadas aumentam o tempo de processamento, e, se ligadas a um método numérico pobre, diminuem as chances de convergência; na situação oposta, malhas grosseiras ou com poucos elementos podem levar a resultados imprecisos ou à não convergência do problema. Na montagem da malha deve se levar em consideração o fenômeno físico envolvido, para que se possa refiná-la nas regiões de gradientes elevados a fim de permitir a convergência para a solução correta.

Uma vez estabelecidas a geometria e a malha, as outras etapas se tornam relativamente simples se o simulador apresentar uma interface gráfica adequada. As condições de contorno especificadas podem ser visualizadas em cada parte da geometria e as propriedades dos fluidos podem ser facilmente ajustadas; caso estas variem durante o processo é necessário a introdução da expressão matemática, que represente esta variação. Fatores como precisão, número máximo de iterações e parâmetros usados em métodos numéricos também são ajustados.

A solução numérica consiste na solução iterativa do problema e, nesta etapa, geralmente, o usuário não pode interferir. Alguns programas, entretanto, permitem a alteração de condições ajustadas no pré-processamento, como o número máximo de iterações e a precisão desejada, além de opções internas do programa ou *solver* que podem ajudar na resolução.

No pós-processamento as soluções são visualizadas e interpretadas. Outros cálculos também podem ser realizados a partir dos resultados obtidos, como o de valores médios das variáveis de interesse (velocidade, pressão, temperatura, tensão de cisalhamento) além da representação dos perfis destas variáveis através de gráficos e superfícies de contorno. Campos vetoriais e linhas de corrente também podem ser visualizados e efeitos como a turbulência podem ser previstos.

Algumas características são importantes no momento da escolha de um programa de simulação CFD, entre elas pode-se citar a geometria, o tipo de escoamento, efeitos de transferência de calor, número de fases e componentes, presença de reações químicas, resultados almejados, interface, velocidade da solução, disponibilidade de *hardware*, entre outras. Finalmente, é importante ressaltar que a verificação de uma simulação mediante a realização de experimentos é o caminho mais seguro para garantir a confiabilidade de um determinado pacote computacional.

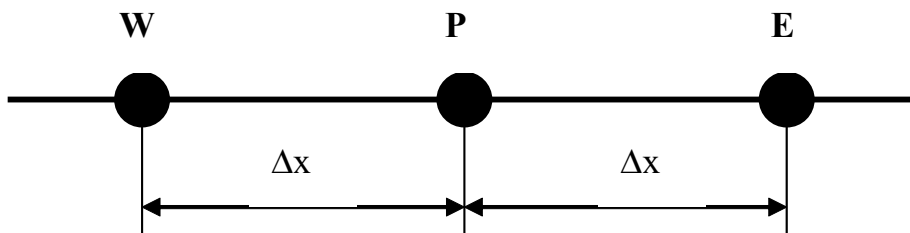
### 3.1.2 Métodos de discretização numérica

A transformação de uma equação diferencial parcial em uma equação algébrica é conhecida como discretização. Os métodos mais comuns de discretização numérica são os de finitas e volumes finitos; cada um deles será brevemente apresentado a seguir.

O método das diferenças finitas consiste no uso da série de Taylor para gerar equações algébricas que sirvam como aproximações das derivadas presentes nas equações diferenciais; as derivadas são expressas como diferenças entre valores de uma variável em vários pontos do espaço ou do tempo. Assim, supondo-se que o valor de uma variável  $F$  qualquer deva ser determinado num ponto  $x$  e considerando-se dois pontos situados a uma distância  $\Delta x$  para frente e para trás desse ponto (Figura 3.2), a função em termos de séries de Taylor ao redor destes pontos tem a seguinte forma:

$$F_E = F_P + \left. \frac{dF}{dx} \right|_P \Delta x + \left. \frac{d^2 F}{dx^2} \right|_P \frac{\Delta x^2}{2!} + \left. \frac{d^3 F}{dx^3} \right|_P \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad (3.1)$$

$$F_W = F_P - \left. \frac{dF}{dx} \right|_P \Delta x + \left. \frac{d^2 F}{dx^2} \right|_P \frac{\Delta x^2}{2!} - \left. \frac{d^3 F}{dx^3} \right|_P \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad (3.2)$$



**Figura 3.2:** Representação da discretização por diferenças finitas

Somando-se as equações (3.1) e (3.2), pode-se isolar o termo de mais alta derivada que se deseja expressar; por exemplo, isolando a derivada de segunda ordem, obtém-se:

$$\left. \frac{d^2 F}{dx^2} \right|_P = \frac{F_E + F_W - 2F_P}{\Delta x^2} + E(\Delta x^2) \quad (3.3)$$

onde  $E(\Delta x^2)$  é o erro de truncamento, visto que foram desprezados os termos de derivada de mais alta ordem.

A primeira derivada é expressa de duas formas:

$$\frac{dF}{dx} = \frac{F_E - F_P}{\Delta x} + E(\Delta x) \quad (3.4)$$

$$\frac{dF}{dx} = \frac{F_P - F_W}{\Delta x} + E(\Delta x) \quad (3.5)$$

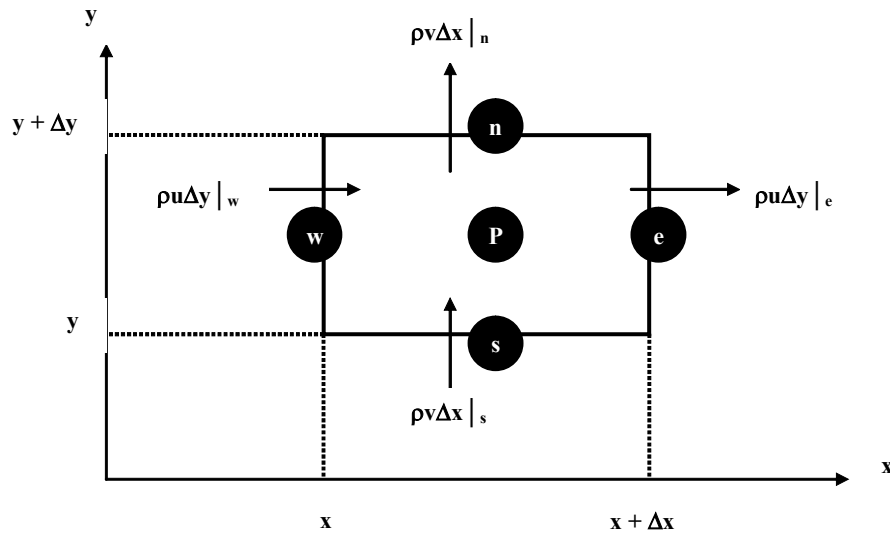
onde  $E(\Delta x)$  é o erro de truncamento na expressão da primeira derivada.

A forma da Equação (3.3) é chamada de diferenças centrais com precisão de segunda ordem (pois exclui os termos a partir da terceira ordem) ao passo que as equações (3.4) a (3.5) são as expressões de discretização para frente e para trás, respectivamente, com precisão de primeira ordem. A abordagem para o caso transiente é semelhante:

$$\frac{dF}{dt} = \frac{F_P - F_P^0}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad (3.6)$$

em que  $F_P^0$  é o valor da variável  $F$  no ponto P no instante de tempo imediatamente anterior. Os valores da variável  $F$  neste passo de tempo são conhecidos para todos os outros valores do domínio espacial. Desta forma, é possível desenvolver expressões análogas para derivadas de qualquer ordem, gerando um conjunto de equações algébricas que representa, dentro de um erro de truncamento, a equação diferencial em questão. Subdividindo-se um domínio em várias partes e gerando-se equações que consistem somente dos valores das variáveis nos pontos dados, um conjunto de equações é obtido de forma que sua solução numérica será a solução, ainda que aproximada, para a equação ou sistema de equações diferenciais.

O método de discretização mais usado para a simulação de problemas envolvendo escoamento de fluidos e transferência de calor e massa é o método dos volumes finitos. Ele é baseado na realização de um balanço (de massa, de quantidade de movimento ou de energia) sobre um volume de controle determinado, onde os fluxos das variáveis em questão atravessam as faces do volume. No limite, quando o volume tende a zero, obtém-se a forma diferencial do balanço, que nada mais é do que a equação diferencial de conservação. Assim, se um número de volumes muito pequeno for considerado, e as equações forem discretizadas para tratar desses volumes, reduzem-se o conjunto de equações diferenciais a simples equações de balanço na forma finita. Existem duas maneiras de se chegar às equações de volumes finitos: fazendo-se um balanço nos volumes elementares da propriedade que está sendo conservada, ou partindo-se da equação diferencial na forma conservativa (aquela em que os fluxos aparecem dentro da derivada) e integrá-la sobre o volume elementar, no espaço e no tempo. As duas maneiras são equivalentes, pois a dedução das equações diferenciais passa pela realização de um balanço num volume infinitesimal. A Figura 3.3 ilustra o balanço num volume bidimensional elementar:



**Figura 3.3:** Balanço de massa num volume finito

O balanço na Figura 3.3 é expresso como:

$$\rho u \Delta y|_e - \rho u \Delta y|_w + \rho v \Delta x|_n - \rho v \Delta x|_s = 0 \quad (3.7)$$

onde  $n$ ,  $s$ ,  $e$ ,  $w$  são as direções norte, sul, leste e oeste, respectivamente, que é a nomenclatura clássica usada para identificar as faces do volume de controle;  $u$  e  $v$  são as componentes de velocidade nas direções  $x$  e  $y$ , respectivamente. Dividindo a Equação (3.7) por  $\Delta x \Delta y$ , obtém-se:

$$\frac{\rho u|_e - \rho u|_w}{\Delta x} + \frac{\rho v|_n - \rho v|_s}{\Delta y} = 0 \quad (3.8)$$

Levando-se a Equação (3.8) ao limite, obtém-se, finalmente:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0 \quad (3.9)$$

Fazendo-se o caminho inverso, ou seja, integrando Equação (3.9) entre as faces norte e sul, na direção  $y$ , e leste e oeste, na direção  $x$ , tem-se:

$$\int_w^n \int_s^e \left[ \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) \right] dx dy = 0 \quad (3.10)$$

$$\int_s^n [\rho u|_e - \rho u|_w] dy + \int_w^e [\rho v|_n - \rho v|_s] dx = 0 \quad (3.11)$$

A diferença entre os pontos norte e sul é  $\Delta y$  e entre os pontos leste e oeste,  $\Delta x$ . Chega-se então a:

$$\rho u \Delta y|_e - \rho u \Delta y|_w + \rho v \Delta x|_n - \rho v \Delta x|_s = 0 \quad (3.12)$$

que é a mesma Equação (3.7). Realizando-se a integração para todos os volumes elementares, obtém-se o sistema de equações algébricas. Procedimento semelhante é feito para o balanço de quantidade de movimento e energia. A realização de tais balanços é mais simples numa geometria retangular do que numa geometria mais complicada, de aspecto irregular.

### 3.1.3 Consistência, Estabilidade e Convergência

As equações de conservação e demais equações provenientes da engenharia dão origem a sistemas de equações cujo comportamento é difícil de prever. Até o presente momento, não foi descoberto um procedimento geral que permita dizer se determinadas aproximações numéricas sempre levarão a uma solução fisicamente coerente. A certeza de que determinados parâmetros são apropriados depende do conhecimento e experiência do problema em estudo. Desta forma, consistência, estabilidade e convergência são fatores importantes a serem considerados em simulação fluidodinâmica. Consistência é quando o tamanho da malha espacial e da discretização temporal, ao tenderem a zero, reproduzem fielmente a equação diferencial. Ou seja, as equações discretizadas devem tender às equações diferenciais quando o tamanho de cada elemento da malha tender a zero. Entretanto, conforme MALISKA (1995), em muitas aproximações numéricas os erros de truncamento crescem com o refinamento da malha.

Estabilidade é quando os resultados obtidos pela simulação numérica se aproximam cada vez mais da solução exata. Uma vez que a grande maioria das equações e sistemas de equações diferenciais não possui solução analítica conhecida, é difícil determinar quais aproximações matemáticas geram soluções confiáveis. Fatores como erros de arredondamento e condições de contorno mal aplicadas podem gerar soluções matematicamente corretas (soluções cuja convergência foi alcançada) mas fisicamente incoerentes.

Convergência é a habilidade que um sistema numérico possui de resolver as equações que foram discretizadas, tendendo à sua solução por meio de um processo iterativo. Assim, se os valores das variáveis nos pontos do domínio tendem a valores fixos que representem a solução do sistema, diz-se que a convergência foi alcançada. A convergência é um parâmetro necessário, pois uma vez que a solução analítica não é conhecida, sabe-se que a simulação chegou ao fim quando algum critério de parada é obedecido. O principal critério utilizado é aquele no qual os balanços de massa, quantidade de movimento e energia são obedecidos ou permanecem abaixo de um critério de erro, ao final da simulação.

### 3.1.4 Níveis de formulação de modelos

Existem vários níveis de formulação de modelos matemáticos, de tal forma que é possível modelos tanto a nível atômico e molecular, quanto a níveis macroscópicos. Um bom

modelo matemático deve representar fielmente o sistema estudado e deve poder ser resolvido num tempo razoavelmente adequado. Modelos matemáticos podem ser teóricos ou experimentais; modelos teóricos são baseados em leis de conservação e relações constitutivas, ao passo que modelos baseados em experimentos são construídos a partir de relações empíricas ou semi-empíricas envolvendo resultados experimentais. A Tabela 3.1 (MALISKA (1995)) exprime alguns níveis para formulação de modelos.

**Tabela 3.1:** Níveis de formulação de modelos

Nível dos balanços de conservação	Informação necessária	Equação resultante
Conservação para cada molécula	Massa molar, Transferência de quantidade de movimento  Campos de forças, elétricos e magnéticos,	Equação para cada molécula
Tempo e comprimento estão entre os valores moleculares e de turbulência	Propriedades termodinâmicas e de transporte como: massa específica, viscosidade, condutividade térmica	Sistema de equações diferenciais parciais
Tempo e comprimento são maiores que as escalas de turbulência	Propriedades termodinâmicas e de transporte, Tensões de Reynolds, Relações de transferência de calor e massa turbulenta	Sistema de equações diferenciais parciais
Volume de controle coincidente com o domínio da solução em alguma direção.	Condições de contorno onde o volume de controle coincide com o domínio.	Sistema de equações diferenciais parciais ou algébricas.

Mesmo com os avanços na tecnologia de computadores, a solução de problemas a nível atômico ou molecular ainda está muito longe de ser conseguida. O nível seguinte ainda é intratável, pois as equações diferenciais precisam ser resolvidas para escalas de tempo e comprimento cujos valores encontram-se entre as escalas moleculares e turbulentas. Os níveis seguintes são aqueles resolvidos atualmente. As equações de conservação para estes níveis são as seguintes:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j u_i) = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + S^{u_i} \quad (3.14)$$

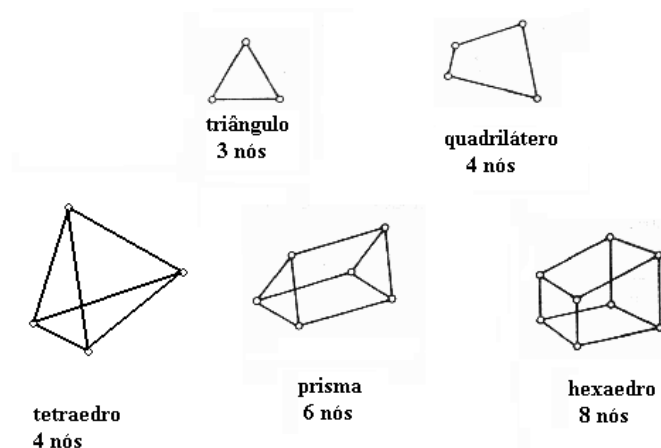
$$\frac{\partial (\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j T) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{k}{c_P} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + S^T \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial(C_i)}{\partial t} + \frac{\partial(u_j C_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( D \frac{\partial C_i}{\partial x_j} \right) + S C_i \quad (3.16)$$

A Equação (3.13) é a equação da conservação da massa total (continuidade). As equações de Navier-Stokes estão representadas em (3.14), onde  $u_i$  são os  $i$ -componentes de velocidade  $u$ ,  $v$ , e  $w$ , e  $x_i$  são as  $j$ -variáveis espaciais  $x$ ,  $y$  e  $z$ . A Equação (3.15) representa a conservação de energia, e a Equação (3.16) representa a conservação da massa para o componente  $i$ . Nas equações (3.14) a (3.16), o primeiro termo do lado esquerdo representa o acúmulo da propriedade e o segundo termo correspondem às parcelas advectivas, não-lineares e de difícil tratamento numérico. No lado direito encontram-se os termos difusivos, os quais contêm as difusividades de quantidade de movimento (Equação (3.14)) e térmica (Equação (3.15)), quando divididos pela massa específica, e a difusividade mássica (Equação (3.16)). O termo fonte  $S$  representa a geração (ou consumo) para cada propriedade: para as equações de balanço de quantidade de movimento, em geral o termo fonte envolvido é o campo gravitacional numa direção especificada; para as equações da energia e massa de um componente, tem-se a geração térmica de energia e a geração de componente via reação química, respectivamente. Maiores detalhes envolvendo as equações (3.13) a (3.16) podem ser encontradas em BIRD *et al* (1960).

### 3.2 Construção da malha

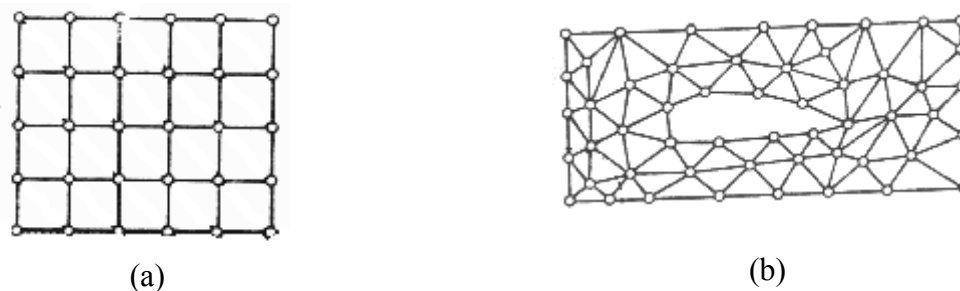
A etapa de construção da malha é a mais importante em uma simulação fluidodinâmica, pois as características da malha influenciarão diretamente a qualidade dos resultados obtidos, bem como o tempo necessário para obtê-los. À medida que se trabalha com geometrias mais complicadas o processo de geração de uma malha computacional se torna também mais complicado. Não importando o método de discretização usado, uma grade ou malha de pontos precisa ser gerada convenientemente de forma que as equações discretizadas sejam aplicadas nestes pontos. Para tanto, a importância de um bom conhecimento da geometria do problema é fundamental para a geração de uma malha que represente o mais fielmente possível essa geometria. A Figura 3.4 ilustra as diferentes geometrias básicas sobre as quais uma malha pode ser formada, sendo ela tanto bidimensional quanto tridimensional.



**Figura 3.4:** Diferentes formatos para malhas

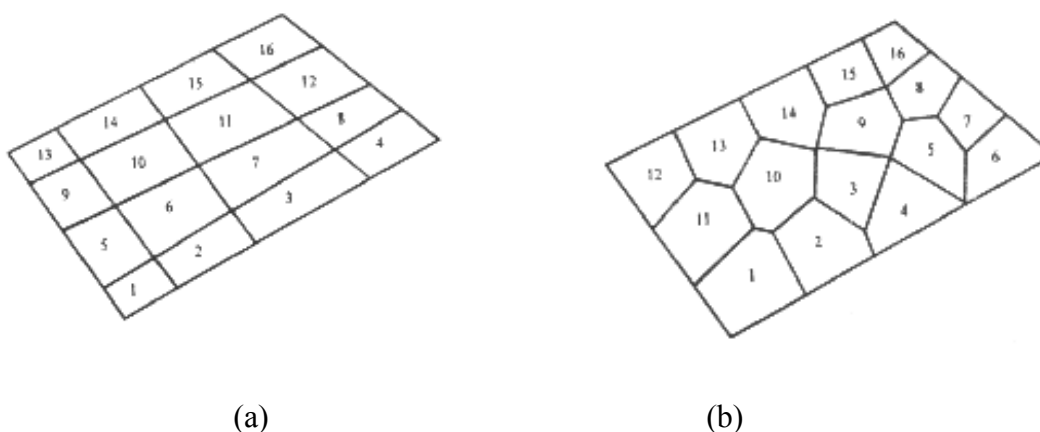


Dependendo da forma como a malha é arranjada na geometria, ou mais precisamente sua topologia, pode-se ter uma malha estruturada ou não-estruturada. Malhas estruturadas são aquelas onde a grade de pontos está distribuída de uma maneira regular através do domínio (Figura 3.5a). A alteração do formato da geometria não altera as posições relativas dos pontos entre si, de forma que qualquer ponto na malha estará conectado aos mesmos pontos vizinhos, antes e depois da alteração da geometria. Já em malhas não-estruturadas (Figura 3.5b), os pontos não estão ligados entre si de maneira regular, de forma que alterações na geometria levarão a alterações na conectividade dos pontos.



**Figura 3.5:** Malha estruturada (a) e não-estruturada (b)

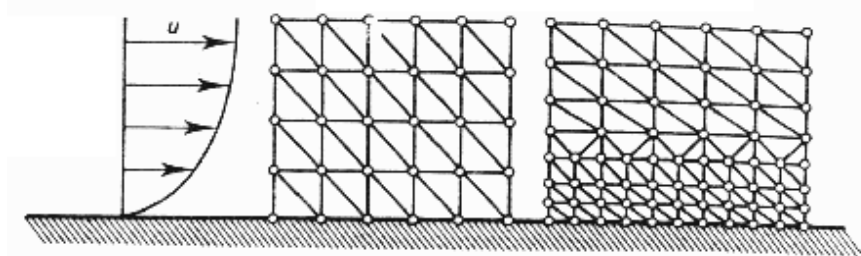
A escolha da topologia mais adequada dependerá da natureza de cada problema. Em geral, códigos de programação escritos com base em malhas estruturadas levam a programas mais eficientes, pois a regra de ordenação dos pontos e células é facilitada (Figura 3.6a), facilitando também a manipulação dos dados nestes pontos, o que não acontece nas não-estruturadas (Figura 3.6b). Todavia, a criação de malhas estruturadas em geometrias mais complicadas é mais difícil do que com malhas não-estruturadas, uma vez que estas últimas apresentam maior liberdade de arranjo e posicionamento dos pontos.



**Figura 3.6:** Ordenação das células em malha estruturada (a) e não-estruturada (b)

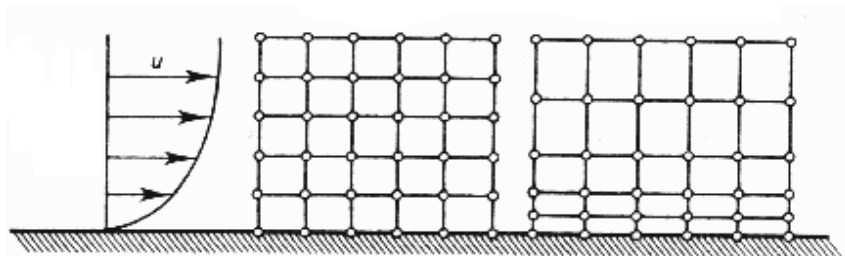
É possível modificar uma malha de forma a obter-se uma solução mais confiável. O refino em regiões onde ocorrem altos gradientes das variáveis também é um procedimento comum. A Figura 3.7 ilustra esta situação. Pontos adicionais são colocados próximos à parede

de forma a capturar melhor os efeitos da camada limite de velocidade. A malha original possuía espaçamentos iguais, e, após o refino, os nós adicionados fizeram com que ela ficasse mais densa na região de interesse, com espaçamentos menores entre eles, alterando-se assim a topologia.



**Figura 3.7:** Refino da malha

A adaptação da malha é outra técnica usada com o mesmo objetivo da técnica de refino descrita acima. Na adaptação, a topologia permanece a mesma, mas os pontos são movidos de forma que a densidade (número de pontos por unidade de área ou volume da geometria) seja maior na região desejada, conforme mostra a Figura 3.8. Diferente do caso anterior, o número de nós permanece o mesmo, mudando apenas a posição de alguns deles.



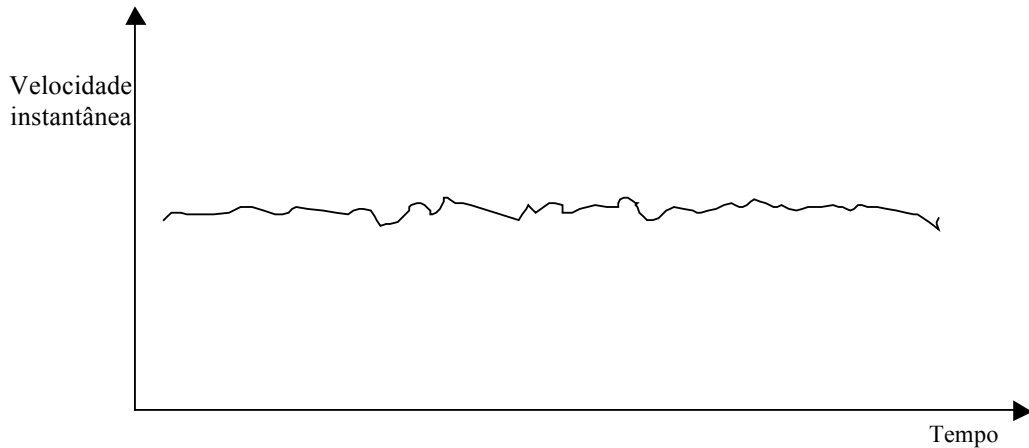
**Figura 3.8:** Adaptação da malha

### 3.3 Turbulência

A turbulência ocorre em diversos fenômenos físicos podendo-se citar o escoamento supersônico ao redor de aeronaves, o movimento do ar em fenômenos meteorológicos, o escoamento no interior de tubulações industriais, entre outros; é um fenômeno imprevisível e altamente sensível às condições iniciais e de contorno impostas (FREIRE *et al* (2002)). A seguir será feita uma breve revisão sobre escalas e modelos de turbulência.

A grande característica dos escoamentos turbulentos reside no fato de que, tanto a velocidade quanto a pressão, num certo ponto do espaço, não são fixas no tempo (Figura 3.9). Os agrupamentos de fluido que desempenham tais flutuações não consistem de simples

moléculas, mas sim de grandes agrupamentos macroscópicos de tamanho variável. O tamanho destes agrupamentos determina a escala de turbulência.



**Figura 3.9:** Flutuações de velocidade no escoamento turbulento

### 3.3.1 Escalas de turbulência

Existem várias escalas de comprimento, as quais estão ligadas, tanto às dimensões do canal de escoamento quanto à influência da viscosidade. Para o escoamento sobre uma placa plana, por exemplo, tem-se que nas proximidades da parede, as forças viscosas são da mesma ordem de grandeza que as forças inerciais, de forma que se pode escolher um novo comprimento  $l$  que obedeça à seguinte relação:

$$\frac{\rho U^2}{L} = \frac{\mu U}{l^2} \quad (3.17)$$

onde  $\rho$  é a massa específica,  $U$  é a velocidade da corrente livre ou *bulk*,  $L$  é o comprimento da placa,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica e  $l$  é o comprimento que representa a escala. Quando rearranjada, fornece a seguinte equação:

$$\frac{l}{L} \approx \left( \frac{\nu}{UL} \right)^{1/2} = \text{Re}^{-1/2} \quad (3.18)$$

onde  $\nu$  é a viscosidade cinemática e  $\text{Re}$  é o número de Reynolds. A Equação (3.18) mostra que a relação entre diferentes escalas de comprimento é uma função apenas do número de Reynolds. A escala de tempo pode ser expressa como  $L/U$ . As pequenas escalas são independentes das grandes escalas de movimento, uma vez que as pequenas escalas de comprimento possuem pequenas escalas de tempo. Assim, o movimento nas pequenas escalas recebe energia das grandes escalas, de forma que a taxa de energia recebida é igual à taxa de energia dissipada. O conceito mais usado de escalas de turbulência são as escalas dissipativas de Kolmogorov (KOLMOGOROV (1941) *apud* FREIRE *et al* (2002)), de comprimento, tempo e velocidade, dadas pelas equações (3.19), (3.20) e (3.21), respectivamente:

$$l_d = \left( \frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (3.19)$$

$$\tau = \left( \frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (3.20)$$

$$\nu = (\nu\varepsilon)^{1/4} \quad (3.21)$$

onde  $l_d$  é a escala de comprimento,  $\tau$  é a escala de tempo e  $\nu$  é a escala de velocidade,  $\varepsilon$  representa a taxa de dissipação de energia e  $\nu$  é a viscosidade cinemática. Esta dissipação pode ser expressa em função das grandes escalas, sem a participação da viscosidade:

$$\varepsilon \approx \frac{U^2}{t} = \frac{U^3}{L} \quad (3.22)$$

As relações entre as grandes escalas e as escalas de Kolmogorov permitem fornecer uma idéia das ordens de grandeza envolvidas em escoamentos turbulentos. Uma relação importante entre elas é dada pela substituição da Equação (3.22) na Equação (3.19), e a seguir isolando-se o termo  $L/l_d$ :

$$\frac{L}{l_d} = \text{Re}^{3/4} \quad (3.23)$$

Um resultado importante desta relação é que a partir dela pode-se estimar o número de graus de liberdade por unidade de volume:

$$N = \left( \frac{L}{l_d} \right)^3 = \text{Re}_L^{9/4} \quad (3.24)$$

onde  $N$  é o número de graus de liberdade por volume. Atualmente, não é possível aplicar-se as equações de Navier-Stokes diretamente na simulação de escoamentos com grandes números de Reynolds, devido ao elevado número de graus de liberdade. Em função disto, são necessárias equações adicionais que possibilitem a modelagem destes escoamentos, provenientes de modelos de turbulência

### 3.3.2 Modelos de turbulência

A princípio, as equações de Navier-Stokes podem ser usadas diretamente para a simulação de qualquer tipo de escoamento, desde o laminar até o turbulento. Se a malha for suficientemente fina, todas as escalas de todos os fenômenos físicos envolvidos serão abrangidas pelas equações discretizadas. Este tipo de abordagem é chamado de *Simulação*

*Numérica Direta* (SND). Entretanto, isto só pode ser feito para valores de Reynolds muito pequenos, dentro dos limites do escoamento laminar, devido ao baixo número de graus de liberdade, conforme indicado pela Equação (3.24). Para valores elevados do número de Reynolds, modelos de turbulência foram desenvolvidos de forma a contornar o problema relativo aos altos graus de liberdade e do elevado número de subdivisões da malha. A Tabela 3.2 apresenta um resumo dos tipos de modelos existentes.

**Tabela 3.2:** Classificação dos modelos de turbulência

Modelo		Abordagem utilizada
Viscosidade turbulenta	Modelo do comprimento de mistura de Prandtl	Tensões proporcionais aos gradientes de velocidades médias
	Modelos a uma equação	
	Modelos a duas equações	
Tensões de Reynolds		Transporte dos componentes do tensor de Reynolds

Outra alternativa é a simulação em Grandes Escalas (LES, *Large Eddy Simulation*), que é uma técnica similar à Simulação Numérica Direta, mas nas quais as discretizações temporais e espaciais são aplicadas somente aos maiores vórtices, reduzindo o esforço computacional. As escalas pequenas de tempo e comprimento, as quais estão associadas aos maiores vórtices, são aproximadas pela introdução de modelos algébricos. Apesar de reduzir as necessidades computacionais, esse tipo de abordagem ainda é inviável para a maioria dos escoamentos, sendo aplicável de preferência somente para números de Reynolds menores que 5000 (ANSYS ® CFX 10.0).

Em escalas muito maiores do que aquelas associadas a flutuações turbulentas, o escoamento exibe características médias; assim, um componente de velocidade pode ser dividido em um componente médio e um variável no tempo. Em geral, os modelos de turbulência visam modificar as equações de Navier-Stokes originais através da introdução destas variáveis médias e flutuantes no tempo. Os termos remanescentes são as tensões de Reynolds, que nada mais são do que o produto das médias das flutuações das componentes de velocidade. Estas novas incógnitas acarretam o aparecimento do chamado problema de “fechamento”, ou seja, são necessárias mais equações para a modelagem destes termos adicionais, de forma que o número de equações permaneça igual ao número de incógnitas. As equações usadas para fechar o sistema definem o tipo de modelo de turbulência. De acordo com a Tabela 3.2, isto pode ser feito usando tanto o conceito de viscosidade turbulenta, quanto equações de transporte para as tensões de Reynolds.

O conceito de viscosidade turbulenta parte da idéia de que, na região de turbulência, a viscosidade do fluido é alterada, sendo este novo valor uma consequência das flutuações de velocidade. A viscosidade turbulenta não é uma propriedade física do fluido como a viscosidade clássica, mas está relacionada à medida local do nível de turbulência. Esta idéia levou posteriormente ao desenvolvimento do modelo do comprimento de mistura de Prandtl, conforme descrito detalhadamente por SCHLICHTING (1960). Tal idéia está baseada no fato de que, no escoamento turbulento ao longo de uma parede, porções de fluido se agrupam e se movem num comprimento ou escala  $l$ , sem que sua quantidade de movimento seja alterada.

Modelos a uma equação envolvem o cálculo da viscosidade turbulenta como proporcional à velocidade média e a uma escala de comprimento, sem o envolvimento de equações de transporte. Modelos a duas equações são os mais comumente usados e envolvem o cálculo de dois fatores: a energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação. Dentre os vários modelos existentes, o modelo  $k$ - $\varepsilon$  proposto por LAUNDER e SPALDING (1974) *apud* FREIRE *et al* (2002) é um dos mais utilizados. Neste modelo,  $k$  é a energia cinética turbulenta que corresponde à variância das flutuações de velocidade, e  $\varepsilon$  é a taxa na qual esta energia é dissipada. As equações (3.25) e (3.26) representam o transporte para  $k$  e  $\varepsilon$ , respectivamente:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}k) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}\varepsilon) = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (3.26)$$

onde  $\mathbf{U}$  é o vetor velocidade,  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$ ,  $\sigma_k$ ,  $\sigma_\varepsilon$  são constantes do modelo, adimensionais,  $\mu_T$  representa a viscosidade turbulenta e o termo  $P_k$  representa a turbulência gerada pelas forças viscosas e de campo, os quais são dados por:

$$\mu_T = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.27)$$

$$P_k = \mu_T \nabla \mathbf{U} \cdot (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{U} (3\mu_T \nabla \cdot \mathbf{U} + \rho k) + P_{kb} \quad (3.28)$$

onde  $C_\mu$  é uma constante adimensional.

Na Equação (3.28), 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, que é dado por:

$$P_{kb} = -\frac{\mu_T}{\rho \text{Pr}_T} \mathbf{g} \cdot \nabla \rho \quad (3.29)$$

onde  $\mathbf{g}$  é a aceleração gravitacional, e  $\text{Pr}_T$  é o número de Prandtl turbulento.

O modelo das Tensões de Reynolds baseia-se em equações de transporte para todas as tensões, mas estas equações não são provenientes da hipótese de viscosidade turbulenta, mas sim da resolução de cada tensão individual, seja por meio de equações algébricas ou diferenciais. O desenvolvimento matemático das tensões é detalhadamente discutido por SCHLICHTING (1960).

### **3.4 Aplicações de CFD em Processos de Separação por Membranas.**

Apesar do grande número de estudos experimentais na área de PSM, trabalhos envolvendo CFD aplicados às membranas têm sido realizados por diversos pesquisadores. A maioria destes trabalhos está relacionado à micro e à ultrafiltração. Na microfiltração, RAHIMI *et al* (2005) realizaram um estudo do efeito de diferentes geometrias do módulo sobre o fluxo de permeado e a distribuição de pressões sobre a membrana. Os autores realizaram também experimentos de forma a validar os resultados numéricos obtidos. No capítulo 4 este estudo será detalhadamente apresentado, pois este sistema foi simulado usando o CFX 10.0, e os resultados foram comparados com aqueles obtidos no artigo citado.

No estudo do efeito de propriedades constantes e variáveis, WILEY e FLETCHER (2003) realizaram diversas simulações bidimensionais levando em conta várias combinações destes efeitos, usando como ferramenta o simulador CFX 4. Os autores verificaram como a viscosidade e a difusividade influenciavam na solução, quando constantes e quando dependentes da concentração de soluto; concluíram que próximo à camada limite, levando-se em conta a variação destas propriedades, chega-se a resultados mais realísticos do que modelos onde a viscosidade e a difusividade dependem fracamente da concentração de soluto, ou quando independem deste.

FLETCHER e WILEY (2004) também estudaram os efeitos de forças de campo na osmose inversa, na separação do sal da água num módulo plano. Usando também o CFX 4, eles descobriram que tais efeitos são importantes somente para baixas taxas de alimentação, onde a concentração de sal na superfície da membrana é fortemente influenciada pela força gravitacional quando o módulo está alinhado com a direção da força (canal vertical). Para a posição vertical, nenhum efeito significativamente diferente foi encontrado.

Os efeitos de promotores cilíndricos de turbulência em canal estreito foram investigados por CAO *et al* (2001); estes dispositivos são empregados para aumentar o coeficiente de transferência de massa do soluto, amenizando a camada limite polarizada de concentração. Os autores usaram um modelo de turbulência a duas equações que fosse capaz de resolver as pequenas escalas para baixos números de Reynolds. Um perfil de velocidades parabólico completamente desenvolvido foi assumido na seção de entrada do canal. Diferentes configurações de espaçadores foram usadas, alternando-se as localizações na parte superior e inferior do canal. O simulador FLUENT 4 foi usado para estas simulações e os resultados indicaram que a presença de espaçadores aumenta a tensão de cisalhamento sobre a superfície da membrana, sendo uma função da localização do espaçador e dos vórtices gerados no local. Os autores observaram que a redução da distância entre os espaçadores reduz os picos ocorridos na tensão de cisalhamento, o que acarreta a formação de mais atividades turbulentas,

umentando o coeficiente de transferência de massa. Todavia, a redução na distância aumenta a perda de carga no canal, aumentando os custos de operação. Uma configuração ótima de espaçadores deve levar em conta estes efeitos.

Um estudo de promotores também foi realizado por KOUTSOU *et al* (2004) que simularam uma configuração única de promotores cilíndricos localizados dentro do canal de escoamento, equidistantes entre si. Diferentes configurações de malha foram empregadas de forma a verificar a sensibilidade dos resultados frente ao refinamento da malha. A simulação foi realizada utilizando o programa FLUENT 6.0.12, através do método de simulação numérica direta, já que baixos números de Reynolds (menor do que 200) foram testados. Os resultados mostraram que para valores de Reynolds acima de 60 o escoamento se torna instável e acima de 78 começam a surgir vórtices.

Um processo de ultrafiltração em escoamento laminar foi simulado por BOUCHARD *et al* (1994). O transporte através da membrana foi simulado através da introdução de um coeficiente de separação, sendo empregado o método de diferenças finitas. Comparações com um modelo analítico de previsão da concentração de soluto na superfície da membrana foram feitas, obtendo-se pequenos desvios em relação aos resultados numéricos para determinadas faixas do fator de separação.

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), usando o *software* PHOENICS. A previsão do fator de separação por meio da técnica de CFD concordou com os fatores obtidos através de experimentação. Entretanto, isto ocorreu para baixos valores de permeabilidade, onde é assumido 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.* (2004) e (2005), na ausência de *baffles* ou chicanas, e na presença destes, respectivamente, utilizando o *software* FLUENT 6.0. 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 para 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. Para ambos os casos, os autores admitiram a existência de uma pseudo-reação de primeira ordem sobre a superfície da membrana, de forma a substituir o transporte na membrana por um consumo de soluto.



## Capítulo 4

### Avaliação do Simulador e Estudos de Caso

Neste capítulo serão apresentadas primeiramente algumas simulações realizadas com o objetivo de avaliar o *software* utilizado, CFX 10.0, quanto à sua capacidade em apresentar resultados confiáveis perante problemas cuja solução já é conhecida. Estes resultados são comparados com soluções analíticas do escoamento do filme líquido descendente e do escoamento de filme líquido descendente com transferência de massa. Na seqüência serão apresentados os casos relacionados à simulação de processos de separação por membranas.

#### 4.1 Estudos de avaliação

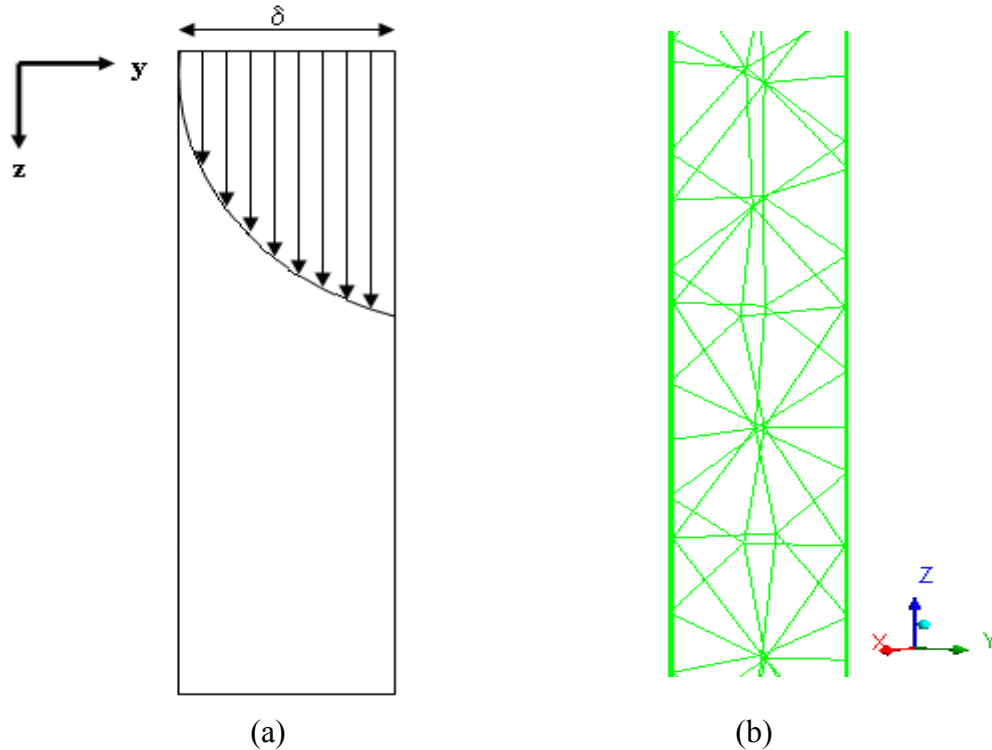
Um bom programa de simulação fluidodinâmica deve, antes de tudo, ser capaz de reproduzir soluções conhecidas de maneira eficaz. Isto demonstra que o simulador é capaz de resolver os problemas mais simples e, portanto pode ser aplicado para situações mais complicadas. O problema a ser analisado corresponde ao escoamento do filme líquido descendente sob a ação da gravidade, discutido por BIRD *et al* (1960), considerando troca puramente hidrodinâmica e troca envolvendo a transferência de massa. A solução deste escoamento é analítica para o primeiro caso e analítico-numérica para o segundo.

##### 4.1.1 Filme líquido descendente

Neste problema, água a 25°C escoava sob a ação da gravidade numa parede vertical com 1 metro de altura (direção  $z$ ). Para a construção da geometria do domínio, considerou-se a dimensão na direção  $y$ , transversal ao escoamento, igual a 4 cm e com 1 cm na direção  $x$ . Apesar da geometria ter sido construída com estas dimensões, após a geração da malha fez-se uma

diminuição de escala na direção  $y$  com base na ordem de grandeza da espessura do filme calculada pela solução analítica, conforme será descrito posteriormente.

O filme começa suficientemente longe da região de entrada, podendo-se considerar que para qualquer valor de  $z$  maior que zero, a velocidade  $v_z$  ou  $w$  dependerá somente da coordenada  $y$ . A Figura 4.1a ilustra o problema, e o detalhe da malha gerada é apresentado na Figura 4.1b:



**Figura 4.1:** Escoamento de filme líquido descendente: (a) detalhe da geometria e (b) malha gerada

A malha representada na Figura 4.1b corresponde aos tetraedros dispostos no plano XZ, onde a condição de simetria foi aplicada. Devido à diminuição da escala na coordenada  $y$ , a visualização da malha no plano YZ fica prejudicada.

A Equação do movimento para a velocidade  $v_z$  é:

$$\rho \left( \frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left( \frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) \quad (4.1)$$

A distribuição de velocidades é dada pelo perfil parabólico:

$$v_z = \frac{\rho g \delta^2}{2\mu} \left[ 1 - \left( 1 - \frac{y}{\delta} \right)^2 \right] \quad (4.2)$$

obtido mediante simplificação dos termos da Equação (4.1) e com condições de contorno de não deslizamento (4.3a) e fluxo de quantidade de movimento igual a zero (4.3b)

$$v_z \Big|_{y=0} = 0 \quad (4.3a)$$

$$\frac{\partial v_z}{\partial y} \Big|_{y=\delta} = 0 \quad (4.3b)$$

Num primeiro momento, realizou-se uma simulação para verificar se o resultado concordava com a solução analítica. Uma malha não estruturada foi construída, contendo um total de 48493 volumes, sendo 40113 tetraedros e 8380 prismas, perfazendo um total de 15250 nós. Os prismas são sempre colocados nas regiões onde ocorrem os maiores gradientes de velocidade, pois este tipo de elemento de volume capta mais facilmente estas variações. Neste caso, eles foram colocados na região próxima à parede, onde a condição de contorno de não deslizamento foi imposta. Por fim, as seguintes condições de contorno foram aplicadas ao sistema: uma entrada com velocidade média igual a  $0,0667 \text{ m s}^{-1}$ , condição de não-deslizamento na parede em  $y=0$ , uma saída com pressão igual a zero (a pressão de referência tomada foi também zero), condição de fluxo de quantidade de movimento nulo (ou velocidade máxima) em  $y=\delta$  (Equação (4.3b)) e condição de simetria nas superfícies restantes, na direção  $x$ . Como o CFX não permite a importação de geometrias bidimensionais, a maneira usada para simular um problema bidimensional é, a partir de uma malha tridimensional, aplicar condição de simetria nas duas direções do eixo em que se deseja desprezar os efeitos tridimensionais (neste exemplo, a direção  $x$ ).

A velocidade média foi calculada pela integração do perfil de velocidades, resultando na Equação (4.4)

$$v_{med} = \frac{2}{3} v_{max} \quad (4.4)$$

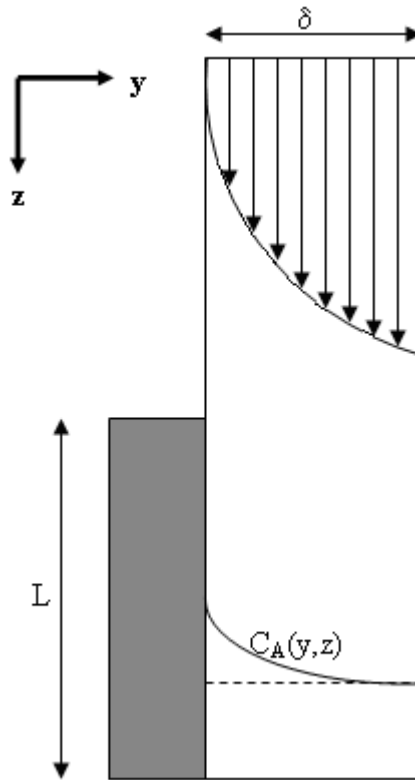
onde a velocidade máxima foi tomada igual a  $0,1 \text{ m s}^{-1}$ . Foi a partir deste valor que a velocidade média de  $0,0667 \text{ m s}^{-1}$  foi obtida para a velocidade de entrada. A espessura do filme líquido foi estimada fazendo-se  $y = \delta$  na Equação (4.2), obtendo-se:

$$v_z = \frac{\rho g \delta^2}{2\mu} \quad (4.5)$$

que é a expressão da velocidade máxima. Isolando-se  $\delta$ , e supondo propriedades físicas da água na temperatura de 25°C, chega-se a  $\delta = 1,35 \cdot 10^{-4}$  m. Depois de construída a malha, a escala da geometria foi reduzida até essa dimensão, uma vez que a geração de uma malha numa geometria cujas proporções são muito desiguais (neste caso, espessura muito menor que altura e largura) é extremamente complicada, sobretudo para malhas não estruturadas.

### 4.1.2 Difusão em filme líquido descendente

Neste caso tem-se uma espécie aderida à placa na metade inferior da mesma sendo ligeiramente solúvel no líquido e difundindo-se à medida que o fluido escoava sobre a parede, conforme indicado na figura abaixo. O componente testado foi o 1,1,1-tricloroetano (TCA) que foi o escolhido porque a validação entre simulação com resultado analítico também foi feita por LIU *et al* (2004) usando este componente, mas para validação do simulador FLUENT 6.0.



**Figura 4.2:** Escoamento de filme líquido descendente com transferência de massa

O equacionamento para a obtenção da solução analítica envolve a simplificação da Equação (4.2). Esta simplificação parte do fato de que, numa região muito próxima à parede sólida,  $(y/\delta)^2 \ll (y/\delta)$ , de maneira que o perfil de velocidades parabólico possa ser simplificado para um perfil linear, levando a:

$$v_z = \left( \frac{\rho g \delta}{\mu} \right) y \quad (4.6)$$

A equação diferencial da advecção-difusão de um componente (Equação (3.16)), simplificada para as condições do problema, torna-se:

$$ay \frac{\partial C_A}{\partial z} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} \quad (4.7)$$

onde  $a = (\rho g \delta / \mu)$ . As condições de contorno são as seguintes:

$$C_A|_{z=0} = 0 \quad (4.8a)$$

$$C_A|_{y=0} = C_{A0} \quad (4.8b)$$

$$C_A|_{y=\infty} = 0 \quad (4.8c)$$

Neste problema, a referência  $z=0$  está colocada no início da segunda metade da parede (Figura 4.2), pois, acima dela, considera-se que não há componente na parede, conforme expresso pela condição (4.8a). A condição (4.8b) estabelece que a parede inferior está saturada a uma concentração  $C_{A0}$ , cujo valor admitido foi igual a  $3,85 \text{ kg m}^{-3}$ .

A solução deste problema é feita a partir da introdução de uma variável de semelhança, conforme BIRD *et al.* (1960), de maneira análoga à solução de Blasius ((BLASIUS *apud* SCHLICHTING (1960)) da camada limite hidrodinâmica. Para o problema da difusão em filme líquido, esta relação é dada por:

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = f(\eta) = y \left( \frac{a}{9D_{AB}z} \right)^{1/3} \quad (4.9)$$

onde  $\eta$  é a variável de semelhança. A substituição na Equação (4.7), após serem feitas as derivações necessárias, leva a:

$$\frac{d^2 f}{d\eta^2} + 3\eta^2 \frac{df}{d\eta} = 0 \quad (4.10)$$

com as seguintes condições de contorno:

$$f|_{\eta=0} = 1 \quad (4.11a)$$

$$f|_{\eta=\infty} = 0 \quad (4.11b)$$

A solução geral da Equação (4.10) é:

$$f = C_1 \int_0^{\eta} e^{(-\eta^3)} d\eta + C_2 \quad (4.12)$$

e a solução particular com as condições de contorno (4.11) é:

$$\frac{C_A}{C_{A0}} = \frac{\int_0^{\eta} e^{(-\eta^3)} d\eta}{\int_0^{\infty} e^{(-\eta^3)} d\eta} = \frac{\int_0^{\eta} e^{(-\eta^3)} d\eta}{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right)} \quad (4.13)$$

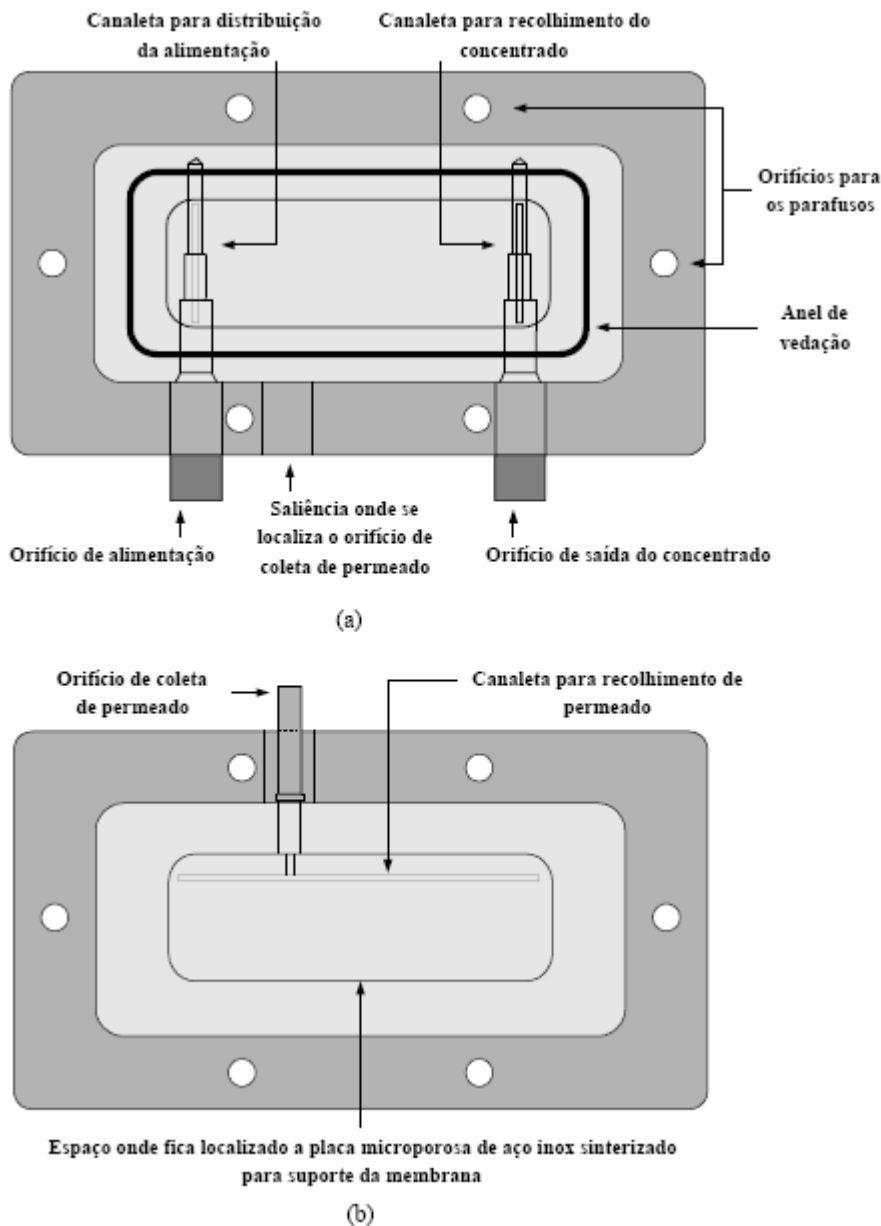
O perfil de concentração obtido pelo simulador foi comparado com a solução numérica da Equação (4.13) usando-se o software Mathcad ® 2001.

## 4.2 Estudos de Caso – Processos de Separação por Membranas

Nas próximas seções serão apresentados alguns estudos de caso de simulação relativos aos processos de separação com membranas. Os resultados e a discussão destas simulações estão apresentados no Capítulo 5. As simulações realizadas envolvem os processos de micro e ultrafiltração.

### 4.2.1 Microfiltração tangencial de partículas de sílica

A simulação computacional de uma parte do trabalho experimental realizado por RÄDER (2003) envolve a microfiltração tangencial de partículas de sílica. A membrana empregada nos experimentos era microporosa e assimétrica, com diâmetro de poro nominal igual a 0,2 µm, e espessura aproximada de 100 µm. O módulo possuía as seguintes dimensões na seção do canal de escoamento: 11,5 cm de comprimento, 4,5 cm de largura e 0,1 cm de altura. Uma representação esquemática do módulo é ilustrada na Figura 4.3:



**Figura 4.3:** Representação esquemática do módulo de microfiltração: (a) vista interna da placa superior (b) vista interna da placa inferior

Foram realizadas simulações para velocidades de alimentação nos valores de  $0,16 \text{ m s}^{-1}$  e  $1,67 \text{ m s}^{-1}$ , variando-se a pressão transmembrana nos seguintes valores: 0,5, 1,5, 2,0, 2,5 e 3,5 bar. A fração volumétrica de sílica na alimentação era igual a  $0,5 \cdot 10^{-4}$  ( $100 \text{ mg L}^{-1}$ ). Usou-se a modelagem matemática de trajetória de partícula inserida no pacote de simulação. Nas considerações deste modelo algumas hipóteses simplificativas foram assumidas: efeito da força gravitacional desprezível sobre as partículas, ausência de forças devido à rotação do domínio (tais como força centrípeta) e processo isotérmico. Foram também desconsideradas possíveis

interações das partículas com o fluido, usando-se, assim, a abordagem de acoplamento em mão única (*one-way coupling*, ANSYS ® CFX 10.0). Neste ponto ressalta-se que o CFX trabalha também com a abordagem de acoplamento em duas vias (*fully coupled*), onde a trajetória da partícula influencia a trajetória do fluido; o manual do simulador recomenda o uso desta abordagem quando a relação entre a vazão mássica de partículas e de fluido for elevada (suspensões concentradas). Como a solução usada é diluída, optou-se pelo acoplamento em mão única. A equação da trajetória de partícula tem a seguinte forma:

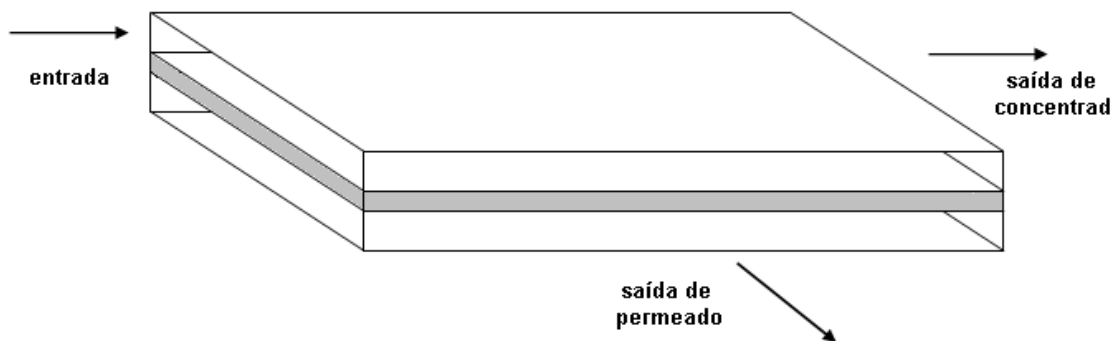
$$m_p \frac{dv_p}{dt} = \frac{1}{8} \pi \rho_p d^2 C_D |v_f - v_p| (v_f - v_p) + \frac{\pi d^3 \rho_f}{6} \frac{dv_f}{dt} \quad (4.14)$$

onde o subscrito  $p$  refere-se à partícula e  $f$  refere-se ao fluido. O termo do lado esquerdo representa a aceleração da partícula; o primeiro termo do lado direito é a influência da força de arraste (representada pelo coeficiente de arraste  $C_D$ ), de acordo com a lei de Stokes; o segundo termo do lado direito é a força aplicada na partícula devido ao gradiente de pressão no fluido que cerca a partícula, devido à aceleração deste.

O CFX possui um modelo generalizado da Lei de Darcy para escoamento em meios porosos, dado por:

$$-\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\mu}{k} U_i + K_{perda} \rho |U| U_i \quad (4.15)$$

onde  $k$  é a permeabilidade do meio e  $K_{perda}$  é um coeficiente empírico de perda de carga, o qual foi desconsiderado para este sistema. A geometria construída foi um modelo simplificado daquele mostrado na Figura 4.3 e está representado na Figura 4.4.



**Figura 4.4:** Modelo simplificado de geometria do módulo de microfiltração

Às equações governantes para o escoamento incompressível e estacionário, Navier-Stokes e continuidade (Equação (2.30)) foi aplicado o modelo de turbulência  $k$ - $\epsilon$  para levar em conta os

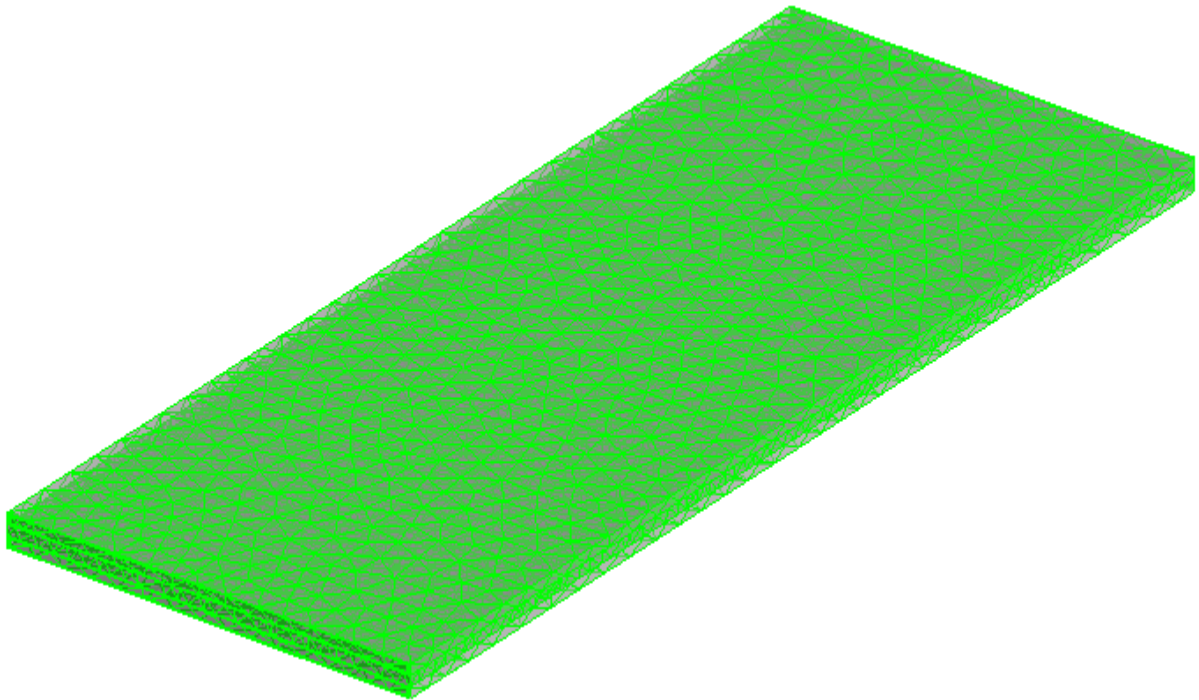


efeitos turbulentos de entrada e saída de fluido. Uma intensidade de 5% de turbulência na entrada e saídas de permeado e concentrado foi ajustada para cada simulação; este valor é considerado uma intensidade média, sendo recomendado quando não se possui uma idéia clara da intensidade real (ANSYS® CFX 10.0). No modelo de turbulência, o efeito do campo gravitacional não foi considerado. Condições de contorno de parede foram aplicadas nas superfícies restantes do módulo e condição de interface com não deslizamento foi ajustada entre o módulo e a superfície da membrana. Testes de malha foram realizados para a pressão de operação de 0,5 bar e velocidade de alimentação igual a  $0,16 \text{ m s}^{-1}$ , de forma a verificar a independência dos resultados com o refino da malha. A Tabela 4.1 mostra o número de tetraedros e prismas usados em cada teste.

**Tabela 4.1** – Testes de malha para microfiltração tangencial de suspensão de sílica

Teste	Tetraedros	Prismas	Total
1	7412	7504	14916
2	9314	9160	18474
3	12320	10444	22764
4	15962	12872	28834
5	19239	14364	33603
6	26157	12200	38357

Diferentemente da malha gerada para o estudo do filme líquido descendente, não foi realizada mudança de escala na geometria da membrana pois esta possui uma espessura em torno de  $100 \mu\text{m}$  e uma malha numa geometria de dimensões com proporções muito diferentes é de difícil montagem. A solução para este problema é gerar a malha numa escala maior e depois alterar a escala da geometria na direção especificada. Um inconveniente desta operação é que os elementos de volume ficam “aplainados” o que piora a qualidade da malha, pois os elementos ficam com uma razão de aspecto muito desproporcional. Elementos com razões de aspecto da ordem de 200:1 ou maiores podem dificultar muito a convergência, dependendo do problema (ANSYS® CFX 10.0). Isto não aconteceu nas simulações de filme líquido, mas ocorreram para as simulações de microfiltração de suspensões aquosas de sílica. A fim de contornar este problema, trabalhou-se com a geometria da membrana da mesma altura que o canal de escoamento e a seção de saída de permeado (1 mm), conforme mostrado na Figura 4.5, a qual corresponde ao teste de malha 6:



**Figura 4.5:** Malha para módulo de microfiltração

Uma vez que a permeabilidade da membrana e a resistência ao escoamento estão intimamente ligadas à sua espessura, foi proposta uma mudança no valor da permeabilidade. O fluxo volumétrico, de acordo com a equação de Hagen-Poiseuille (2.9), foi avaliado considerando que a espessura  $l$  da membrana estivesse inserida na constante de permeabilidade hidráulica  $L_P$ :

$$J = (L_P)\Delta P = \left( \frac{\varepsilon r^2}{8\mu\tau l} \right) \Delta P \quad (4.16)$$

Para a simulação de escoamento em meios porosos, o CFX não trabalha com a permeabilidade hidráulica  $L_P$ , e sim com a permeabilidade  $k$ , em unidades de área:

$$k = \frac{\varepsilon r^2}{8\tau} \quad (4.17)$$

onde, em termos de  $k$ , a permeabilidade  $L_P$  se torna:

$$L_P = \frac{k}{\mu l} \quad (4.18)$$

Partindo-se do princípio de que a permeabilidade hidráulica deve se manter aproximadamente a mesma para variações não muito grandes na espessura da membrana, tem-se que:

$$L_P = \frac{k_1}{\mu l_1} = \frac{k_2}{\mu l_2} \quad (4.19)$$

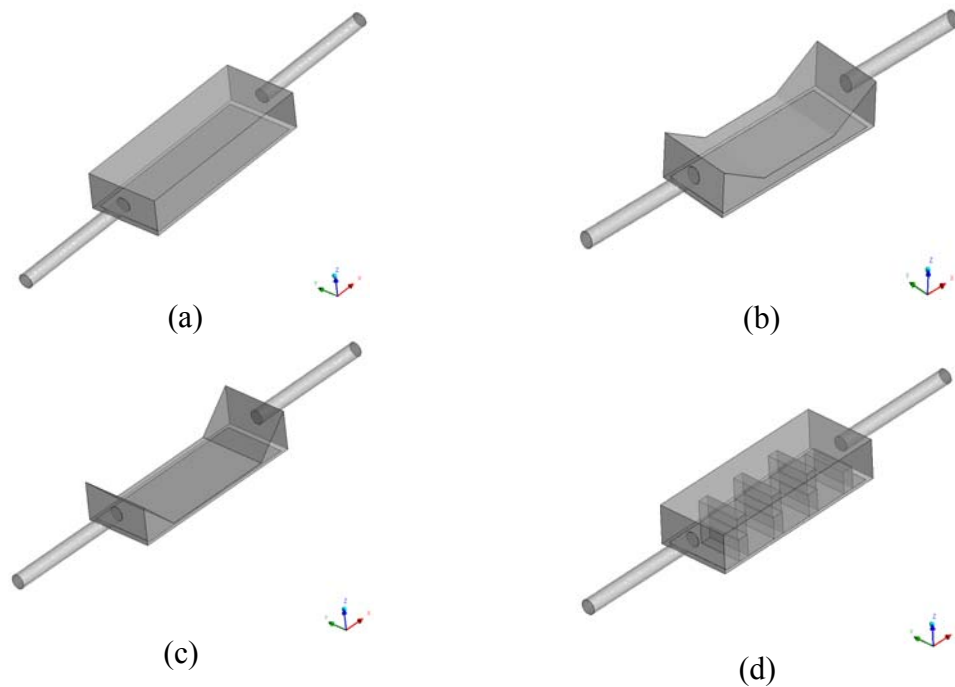
onde o subíndice 1 representa a propriedade na geometria original, e o subíndice 2 na geometria com escala alterada, usada no simulador. A partir destas considerações, foram realizadas as etapas descritas a seguir.

1. Com os dados experimentais realizou-se uma regressão linear de forma a estimar-se  $L_P$  na Equação (4.16).
2. A partir de  $L_P$  obtido, calculou-se  $k$  pela Equação (4.18).
3. Fazendo-se  $k=k_1$  na Equação (4.19), calculou-se  $k_2$ , cujo valor foi inserido no simulador com a geometria da membrana alterada para uma espessura numa escala maior.

### 4.2.2 Microfiltração tangencial com barreiras ao escoamento

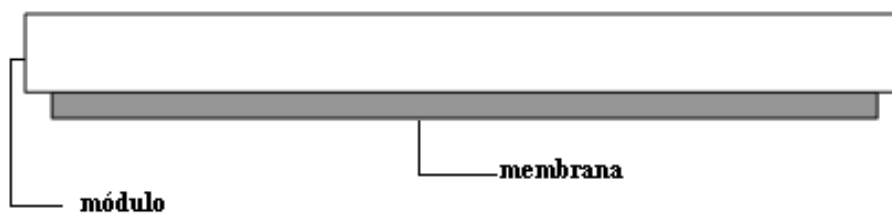
Uma série de simulações foi realizada com base no trabalho desenvolvido por RAHIMI *et al.* (2005). Os autores realizaram experimentos em módulos de microfiltração com e sem barreiras como obstáculos ao escoamento, utilizando água deionizada como fluido de estudo. Paralelamente ao trabalho experimental, desenvolveram um código próprio de simulação fluidodinâmica e compararam os resultados de fluxo permeado simulados numericamente com os valores experimentais. Neste estudo de caso, o objetivo é comparar a capacidade que o CFX possui de reproduzir tanto os resultados experimentais quanto os de simulação de outro programa.

Foram testados quatro tipos de configurações de módulo numa membrana de microfiltração com diâmetro de poro médio de 0,22  $\mu\text{m}$ , espessura de 120  $\mu\text{m}$  e porosidade de 60%. 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 de célula: (a) sem barreira; (b) com barreiras trapezoidais pequenas; (c) com barreiras trapezoidais grandes e, (d) com barreiras íngremes dispostas em posições opostas, conforme apresentado na Figura 4.6. Os tubos de entrada de alimentação e saída de permeado possuem 0,65 cm de diâmetro e 6 cm de comprimento.



**Figura 4.6:** Configurações do módulo de microfiltração: (a) sem barreira (b) pequena barreira trapezoidal (c) grande barreira trapezoidal (d) barreiras opostas

O espaço delimitado pela membrana é ilustrado na Figura 4.7, onde se trabalhou com uma espessura no tamanho original, gerando-se a malha numa escala maior e depois a reduzindo, o que não acarretou problemas na obtenção da convergência.



**Figura 4.7:** Detalhe da membrana sob a geometria de cada módulo

Foram realizadas simulações com cinco diferentes valores de pressão transmembrana para cada geometria, com exceção do caso (d), onde foram testadas seis faixas de pressão. A Tabela 4.2 apresenta os valores de pressão utilizados para cada caso.

**Tabela 4.2:** Faixas de pressão transmembrana testadas

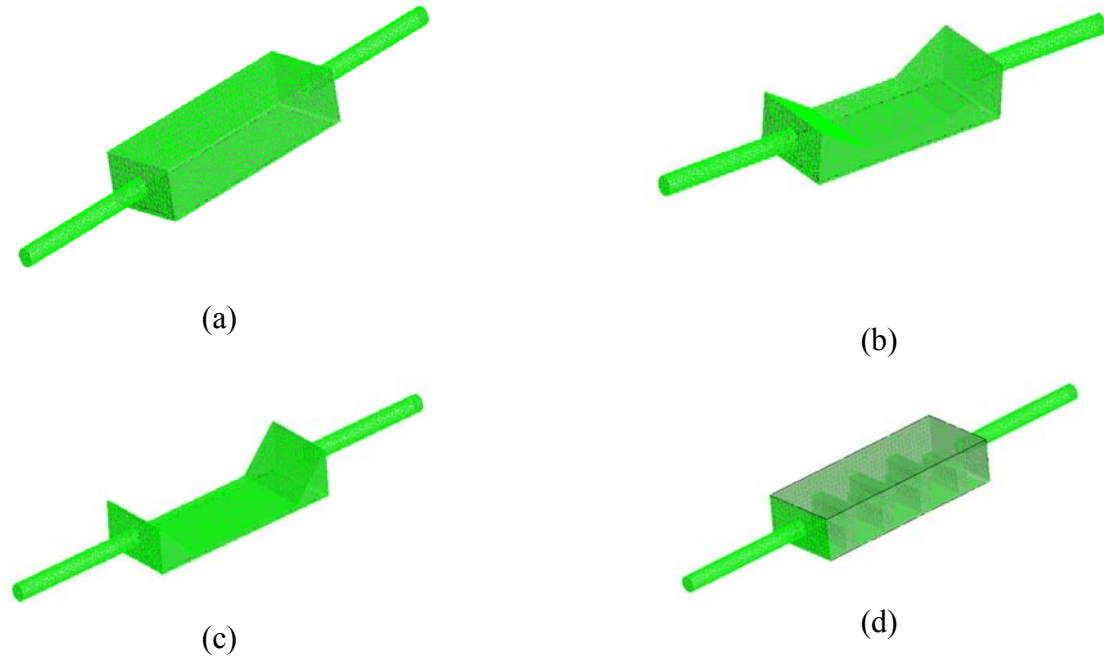
Tipo de módulo	Pressão na entrada (kPa)	Pressão na saída de concentrado (kPa)	Tipo de módulo	Pressão na entrada (kPa)	Pressão na saída de concentrado (kPa)
Sem barreira	50	41	Pequena barreira	75	64,5
	75	50		100	65
	100	66		132,5	92
	125	100		150	114
	150	118		167,5	115
Grande barreira	50	38,5	Barreiras opostas	50	37,5
	75	45,5		75	55,5
	100	62,5		100	75,5
	125	75,5		125	94,5
	150	91,5		150	113,5
			175	136	

A fim de avaliar a sensibilidade dos resultados (fluxo permeado) em função do número de volumes discretizados, foram geradas seis configurações de malha diferentes para as diferentes geometrias da Figura 4.6. Na Tabela 4.3 estão expressos o número de tetraedros gerados em cada seção da geometria, para cada um dos testes.

**Tabela 4.3:** Configurações dos testes de malha para os módulos da Figura 4.6

Teste	Número de Tetraedros			Número de Tetraedros - Módulo			
	Entrada	Saída	Membrana	Sem barreira	Pequena barreira	Grande barreira	Barreiras opostas
1	8490	8461	48460	48460	17364	18579	26482
2	11533	11533	71017	119546	23014	25947	35402
3	11794	11793	72576	128412	29296	34732	45669
4	13643	13627	79364	137590	33767	43803	54296
5	13510	13562	85378	153492	38536	49526	65986
6	14073	14048	92751	159366	46467	53182	74366

Tais testes foram realizados para a primeira pressão transmembrana em cada tipo de módulo, na entrada e na saída (50 e 41 kPa para o módulo sem barreira, 75 e 64,5 kPa para o módulo com pequena barreira, 50 e 38,5 kPa para o módulo com grande barreira e 50 e 37,5 kPa para o módulo com barreiras opostas). A Figura 4.8 apresenta as malhas geradas, com a configuração usada no teste 6, para as quatro situações estudadas.



**Figura 4.8:** Representação das malhas para os diferentes módulos de microfiltração: (a) sem barreira, (b) pequena barreira trapezoidal (c), grande barreira trapezoidal e (d) barreiras opostas

A modelagem matemática, além das equações do movimento e continuidade em estado estacionário, inclui um modelo de turbulência; neste caso, os autores usaram uma variação do modelo  $k-\varepsilon$ , denominado RNG- $k-\varepsilon$  (CAO *et al.*(2001), ORSZAG *et al.*(1993) *apud* FREIRE *et al.*(2002)). Este modelo consegue resolver melhor as atividades turbulentas para baixos números de Reynolds e na presença de obstáculos ao escoamento. A modelagem é a mesma do modelo  $k-\varepsilon$ , mas o cálculo da constante  $C_{\varepsilon l}$  é trocado por uma constante  $C_{\varepsilon lRNG}$  (ANSYS® CFX 10.0) dada por:

$$C_{\varepsilon lRNG} = 1,42 - f_{\eta} \quad (4.20)$$

onde:

$$f_{\eta} = \frac{\eta \left( 1 - \frac{\eta}{4,38} \right)}{(1 + \beta_{RNG} \eta^3)} \quad (4.21)$$

$$\eta = \sqrt{\frac{P_k}{\rho C_{\mu RNG} \varepsilon}} \quad (4.22)$$

onde  $\beta_{RNG}$  e  $C_{\mu RNG}$  são constantes do modelo.

Um nível de intensidade médio de 5% foi aplicado na entrada e nas saídas de fluido. Condições de contorno de não deslizamento foram aplicadas às paredes do módulo. Na interface com a superfície da membrana, duas situações foram analisadas: primeiramente com a aplicação de uma condição apenas de interface (fluxo conservativo) e, após, com uma condição de interface, mas com não-deslizamento sobre a membrana. Os resultados obtidos com os dois tipos de condição de contorno foram, então, comparados com os experimentos realizados por RAHIMI *et al.* (2005), e também com as simulações para cada faixa de pressão, de forma a verificar a influência da condição de contorno nos resultados de uma simulação CFD.

### 4.2.3 Ultrafiltração de soluto macromolecular

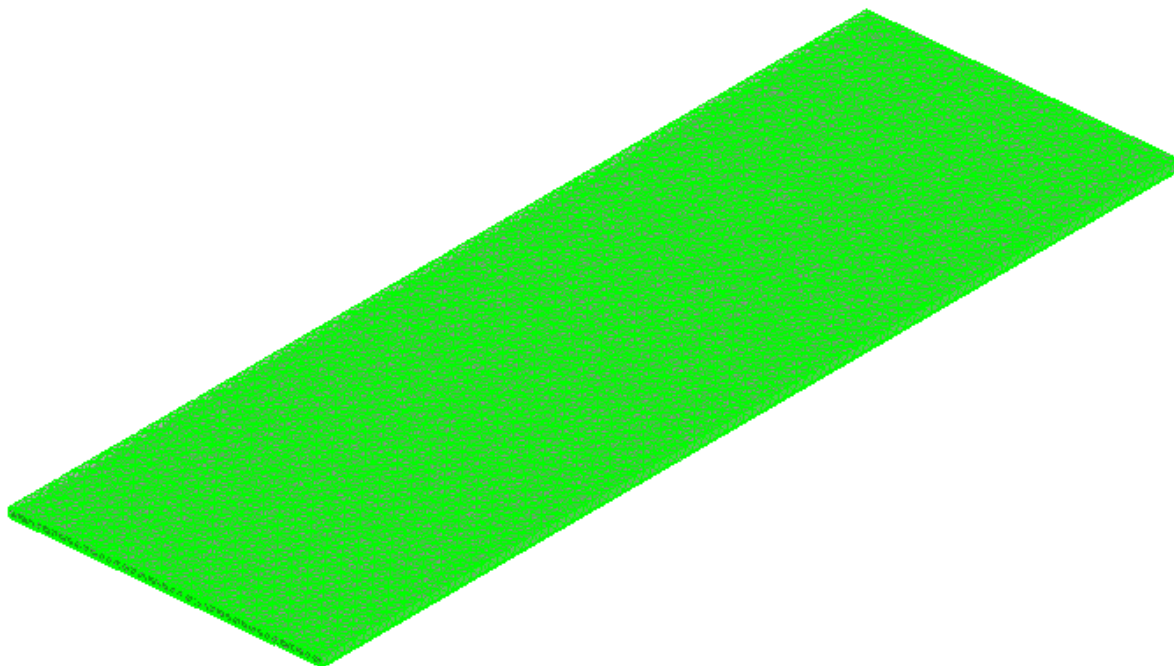
A reprodução de experimentos envolvendo um soluto macromolecular (ultrafiltração de proteína de soro bovino, BSA, diâmetro médio de 6,26 nm) foi realizada, tendo como referência os experimentos realizados por GARDIOL (2000). Neste trabalho, uma série de experimentos de ultrafiltração envolvendo além da proteína BSA, foi realizada para diferentes pressões e vazões de alimentação. O objetivo neste estudo de caso é avaliar o comportamento do fluxo permeado em função da pressão transmembrana.

O módulo empregado por GARDIOL (2000) é o mesmo utilizado por RÄDER (2003) para a microfiltração tangencial da suspensão aquosa de partículas de sílica. Todavia, neste estudo, a geometria inferior da seção de saída de permeado (Figura 4.4) não foi construída; desta forma a saída de permeado ficou localizada exatamente na parte inferior da membrana. Devido a esta simplificação, foi possível trabalhar com a espessura da membrana na escala de tamanho real, construindo a malha numa escala maior e após promovendo a redução de escala da geometria. Diferentemente da simulação da microfiltração de sílica, não houve problemas com a convergência devido a este procedimento. Simulações com diferentes malhas foram realizadas de forma a testar a sensibilidade do fluxo de permeado obtido em função do número de tetraedros. A Tabela 4.4 apresenta a configuração usada em cada teste.

**Tabela 4.4:** Configurações dos testes de malha para módulo de ultrafiltração da proteína BSA

Teste	Número de Tetraedros
1	16651
2	30432
3	36846
4	50825

Os testes foram realizados na pressão transmembrana de 103,4 kPa. Tanto nos testes de malha quanto nas simulações seguintes, condições de não deslizamento nas paredes do módulo foram colocadas, bem como uma condição de interface entre módulo e membrana juntamente com não deslizamento sobre a superfície desta. A membrana utilizada era assimétrica e porosa, com massa molar de corte igual a 20000 Dalton, composta de polipropileno e polissulfona. A albumina bovina utilizada possuía massa molar de 66700 Dalton e todos os experimentos foram realizados com uma concentração de alimentação igual a  $0,25 \text{ gL}^{-1}$ , à temperatura de  $35^\circ\text{C}$ . A Figura 4.9 ilustra a malha tetraédrica gerada no teste 4:

**Figura 4.9:** Representação da malha para simulação de ultrafiltração de BSA



No presente estudo selecionou-se o experimento realizado por GARDIOL (2000) para uma vazão de alimentação de  $37,17 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$  para as seguintes pressões transmembrana: 103,4, 137,9, 172,4, 206,8, 241,3, 275,8 e 310,3 kPa. As equações governantes do problema são as equações do movimento, da continuidade em estado estacionário, e as equações de transferência de massa para um componente. Neste caso, foi considerado o efeito da turbulência na entrada e nas saídas com intensidade de turbulência de 5%, sendo que a equação do transporte de massa foi modificada para ((ANSYS® CFX 10.0)):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho u\phi) = \nabla \cdot \left( \left( \rho D_\phi + \frac{\mu_T}{Sc_T} \right) \nabla \phi \right) + S_\phi \quad (4.23)$$

onde  $D_\phi$  é a difusividade mássica do componente de fração mássica  $\phi$ ,  $\mu_T$  e  $Sc_T$  são a viscosidade e o número de Schmidt turbulentos, respectivamente, e  $S_\phi$  é um termo fonte. De forma a reproduzir a retenção de partículas pela membrana, usou-se uma abordagem de taxa de consumo. A partir dos dados experimentais, e de um balanço de massa, calculou-se a quantidade de BSA que seria consumida, a partir da diferença entre o que sairia caso não houvesse filtração (retenção de 100%) e o que efetivamente sai no permeado ou filtrado (dados de retenção experimentais). Este termo de consumo foi aplicado na seção correspondente à membrana; tal procedimento foi realizado porque o CFX é extremamente limitado para simular o escoamento multifásico em sistemas porosos de forma a contabilizar posteriormente o quanto de soluto foi retido. Na abordagem de trajetória de partículas tal procedimento é viável uma vez que o simulador retorna o número de partículas retidas e aquelas que passaram pelo domínio.

Desta forma, procurou-se verificar se um valor de consumo fixo de componente na membrana poderia substituir e levar em conta o bloqueio físico do componente pela mesma, sem a necessidade de simulação das interações físicas entre o soluto e a membrana. O procedimento de cálculo empregado está descrito a seguir:

1. Cálculo da vazão média de permeado com base nos dados experimentais através da seguinte equação:

$$F_p = J_{\text{exp}} A_m \quad (4.24)$$

onde  $F_p$  é a vazão mássica,  $A_m$  é a área da membrana e  $J_{\text{exp}}$  é o fluxo mássico de permeado tomado como a média entre experimentos e réplicas.

2. Cálculo da vazão supondo retenção total, dada por:

$$F_{Rt} = \phi_B F_P \quad (4.25)$$

onde  $F_{Rt}$  é a vazão supondo retenção total e  $\phi_B$  é a fração mássica de soluto no escoamento “bulk” ou corrente livre. Com base na Equação (2.1), isolando-se a concentração no permeado, tem-se:

$$\phi_P = \phi_B(1 - R) \quad (4.26)$$

na qual  $\phi_P$  é a fração mássica de soluto no permeado e  $R$  é a retenção.

3. Cálculo da vazão mássica para os dados de retenção experimentais através de:

$$F_{Rexp} = \phi_P F_P \quad (4.27)$$

4. Cálculo da taxa de consumo total subtraindo-se a substituição da Equação (4.24) na Equação (4.25) e a Equação (4.26) na (4.27), obtendo-se:

$$F_{cons} = \phi_B J_{exp} A_m R \quad (4.28)$$

onde  $F_{cons}$  é a taxa na qual o soluto é consumido. Esta taxa representa o termo fonte na Equação (4.23), mas ele está restrito à região delimitada pela membrana (equivalente a um sorvedouro de massa). Os resultados obtidos de retenção em função da pressão transmembrana foram comparados com os dados experimentais, de forma a verificar a limitação do simulador frente a fenômenos envolvendo retenção de macropartículas. Abordagem semelhante foi realizada por LIU *et al.* (2004) na simulação da pervaporação de um composto orgânico diluído em água. Neste estudo, os autores consideraram que o componente sofria uma pseudo-reação de primeira ordem na superfície da membrana, evitando-se, assim, simular o efeito da passagem do componente pela estrutura desta. O estudo experimental também consistiu na verificação da variação da permeabilidade hidráulica entre uma filtração e outra, pois sabe-se que para macromoléculas o fenômeno de polarização por concentração e *fouling* alteram o comportamento linear entre fluxo de permeado e pressão transmembrana. Como consequência, utilizou-se um valor diferente de permeabilidade, tendo em vista que os resultados experimentais não apresentavam um comportamento linear.

#### 4.2.4 Ultrafiltração e a solução por similaridade

A solução da equação da difusão-advecção governante da camada limite polarizada em estado estacionário na micro e ultrafiltração tangencial foi apresentada por DAVIS e SHERWOOD (1990), conforme expresso pelas equações (2.30) a (2.33). O problema é ilustrado na Figura 2.12 e está baseado na mesma idéia de transporte de partículas induzido por cisalhamento apresentado por DAVIS e LEIGHTON (1987).

O objetivo deste estudo de caso foi simular um escoamento bidimensional em regime permanente num canal retangular, tendo como solutos a sílica e a proteína BSA. Os resultados de fluxo de permeado em função do comprimento adimensional do canal, obtidos pelo simulador,

foram comparados com a solução por similaridade obtida por DAVIS e SHERWOOD (1990) para soluções diluídas (fração volumétrica menor do que 0,1), juntamente com o perfil de concentrações próximo à superfície da membrana, dada pela seguinte equação:

$$v_w(x) = \left( \frac{\tau D^2}{3\mu_0 x} \right)^{1/3} \bar{v}(\phi_B) = \left( \frac{\tau a^{4/3}}{\mu_0 (3x)^{1/3}} \right) \bar{v}(\phi_B) \quad (4.29)$$

onde  $v_w(x)$  é o fluxo permeado em função da variável espacial  $x$ ,  $\tau$  é a tensão de cisalhamento,  $D$  é a difusividade mássica,  $\mu_0$  é a viscosidade dinâmica,  $a$  é o raio da partícula e  $\bar{v}(\phi_B)$  é o fluxo permeado adimensional, o qual, para suspensões diluídas, é dado por:

$$\bar{v}(\phi_B) = 0,0581\phi_B^{-1/3} \quad (4.30)$$

A Equação (4.30) expressa o valor do fluxo permeado adimensional em função da fração mássica no escoamento *bulk*.

Na simulação a seção correspondente à membrana foi desconsiderada, sendo apenas incluído o escoamento sobre o canal. Primeiramente, foram realizadas simulações com propriedades constantes da sílica, para a fração mássica de  $2,052 \cdot 10^{-4}$  (concentração igual a  $0,25 \text{ kg m}^{-3}$ , e diferentes frações sobre a superfície da membrana (20, 40, 60, 80 e 100 vezes a fração mássica de alimentação). Tendo em vista que a maioria dos trabalhos na literatura tratam a fração volumétrica como variável, a substituição da variável  $\phi$  por fração mássica nas equações (2.31) a (2.33) também é válida. Isto ocorre porque, na forma simplificada da equação diferencial de transporte de massa (Equação (3.16)), sem o termo transiente e o termo de geração (Equação (2.31)) o fator de conversão de fração volumétrica para mássica fica fora de todos os termos de derivada, sendo cancelado na equação. Os perfis de fração mássica foram comparados na metade e na saída do canal retangular de escoamento. O fluxo de permeado simulado é o fluxo aplicado em  $y=0$  (superfície da membrana):

$$v_w = - \frac{D}{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{y=0} \quad (4.31)$$

onde  $D$  é a difusividade mássica; sendo induzida por cisalhamento nas simulações envolvendo sílica ( $D_0$ ), ou corrigida nas simulações envolvendo BSA ( $D_{corr}$ ), conforme será apresentado mais adiante. A equação final onde estão inseridas as variáveis adimensionais e de similaridade, cujo desenvolvimento completo foi descrito por DAVIS e SHERWOOD (1990) é dada por:

$$\left( \bar{v}_w + 2\bar{y} \int_0^{\bar{y}} \frac{d\bar{y}}{\bar{\mu}(\phi(\bar{y}))} - 2 \int_0^{\bar{y}} \frac{\bar{y} d\bar{y}}{\bar{\mu}(\phi(\bar{y}))} \right) \frac{d\phi}{d\bar{y}} + \frac{d}{d\bar{y}} \left( \bar{D}(\phi(\bar{y})) \frac{d\phi}{d\bar{y}} \right) = 0 \quad (4.32)$$

Quando a viscosidade adimensional tende ao infinito, a Equação (4.32) reduz-se a:

$$v_w \frac{d\phi}{d\bar{y}} + \frac{d}{d\bar{y}} \left( \bar{D} \frac{d\phi}{d\bar{y}} \right) = 0 \quad \bar{y} \ll 1 \quad (4.33)$$

onde, sob integração e com aplicação da condição (2.33c), chega-se a:

$$\bar{v}_w(\phi_B)\phi + \bar{D} \frac{d\phi}{d\bar{y}} = 0 \quad \bar{y} \ll 1 \quad (4.34)$$

onde:

$$\bar{y} = \frac{y}{(3\mu_0 D_0 x / \tau)^{1/3}} \quad (4.35)$$

que é a escala sugerida para a variável  $y$ . Integrando-se a Equação (4.34), com a seguinte condição de contorno:

$$\phi|_{\bar{y}=0} = \phi_w \quad (4.36)$$

onde,  $\phi_w$  é a fração mássica na superfície da membrana, chega-se a:

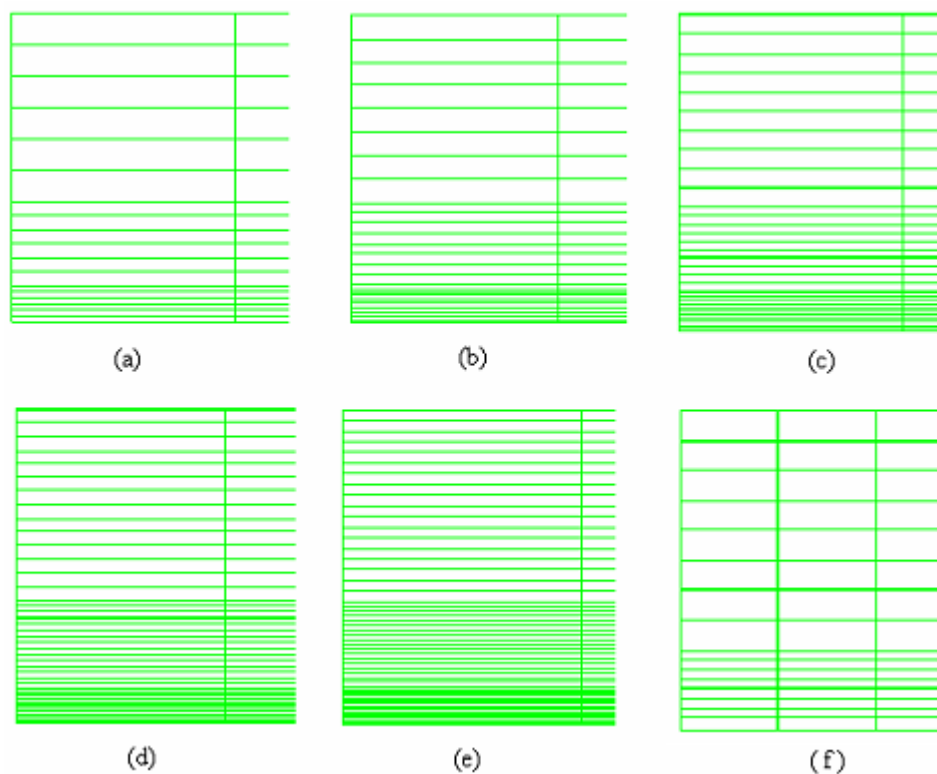
$$\phi = \phi_w e^{-\frac{\bar{v}(\phi_B)\bar{y}}{\bar{D}}} \quad (4.37)$$

Este perfil é comparado, para diferentes valores de  $\phi_B$  e  $\phi_w$ , nas simulações envolvendo sílica, na metade e na saída do canal. A condição de contorno de entrada foi assumida como sendo um perfil linear de velocidades, (integração da Equação (2.32) para viscosidade constante), com uma velocidade média igual a  $0,826 \text{ m s}^{-1}$ . A condição de contorno (2.33c) foi colocada mediante auxílio de uma sub-rotina escrita em Fortran. O sistema descrito pelas equações (2.30) a (2.33) foi resolvido numa geometria com as mesmas dimensões do canal de escoamento nas simulações de ultrafiltração de BSA. A malha empregada neste conjunto de simulações foi estruturada, composta de hexaedros. Para a simulação completamente bidimensional, condições de contorno de simetria foram aplicadas na direção  $z$ , ao passo que o escoamento ocorre nas direções  $x$  e  $y$ . Condição de não deslizamento foi imposta na parede inferior (relativa à superfície da membrana) e uma condição de deslizamento livre aplicada na região superior da geometria, pois o modelo considera que o escoamento é aberto e livre na parte superior da seção de escoamento *bulk*. Testes de malha foram também realizados para este conjunto de simulações; o número de hexaedros para cada teste encontra-se na Tabela 4.5.

**Tabela 4.5:** Configurações dos testes de malha para ultrafiltração bidimensional

Teste	Número de Hexaedros
1	2880
2	3840
3	4800
4	6720
5	8640
6	9600

A Figura 4.10 mostra uma parte da geometria com diferentes graus de refino das malhas em cada um dos testes.



**Figura 4.10:** Malhas para simulações bidimensionais com diferentes graus de refino próximo à superfície da membrana: (a) 2880, (b) 3840, (c) 4800, (d) 6720, (e) 8640 e (f) 9600 hexaedros.

Os testes foram realizados com simulações de sílica em escoamento laminar. A malha escolhida com base nos resultados dos testes foi empregada tanto nas simulações laminares envolvendo sílica quanto naquelas envolvendo BSA a baixas intensidades turbulentas, sendo estas últimas brevemente descritas a seguir.

O valor médio da tensão de cisalhamento,  $\bar{\tau}$ , foi calculado com base na solução de Blasius da camada limite laminar:

$$\bar{\tau} = 0,664 \text{Re}_L^{-1/2} \rho U^2 \quad (4.38)$$

onde  $\text{Re}_L$  é o número de Reynolds no comprimento  $L$ ,  $\rho$  é a massa específica e  $U$  é a velocidade da corrente livre.

O problema da ultrafiltração de proteína de soro bovino foi escolhido pois este composto macromolecular possui um coeficiente de difusão muito abaixo do valor estimado daquele induzido por cisalhamento (Equação (2.28)), e o desenvolvimento proposto por DAVIS e SHERWOOD (1990) não é mais adequado para descrever o transporte deste macrosoluto. A difusividade mássica de proteínas e substâncias macromoleculares é, em geral, melhor explicada pelo mecanismo de movimento Browniano conforme descrito por TRETTIN e DOSHI (1980) e HUISMAN e TRÄGARDH (1999a). O coeficiente de difusão browniano para suspensões diluídas, considerando-se partículas esféricas e rígidas, é calculado pela equação de Stokes-Einstein:

$$D_B = \frac{kT}{6\pi\mu_0 a} \quad (4.39)$$

onde  $k$  é a constante de Boltzmann, igual a  $1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ ,  $T$  é a temperatura absoluta em K,  $\mu_0$  é a viscosidade dinâmica, em Pa's, e  $a$  é o raio da partícula, em m. De acordo com DAVIS e LEIGHTON (1987), os efeitos da difusão browniana podem ser desconsiderados em partículas de tamanho da ordem de alguns micrômetros em processos de filtração tangencial. Todavia, partículas de tamanho bem menor, como o caso da proteína BSA, apresentam o coeficiente de difusão browniano maior do que quando calculado pela difusão hidrodinâmica induzida por cisalhamento, dado por:

$$D_0 = \frac{a^2 \tau}{\mu_0} \quad (4.40)$$

onde  $\tau$  é a tensão de cisalhamento, assumida como constante. Assim, para tais partículas a solução por similaridade apresentada por DAVIS e SHERWOOD (1990) não é mais válida, pois o mecanismo de transporte por movimento Browniano é preponderante sobre aquele induzido por cisalhamento. Devido a isto, neste trabalho, desenvolveu-se uma proposta de correção da difusividade browniana para ultrafiltração de partículas coloidais quando o mecanismo de

transporte dominante não é induzido por cisalhamento. Matematicamente, esta correção é expressa por:

$$D_{corr} = D_{eff} \left( \frac{D_B}{D_0} \right) \quad (4.41)$$

onde  $D_{corr}$  é o coeficiente de difusão corrigido, e  $D_{eff}$  é um coeficiente de difusão efetivo dado por:

$$D_{eff} = \varepsilon \left( \frac{L_T}{U} \right)^2 \quad (4.42)$$

onde  $\varepsilon$  é a taxa de dissipação turbulenta,  $L_T$  é a escala de turbulência empregada e  $U$  é a velocidade de escoamento da corrente livre ou *bulk*. A expressão (4.41) foi proposta pois na presença de turbulência, quanto maior a intensidade, maior a facilidade com que determinado componente seja transportado no escoamento, aumentando, portanto, o coeficiente de difusão. A razão  $L_T / U$  representa, neste caso, uma escala de tempo de turbulência, e está diretamente ligada às pequenas escalas de movimento, influenciando diretamente o coeficiente de difusão. Com base no modelo  $k$ - $\varepsilon$ , as expressões para a estimativa da energia cinética e da dissipação turbulenta são dadas por, respectivamente, (ANSYS ® CFX 10.0):

$$k = \frac{3}{2} I^2 U^2 \quad (4.43)$$

$$\varepsilon = \frac{C_\mu \rho k^2}{\mu_T} \quad (4.44)$$

onde  $I$  é a intensidade de turbulência, dada por:

$$I = \frac{\mu_T}{\mu} \quad (4.45)$$

Fazendo  $D=D_{corr}$  e substituindo a Equação (4.41) na Equação (4.29), chega-se a:

$$v_w(x) = \left( \frac{\tau}{3\mu_0 x} \right)^{1/3} D_{corr}^{2/3} \bar{v}(\phi_B) = \left( \frac{\tau}{3\mu_0 x} \right)^{1/3} \left( D_{eff} \frac{D_B}{D_0} \right)^{2/3} \bar{v}(\phi_B) \quad (4.46)$$

A modelagem do sistema é aquela representada pela Equação (4.23), onde  $Sc_T$  foi calculado da seguinte forma:

$$Sc_T = \frac{\mu_T}{\rho D_{corr}} \quad (4.47)$$

A escala de turbulência foi calculada com base no diâmetro hidráulico de entrada da geometria. Escalas de turbulência na faixa de 25, 50 e 75% do diâmetro hidráulico ( $1,22 \cdot 10^{-4}$  m,  $2,45 \cdot 10^{-4}$  m e  $3,67 \cdot 10^{-4}$  m, respectivamente) foram testadas, juntamente com intensidades turbulentas de 0,1, 0,2, 0,3, 0,4 e 0,5%. Como o perfil de fluxo permeado para suspensões diluídas aplica-se ao escoamento laminar, foram escolhidos valores de intensidades turbulentas de baixo grau de magnitude justamente como uma aproximação da condição laminar. Todavia, sabe-se que a comparação de um resultado envolvendo turbulência, ainda que com intensidade muito reduzida, com uma expressão que envolve a adaptação de um escoamento puramente laminar, não é completamente válida. O objetivo desta proposta é justamente verificar até que ponto, e sob que condições, a modificação de um modelo de escoamento laminar adaptado para baixos graus de turbulência pode ser considerado fisicamente coerente. A tentativa de combinação de dois mecanismos de transporte (difusão browniana e induzida por cisalhamento) também foi feita por HUISMAN e TRÄGARDH (1999a). Eles propuseram a modificação da expressão de fluxo de permeado dependente do movimento browniano apresentada por TRETTIN e DOSHI (1978) e TRETTIN (1980), mas sem a inclusão de um modelo de turbulência para resolver as baixas intensidades.



## Capítulo 5

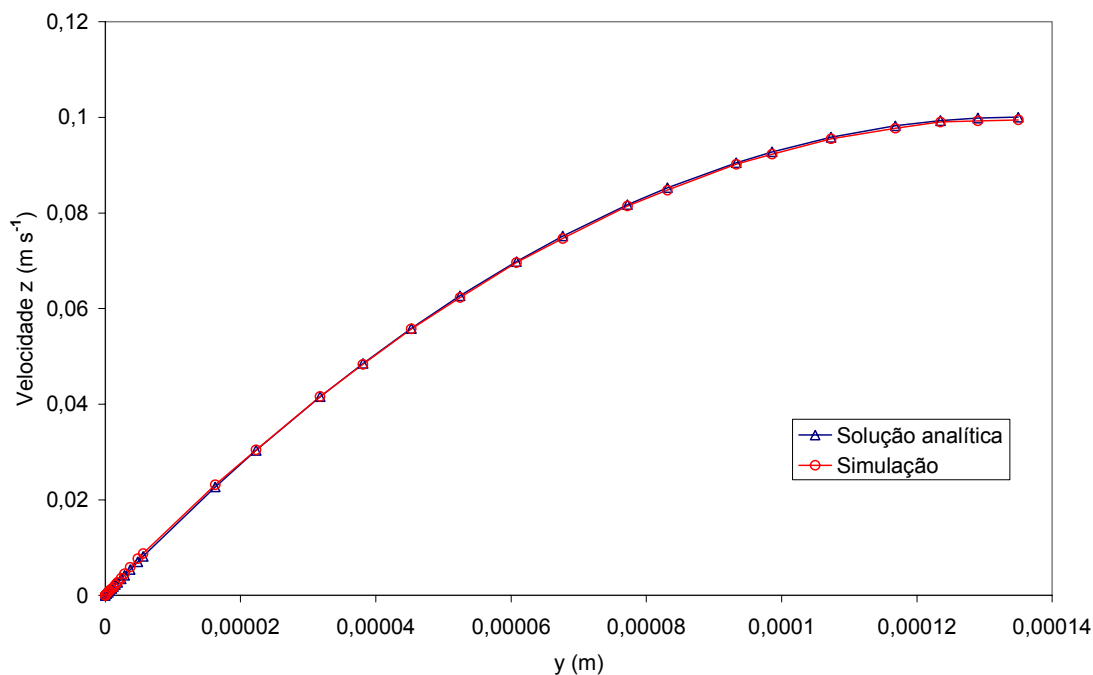
### Resultados e discussão

Primeiramente serão apresentados os resultados obtidos na avaliação e aprendizagem do simulador (filme líquido descendente com e sem transferência de massa) e, na sequência, os resultados dos estudos de caso envolvendo processos de separação com membranas. Todos os dados obtidos estão tabelados no Apêndice.

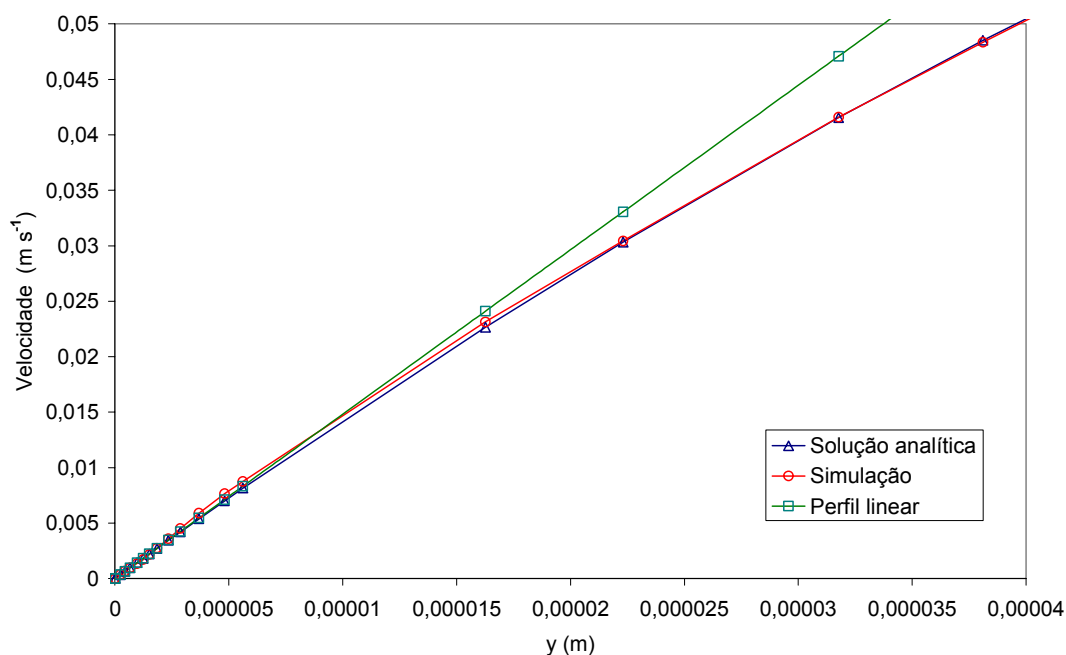
#### 5.1 Estudos de avaliação – escoamento de filme líquido descendente

A Figura 5.1 apresenta os resultados obtidos na simulação do escoamento do filme de água descendente, onde tem-se a comparação entre o perfil de velocidade  $v_z$  simulado, no final da geometria (em  $z = 1$  m), com aquele obtido da solução analítica (Equação 4.1) em função da distância da parede, na direção  $y$ .

Na Figura 5.2 tem-se os mesmos resultados da Figura 5.1 plotados para valores de  $y$  muito pequenos, ou seja, próximo à parede sólida - onde  $(y/\delta)^2 \ll (y/\delta)$  - incluído ainda, para fins de comparação, o perfil linear de velocidades (que será assumido na consideração do modelo de transferência de massa descrito pela Equação (4.7)).



**Figura 5.1:** Perfil de velocidades no filme líquido descendente



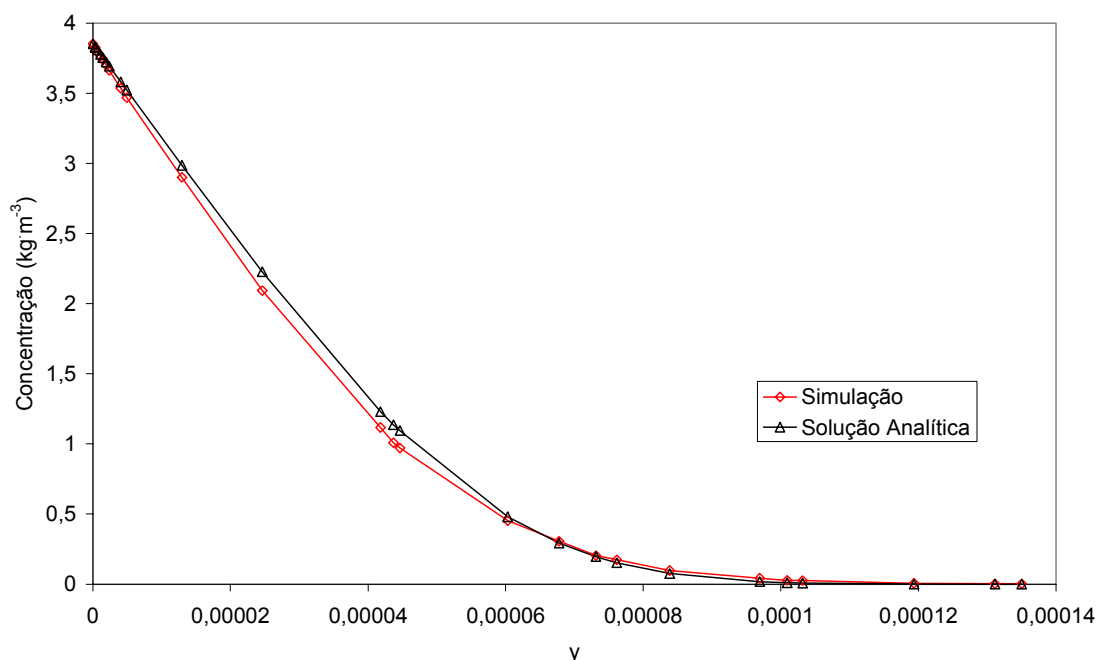
**Figura 5.2:** Perfil de velocidades no filme líquido descendente e perfil próximo à parede

A análise destas figuras indica boa concordância entre o perfil da solução analítica e o resultado gerado pelo CFX. O máximo desvio percentual entre a solução analítica e o simulador observado é de aproximadamente 9,51 %; dos 31 pontos comparados ao longo da coordenada  $y$ , apenas nove deles apresentam um desvio acima de 3% em relação à solução analítica. A diferença entre os valores é provavelmente decorrência da localização dos pontos em regiões da malha onde as imperfeições são maiores. No caso específico da Figura 5.2,

percebe-se também que a consideração do perfil linear próximo à parede é válida, sobretudo para a distância entre 0 e  $3 \cdot 10^{-5}$  m, aproximadamente.

## 5.2 Estudos de avaliação – difusão em filme líquido descendente

Os resultados da difusão de 1,1,1-tricloroetano (TCA) a partir da segunda metade da parede (Figura 4.2) sendo transportado pelo escoamento de água adjacente estão ilustrados na Figura 5.3. Escolheu-se aleatoriamente o valor da ordenada  $z$  igual a 4 cm a partir do referencial adotado, uma vez que os outros perfis obtidos em outras distâncias se comportam de maneira análoga. Os resultados são expressos em termos de concentração *versus* a distância  $y$ .



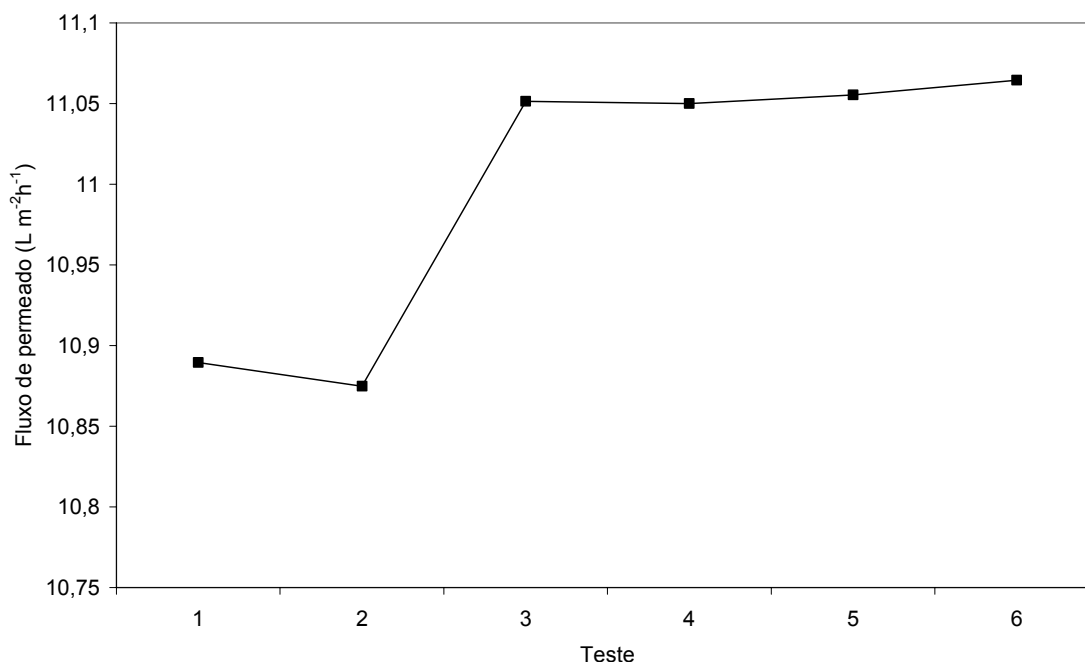
**Figura 5.3:** Perfil de concentração da difusão em filme líquido descendente

A análise desta figura mostra que o simulador foi capaz de prever as características dos processos de difusão com um bom grau de concordância previsto pela solução clássica (Equação (4.13)); tanto na presença quanto na ausência de um componente se difundindo em meio líquido. Os resultados obtidos demonstram que a ferramenta utilizada possui um grande potencial para prever diferentes tipos de fenômenos físicos, inclusive aqueles envolvendo processos de separação por membranas.

Nos próximos itens serão apresentados os resultados obtidos para os diferentes estudos de caso envolvendo membranas.

### 5.3 Microfiltração tangencial de partículas de sílica

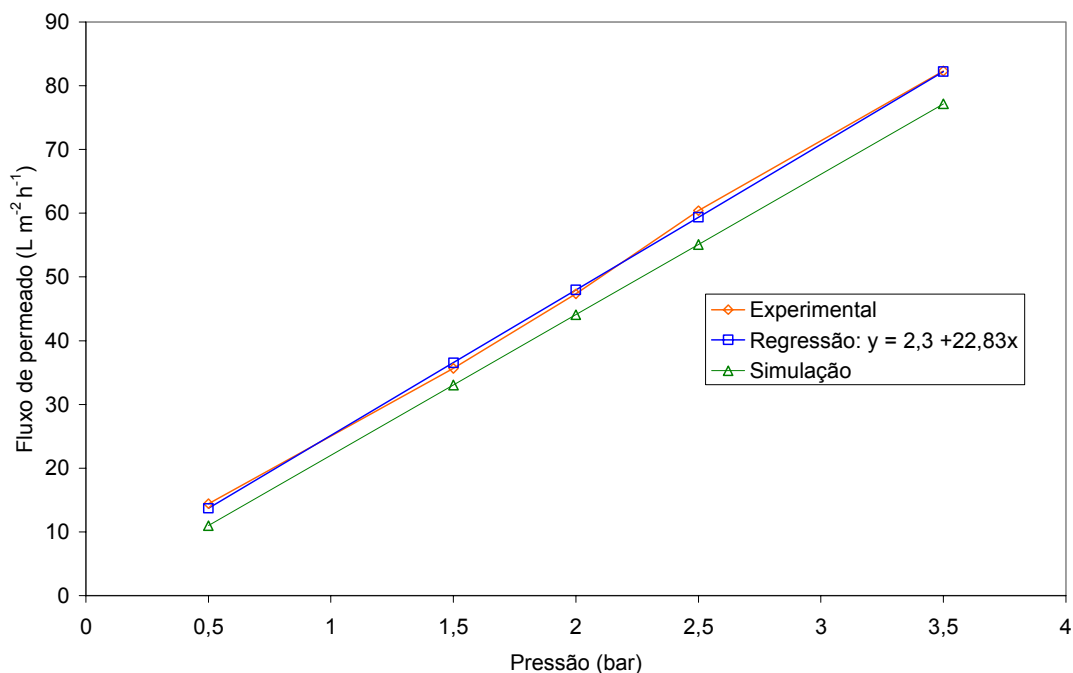
Os resultados do teste de malha para a microfiltração de suspensão de partículas de sílica estão ilustrados na Figura 5.4.



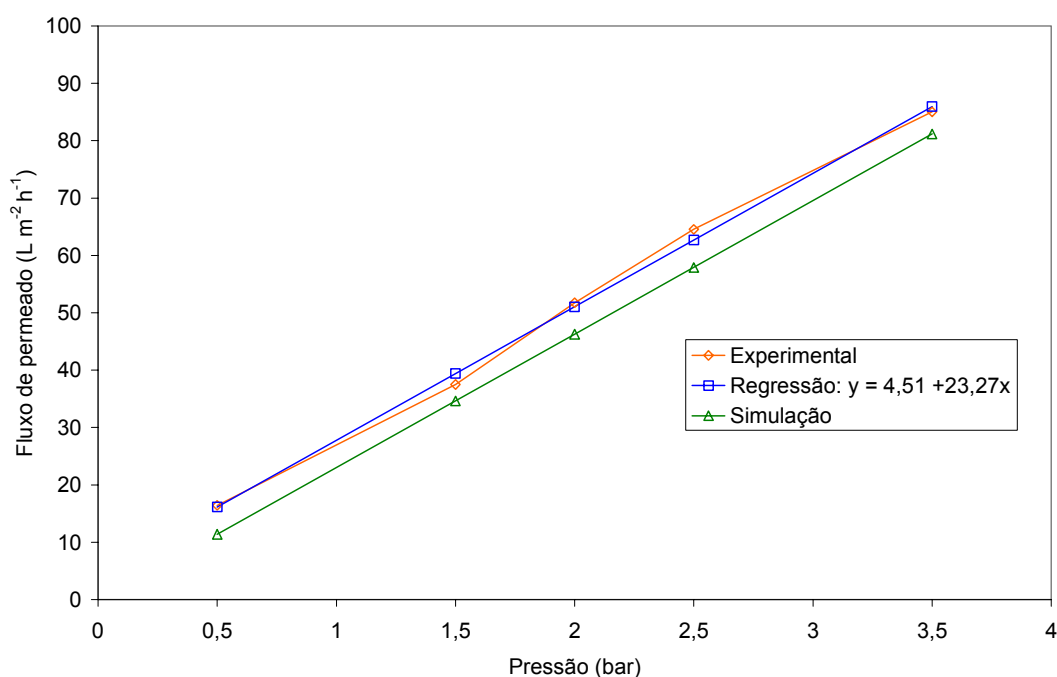
**Figura 5.4:** Testes de malha na pressão de 0,5 bar e velocidade de alimentação de  $0,16 \text{ m s}^{-1}$

Verifica-se, através da Figura 5.4, que o fluxo permeado médio tende a situar-se entre os valores de  $10,9$  e  $11 \text{ L m}^{-2} \text{ h}^{-1}$ . Nas últimas três simulações, a variação do fluxo em função do número de discretizações da malha é quase nula; tal fato é esperado pois isto indica que a partir de determinado teste o refino da malha não influencia mais nos resultados. Escolheu-se a configuração do teste 6 para desempenhar as simulações que seguem.

Conforme comentado anteriormente, os dados experimentais obtidos por RÄDER (2003) foram utilizados para realizar uma regressão linear que permitisse estimar os valores de permeabilidade hidráulica para alguns experimentos realizados pelo autor. Os valores obtidos são iguais a  $22,83$  e  $23,27 \text{ L m}^{-2} \text{ h}^{-1} \text{ bar}^{-1}$ , para as velocidades de escoamento de  $0,16 \text{ m s}^{-1}$  e  $1,67 \text{ m s}^{-1}$ , respectivamente. Com base nestes valores, e a partir da Equação (4.19), calculou-se os valores da permeabilidade da Lei de Darcy,  $k$ , expressa em  $m^2$ , obtendo-se valores iguais a  $5,64 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$  e  $5,75 \cdot 10^{-17} \text{ m}^2$  para as velocidades de alimentação de  $0,16 \text{ m s}^{-1}$  e  $1,67 \text{ m s}^{-1}$ , respectivamente. Estes valores foram utilizados no ambiente de simulação do CFX. Os resultados destas regressões juntamente com as simulações e dados experimentais estão ilustrados nas figuras 5.5 e 5.6 ( $0,16$  e  $1,67 \text{ m s}^{-1}$  de velocidade de alimentação, respectivamente). Os dados numéricos do fluxo permeado representam valores médios na área, sendo que o CFX possui uma função que realiza automaticamente este cálculo.



**Figura 5.5:** Simulação, dados experimentais e a regressão linear realizada a partir dos dados de RÄDER (2003), na velocidade de 0,16 m s<sup>-1</sup>



**Figura 5.6:** Simulação, dados experimentais, e a regressão linear realizada a partir dos dados de RÄDER (2003) na velocidade de 1,67 m s<sup>-1</sup>

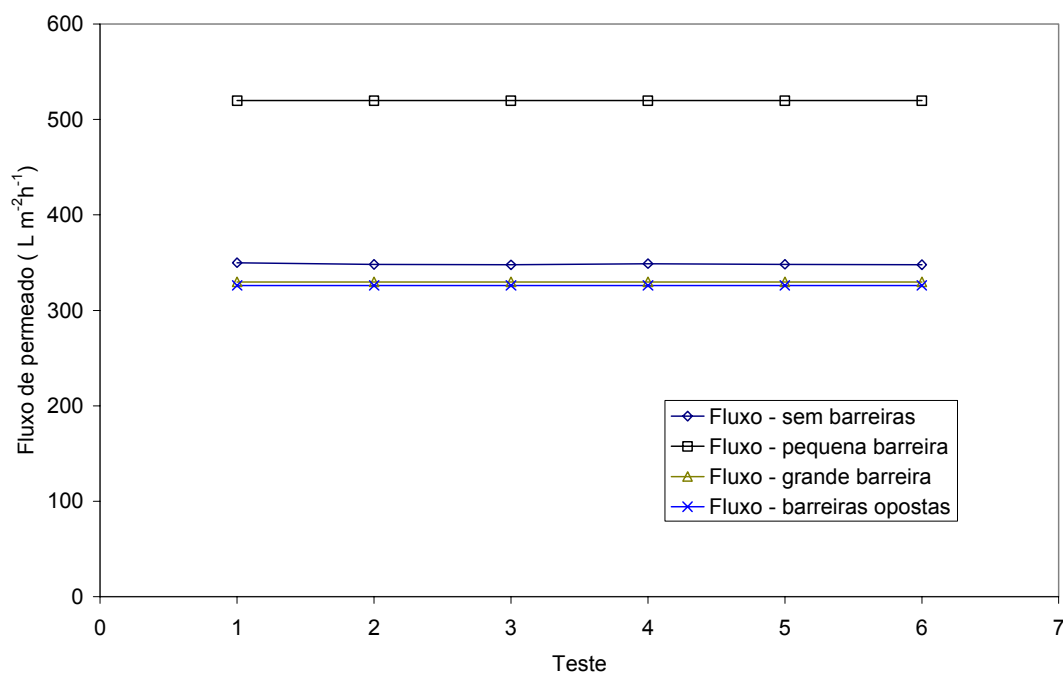
A análise das figuras 5.5 e 5.6 mostra que a simulação conseguiu reproduzir de forma adequada os dados experimentais. Tanto os dados experimentais quanto os da simulação não apresentam uma tendência assintótica à medida que se aumenta a pressão, indicando que pouca, ou nenhuma, polarização por concentração está ocorrendo, nas condições testadas.

Todavia, é importante ressaltar que a adaptação da Lei de Darcy usada é linear (primeiro termo da Equação (4.15), segundo que  $K_{perda}$  foi considerado zero) e, portanto, espera-se que os resultados de simulação apresentem um comportamento linear, da mesma forma que as curvas de regressão expressas nas figuras 5.5 e 5.6. A máxima diferença percentual entre os resultados da simulação e da média experimental ficou em 23,88% para a velocidade de 0,16  $\text{m s}^{-1}$  e em 30,82% para a velocidade de 1,67  $\text{m s}^{-1}$ , ambos para a pressão transmembrana de 0,5 bar. Todos os demais pontos, independente da velocidade, retornaram desvios abaixo de 10,6 %. Neste contexto, é importante ressaltar que os dados experimentais obtidos por RÄDER (2003) apresentaram diferenças percentuais entre experimentos e réplicas que variaram na faixa de 1 a 15%.

Como a variabilidade entre um experimento e outro não pode ser evitada, e apesar dos desvios relativamente altos entre a simulação e os valores experimentais, pode-se dizer que o CFX foi capaz de reproduzir o comportamento do processo analisado. No caso da velocidade tangencial de 1,67  $\text{m s}^{-1}$  os desvios percentuais entre simulação e a média dos experimentos foram maiores; todavia, para ambos os valores de velocidade de alimentação, verificou-se que tal desvio diminuía com o aumento da pressão transmembrana (de 23,88% para 6,27% na velocidade de 0,16  $\text{m s}^{-1}$ , e de 30,82% para 4,52% na velocidade de 1,67  $\text{m s}^{-1}$ ). Para a maior velocidade de alimentação, o decréscimo do desvio foi mais acentuado, ao passo que, na menor velocidade, houve um pequeno salto no desvio, nas pressões de 2 para 2,5 bar. Uma possível explicação para estes resultados pode estar associada ao valor da intensidade turbulenta ajustado na entrada do módulo, que foi igual a 5% para todas as simulações; tal valor de intensidade de turbulência pode não ser adequado para pressões mais baixas visto que o fluxo de permeado aumenta com a pressão transmembrana e, conseqüentemente, aumentam também os efeitos turbulentos locais. Desta forma, a utilização de algum método de estimativa de intensidade turbulenta, que leve em conta as variações na pressão transmembrana, pode ser mais adequado para a simulação deste tipo de problema.

## 5.4 Microfiltração tangencial com barreiras ao escoamento

Primeiramente, foram realizados os testes de malha para verificar a sensibilidade dos parâmetros da malha nos resultados da simulação. Cada teste realizado corresponde a uma malha com um determinado número de tetraedros nos tubos de entrada e saída, na geometria correspondente ao módulo e à membrana. Os testes foram realizados com condição de interface entre a superfície da membrana e o módulo. A geração da malha é realizada pelo ICEM CFD, que é o programa que vem junto com o CFX, e é onde são construídas as geometrias e malhas dos problemas que serão simulados depois. A geração da malha é feita de forma indireta, ou seja, o número de elementos de volume não é especificado diretamente, sendo especificados os fatores de escala numéricos adimensionais que permitem controlar desde o menor até o maior volume discretizado. Quanto menor o fator de escala para um mesmo tipo de malha, mais elementos são gerados. Os resultados obtidos estão ilustrados na Figura 5.7, onde tem-se o fluxo permeado médio na área plotado para cada teste.



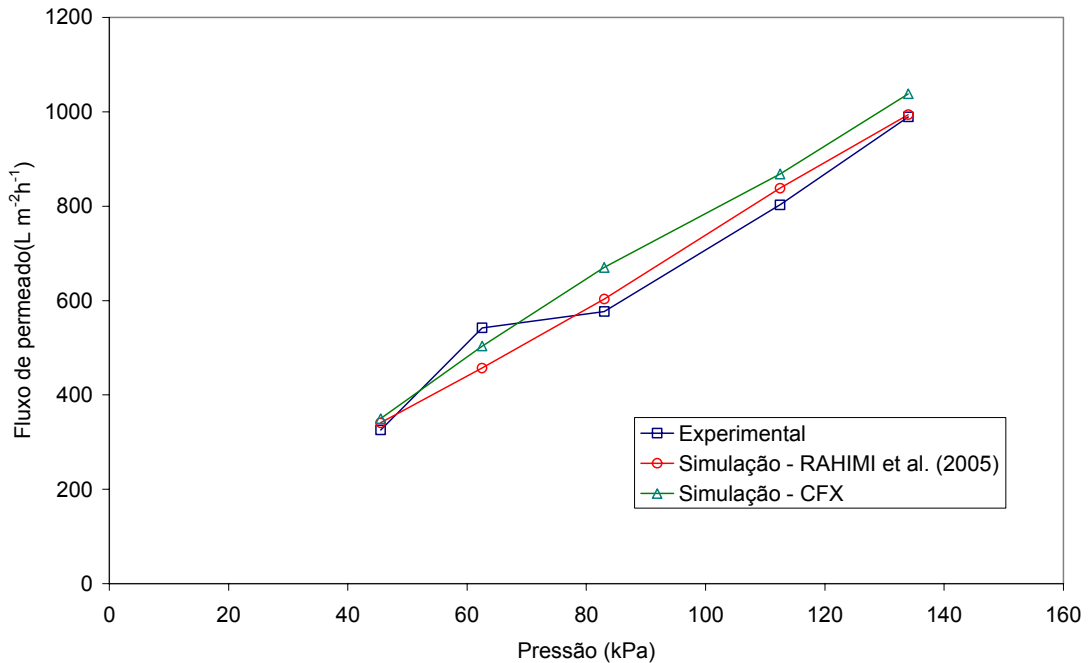
**Figura 5.7:** Fluxo permeado médio para cada teste de malha.

A análise da Figura 5.7 mostra que a variação do fluxo permeado médio se dá ao redor de  $350 \text{ L m}^{-2} \text{ h}^{-1}$  para a geometria sem barreiras. Na geometria com pequena barreira o valor situa-se em cerca de  $519,7 \text{ L m}^{-2} \text{ h}^{-1}$ , e nos módulos com grande barreira e barreiras opostas, ao redor de  $329,7 \text{ L m}^{-2} \text{ h}^{-1}$  e  $325,9 \text{ L m}^{-2} \text{ h}^{-1}$ , respectivamente. As variações no fluxo são muito pequenas, na faixa de 0,1 a 0,5 %. Tal variação está bem abaixo dos desvios experimentais comuns, indicando para este caso que o aumento no número de tetraedros praticamente não influenciou o fluxo de permeado. As configurações que apresentavam maior número de tetraedros (teste 6) foram empregadas no restante das simulações.

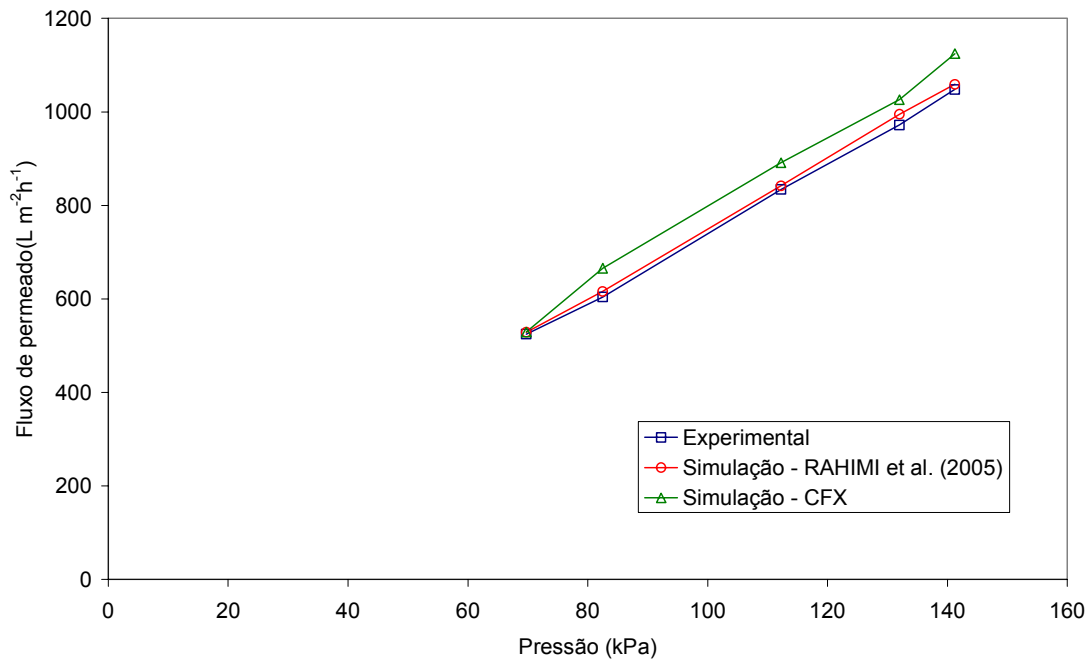
Primeiramente, foram realizadas simulações com os quatro tipos de módulos de forma a comparar os resultados do CFX com os dados experimentais e de simulação realizados por RAHIMI *et al.* (2005), bem como observar o comportamento dos campos de velocidade e a distribuição de fluxo permeado na saída da membrana. Estas simulações foram realizadas aplicando-se apenas a condição de interface entre a parte inferior do módulo e a parte superior da membrana. Esta condição representa uma conexão da geometria do módulo com a geometria da membrana; nesta situação, o programa simula apenas a passagem de fluido entre uma região e outra, sem levar em conta efeitos de não-deslizamento sobre a superfície da membrana. Numa outra seqüência, a condição de parede (não-deslizamento) foi aplicada na parte inferior do módulo, enquanto que uma condição de entrada na superfície da membrana foi usada tomando como base a média entre as pressões nos tubos de entrada e saída do módulo. Nas figuras 5.8 a 5.11 encontram-se os resultados de fluxo permeado médio na área em função da pressão transmembrana supondo-se apenas condição de interface. A pressão transmembrana é calculada da seguinte forma:

$$\Delta P_T = \frac{P_{conc} + P_{entrada}}{2} - P_{perm} \quad (5.1)$$

onde,  $\Delta P_T$  é a pressão transmembrana,  $P_{conc}$  é a pressão na saída de concentrado,  $P_{entrada}$  é a pressão na entrada e  $P_{perm}$  é a pressão na saída de permeado. A pressão de referência aplicada (que é exigida pelo CFX) foi igual a 0 kPa, sendo este valor também ajustado na saída de permeado.

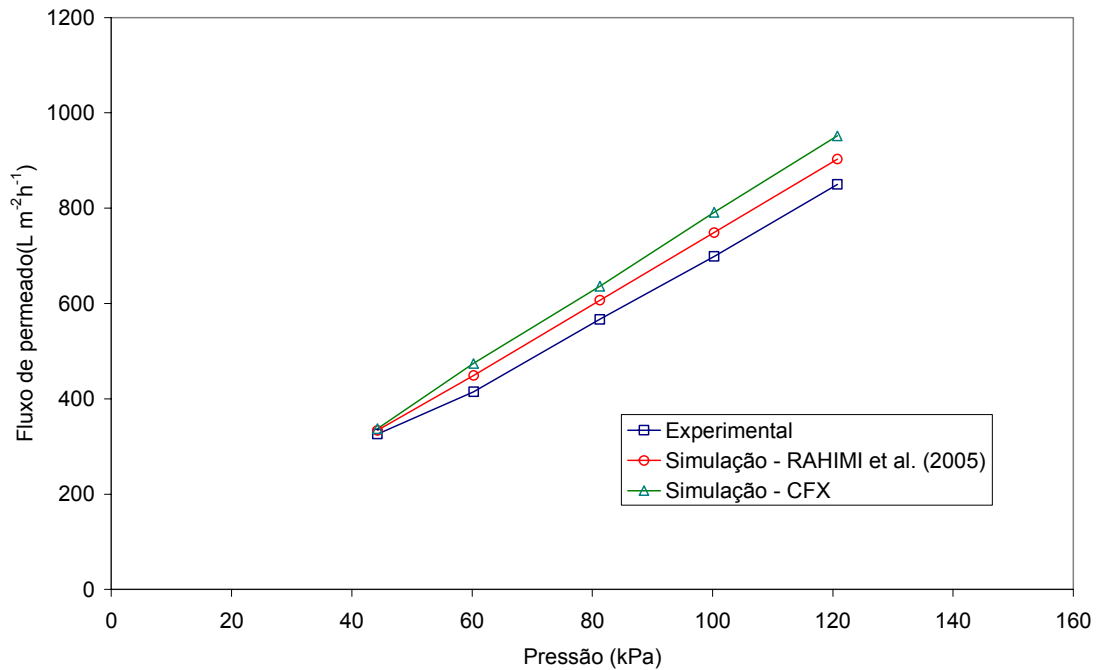


**Figura 5.8:** Fluxo permeado *versus* pressão transmembrana para módulo sem barreira

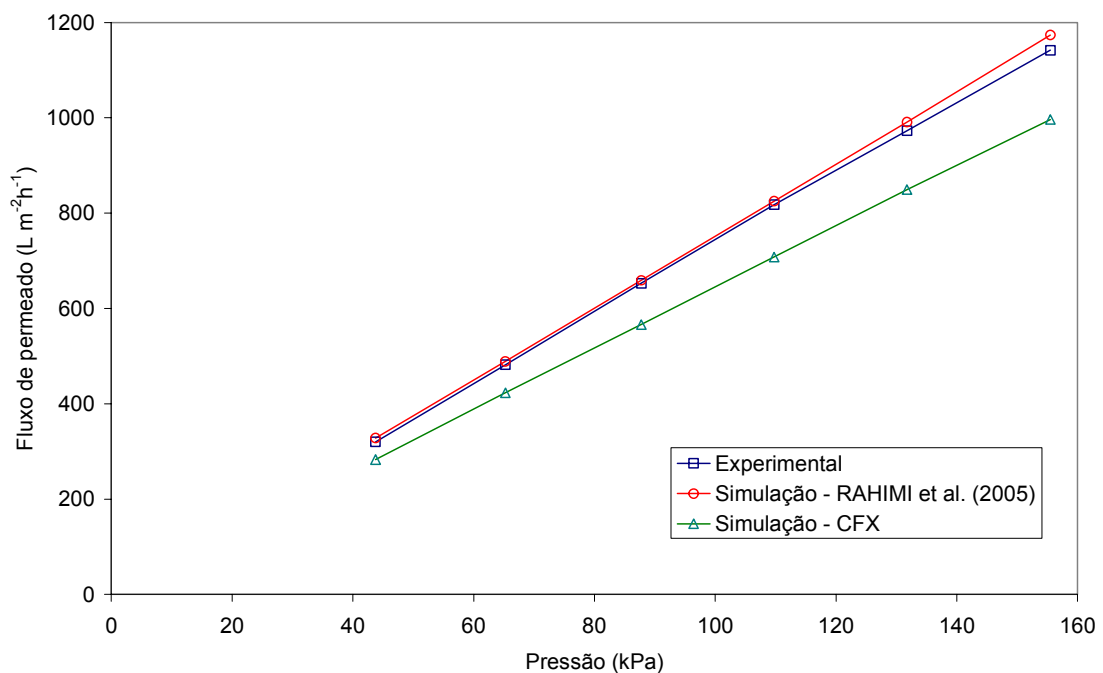


**Figura 5.9:** Fluxo permeado *versus* pressão transmembrana para módulo com pequena barreira trapezoidal





**Figura 5.10:** Fluxo permeado *versus* pressão transmembrana para módulo com grande barreira trapezoidal



**Figura 5.11:** Fluxo permeado *versus* pressão transmembrana para módulo com barreiras opostas

Os resultados demonstram que os dados provenientes da simulação concordam razoavelmente bem com os dados experimentais e com as simulações realizadas por RAHIMI *et al.* (2005). A Tabela 5.1 apresenta os máximos desvios percentuais obtidos para cada sistema:

**Tabela 5.1:** Máximos desvios percentuais entre experimentos e simulações para diferentes pressões transmembrana - I

Módulo	Máximo desvio percentual (%)	
	CFX-experimental	CFX-CFD autores*
Sem barreira	16,16 (83kPa)	11,15 (83kPa)
Pequena barreira	10,23 (82,50kPa)	8,08 (82,50kPa)
Grande barreira	14,27 (60,25kPa)	5,68 (100,25kPa)
Obstáculos	13,46 (109,75kPa)	15,11 (155,50kPa)

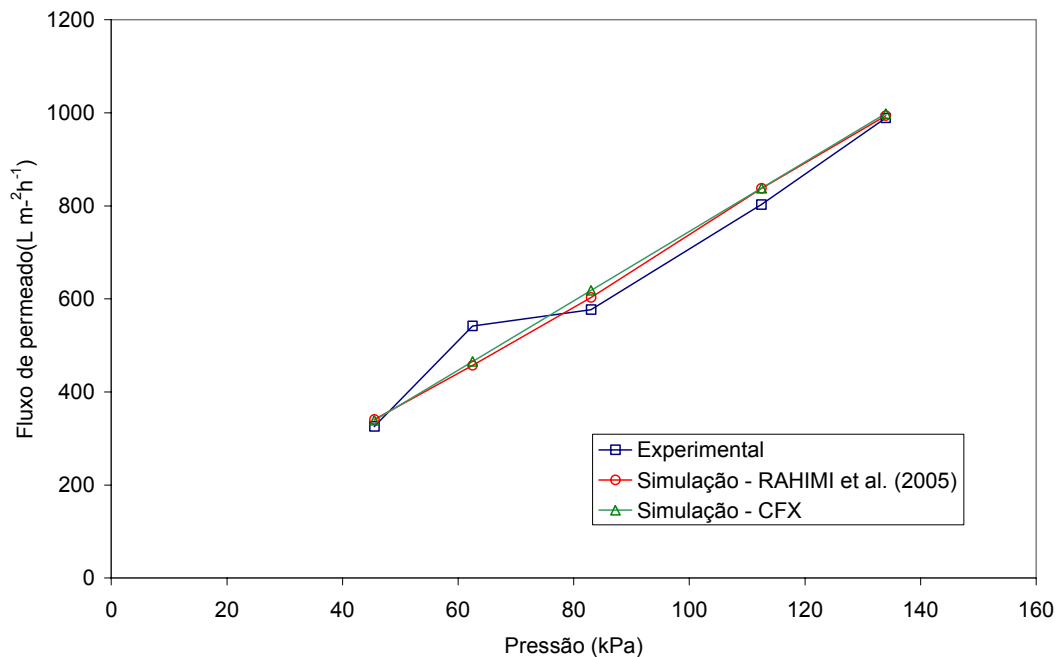
\*RAHIMI *et al.* (2005)

Os resultados da simulação, independente do programa utilizado, não podem teoricamente, diferir significativamente entre si, principalmente se os estudos de caso são rodados sob condições idênticas (mesma malha, mesmo método de discretização e funções de interpolação, etc.). Apesar do número de tetraedros diferir entre o estudo feito por RAHIMI *et al.* (2005) e aquele usado no presente trabalho, os desvios entre os resultados obtidos por este simulador quando comparados com os resultados destes autores, não deveriam ser muito elevados. De acordo com a Tabela 5.1, os máximos desvios encontrados entre as simulações chegam a 15%.

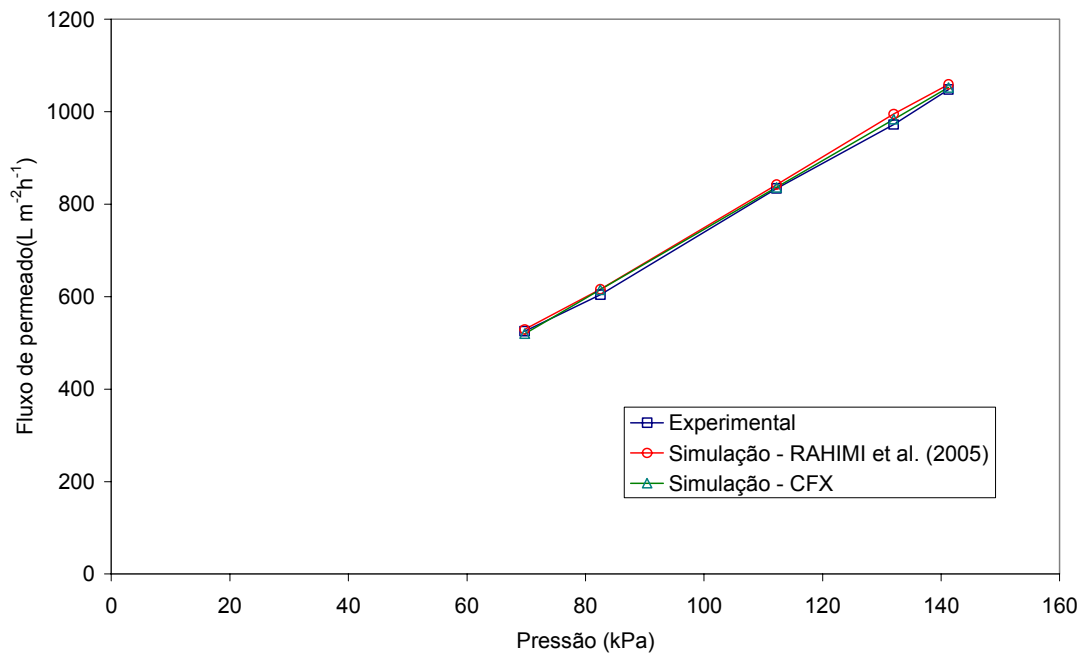
É importante frisar que no trabalho desenvolvido por RAHIMI *et al.* (2005) não está apresentado claramente como são calculados os resultados de fluxo permeado, já que a comparação feita aqui é com valores de média ponderada na área. Desta forma, possíveis imperfeições da malha são levadas em conta no cálculo do fluxo permeado médio, e isto pode ser uma das causas para o desvio entre os resultados dos diferentes simuladores.

De forma a verificar até que ponto a condição de contorno influencia uma simulação fluidodinâmica, os resultados ilustrados pelas figuras 5.12 a 5.15 foram obtidos aplicando-se condição de não-deslizamento na parede inferior de cada módulo, e com pressão transmembrana aplicada na entrada da geometria que representa a membrana (superfície da mesma). A pressão na saída da membrana também foi ajustada como sendo igual a zero. Condição de não-deslizamento nas paredes laterais foi aplicada nesta situação, da mesma forma que nas simulações anteriores. A mudança na abordagem da condição de contorno foi

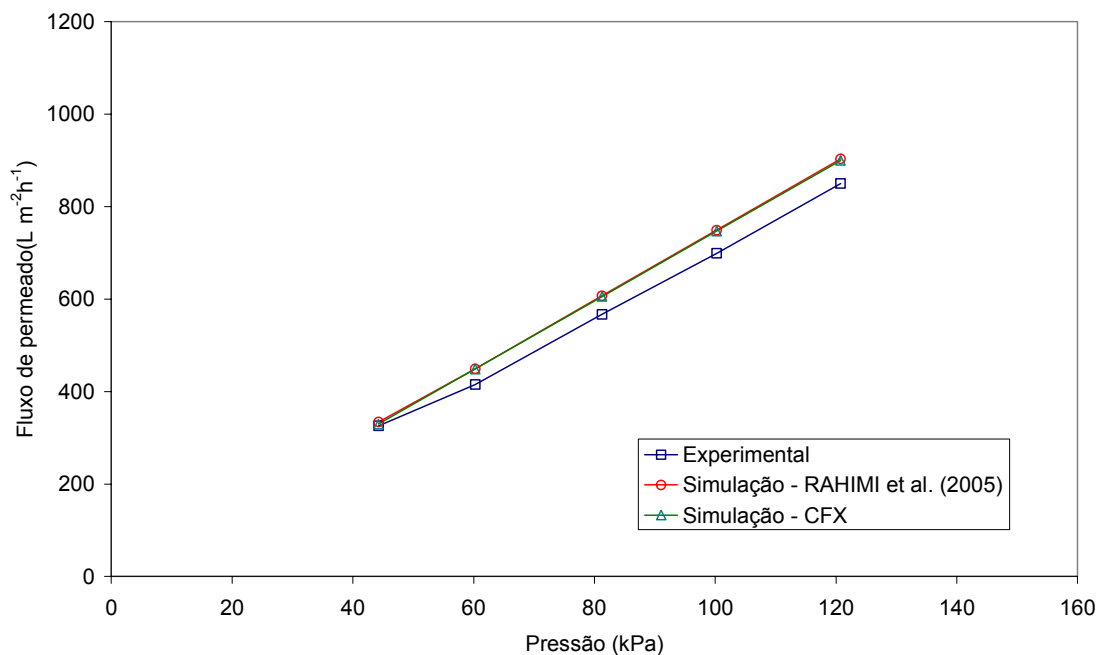
realizada, pois no trabalho de RAHIMI *et al.* (2005) não é discutido como foi tratada a interação entre a membrana e a geometria do módulo.



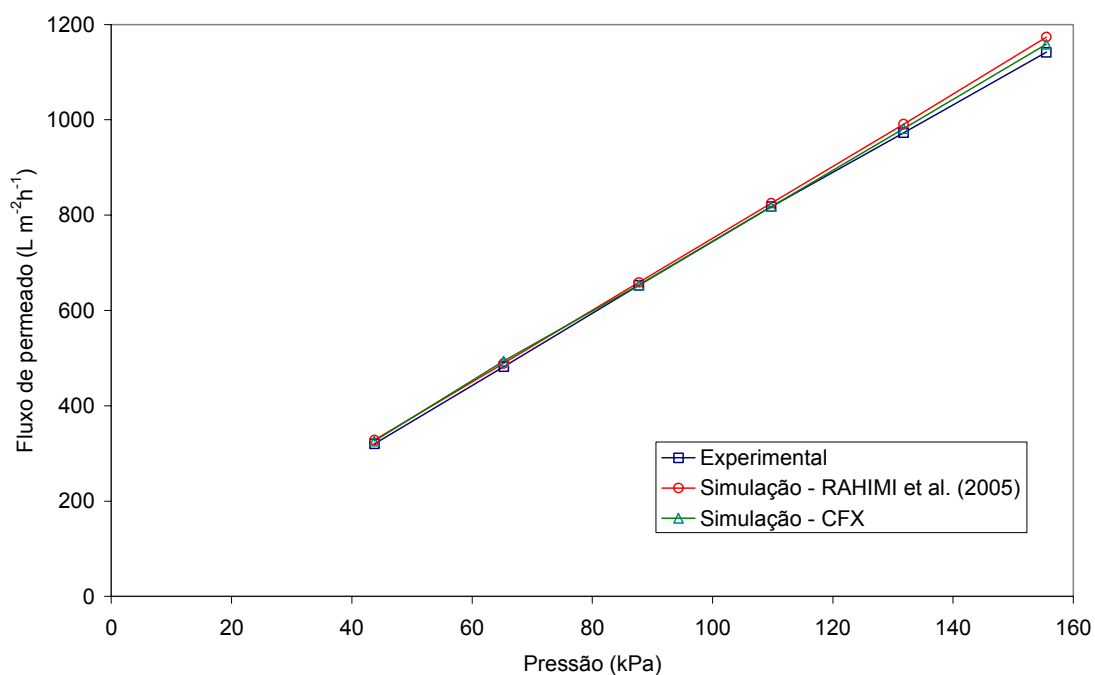
**Figura 5.12:** Fluxo permeado *versus* pressão transmembrana para módulo sem barreira – condição de contorno modificada



**Figura 5.13:** Fluxo permeado *versus* pressão transmembrana para módulo com pequena barreira trapezoidal – condição de contorno modificada



**Figura 5.14:** Fluxo permeado *versus* pressão transmembrana para módulo com grande barreira trapezoidal – condição de contorno modificada



**Figura 5.15:** Fluxo permeado *versus* pressão transmembrana para módulo com barreiras opostas – condição de contorno modificada

Observa-se através das figuras 5.12 a 5.15 que a colocação da condição de contorno de não-deslizamento fez com que os resultados gerados pelo CFX ficassem mais próximos aos valores experimentais e ainda mais próximos às simulações realizadas pelos autores; este fato pode ser verificado pela comparação das figuras 5.8 a 5.11 com as figuras 5.12 a 5.15, respectivamente. Como no trabalho de RAHIMI *et al.* (2005) não foi especificado o

tratamento da região de contato do módulo com a membrana, a condição de não-deslizamento se mostrou a mais adequada para descrever o escoamento dentro dos módulos.

A Tabela 5.2 apresenta também os máximos desvios obtidos nesta nova configuração de condição de contorno entre módulo e membrana. A análise desta tabela mostra que o maior desvio percentual entre o CFX e os dados de simulação dos autores foi de 2,5 %, sendo que, para a maior parte dos dados, os desvios ficaram abaixo de 1%. Na aplicação apenas da condição de interface, estes desvios foram da ordem de 10%, o que evidencia a importância da escolha da condição de contorno adequada. Vale ressaltar que uma comparação ideal só seria possível se as malhas geradas em diferentes simuladores fossem absolutamente idênticas.

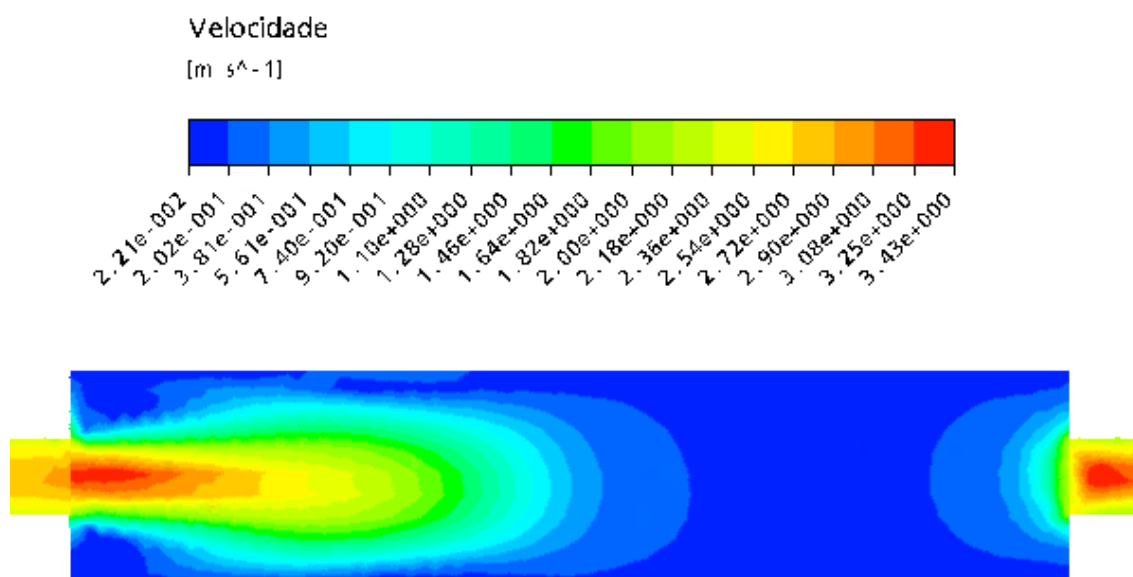
**Tabela 5.2:** Máximos desvios percentuais entre experimentos e simulações para diferentes pressões transmembrana - II

Módulo	Máximo desvio percentual	
	CFX- experimental	CFX-CFD autores
Sem barreira	-14,08 (45,50kPa)	2,56 (83,00kPa)
Pequena barreira	1,01 (69,75kPa)	-1,76 (82,50kPa)
Grande barreira	8,18 (60,25kPa)	-1,28 (44,25kPa)
Obstáculos	1,87 (43,75kPa)	-1,31 (155,50kPa)

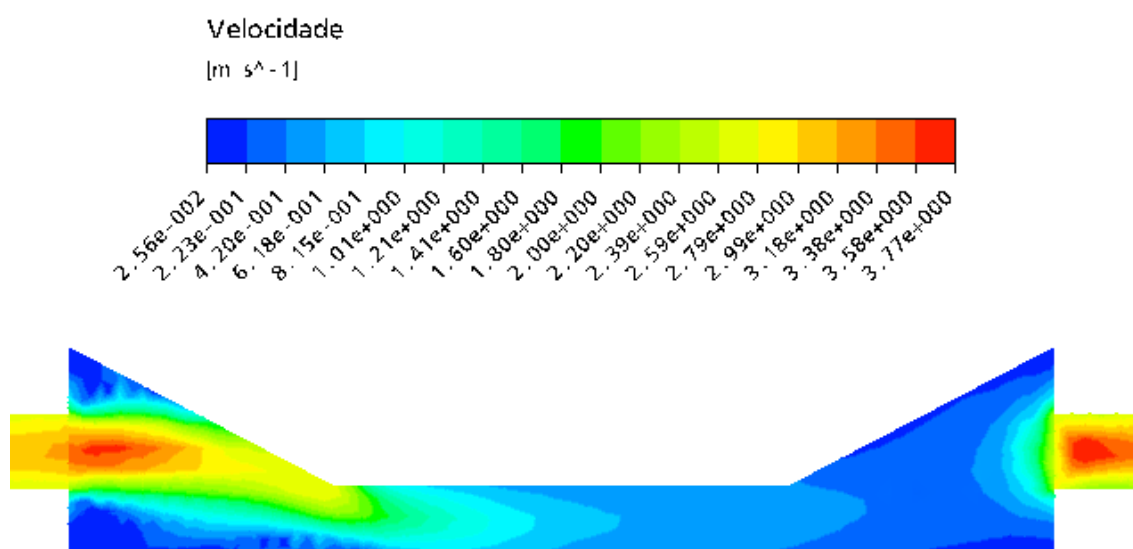
A comparação da Tabela 5.1 e Tabela 5.2 mostra que os desvios máximos, tanto em relação aos dados experimentais quanto aos de simulação, tornaram-se menores, confirmando que a segunda condição de contorno é efetivamente a mais adequada para descrever o problema. Isto também está de acordo com o fato de que, no tratamento matemático dos trabalhos de modelagem de processos de separação por membranas, a aplicação da condição de contorno de não-deslizamento sobre a superfície da membrana é a mais adequada para descrever o transporte de um ou mais solutos através de meios porosos. Apesar disso, os erros não estão distribuídos de uma forma uniforme em todas as simulações. Ou seja, os resultados do CFX são quase sempre maiores ou menores que os dados experimentais (erros sistemáticos) não existindo uma distribuição estatisticamente aleatória de valores. As simulações realizadas pelo CFX geram resultados que, na maior parte das vezes, são maiores do que os dados experimentais e de simulação de RAHIMI *et al.*

As figuras 5.16 a 5.19 ilustram alguns resultados do campo de velocidades para as pressões transmembrana de 45,5 kPa (módulo sem barreira), 69,75 kPa (módulo com pequena barreira), 44,25 kPa (módulo com grande barreira) e 43,75 kPa (módulo com barreiras opostas), para a segunda situação, onde modificou-se a abordagem da condição de contorno entre o módulo e a membrana. O plano representa um corte longitudinal ao escoamento apenas na seção correspondente ao módulo, exatamente na metade da geometria, sem incluir a seção correspondente à membrana. A velocidade apresentada é aquela resultante das três componentes  $u$ ,  $v$  e  $w$ :

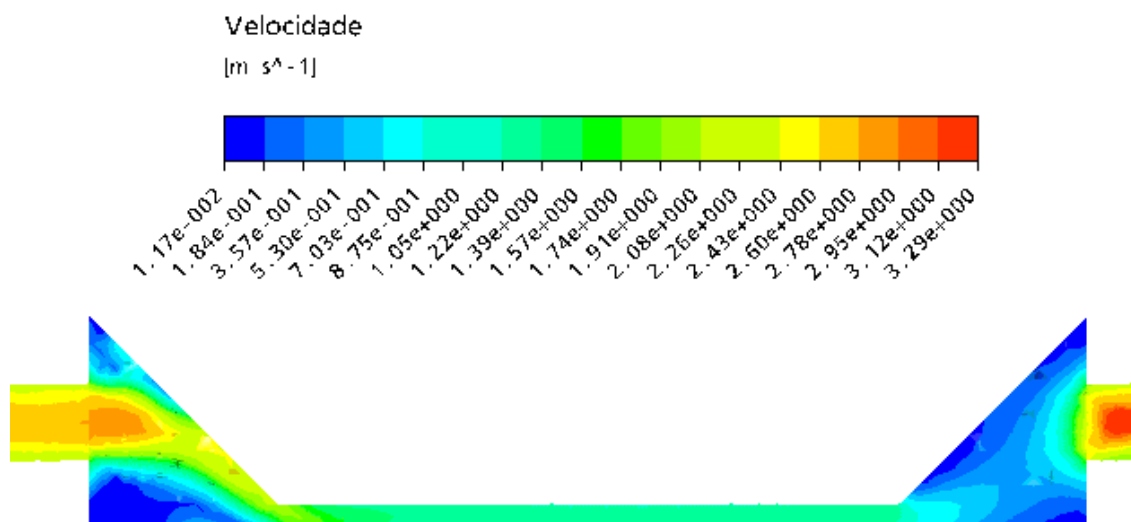
$$V_R = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2} \quad (5.2)$$



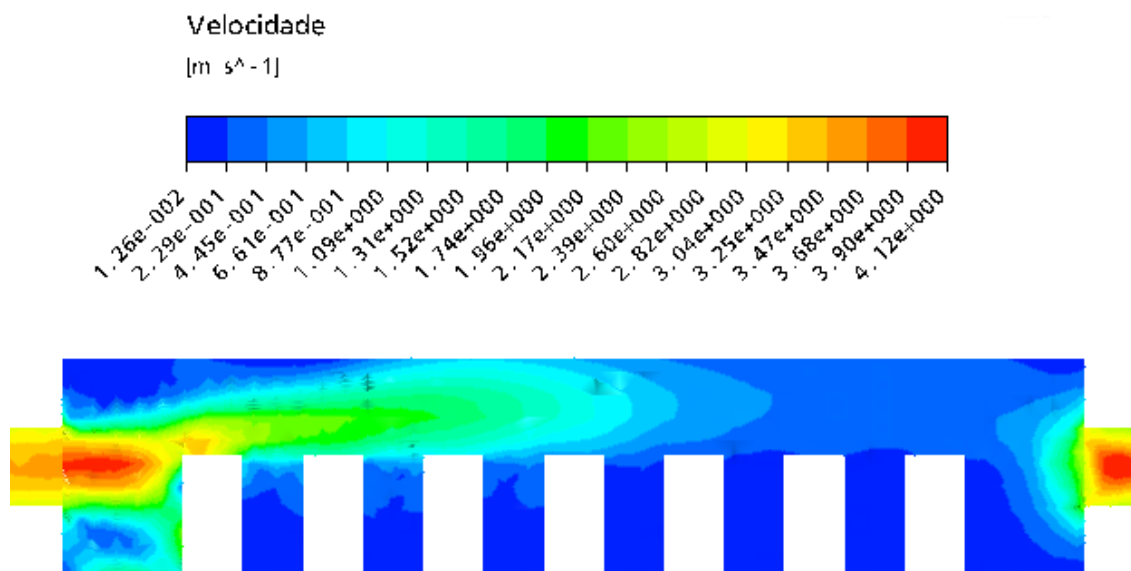
**Figura 5.16:** Campo de velocidades para módulo sem barreira à pressão transmembrana de 45,5 kPa.



**Figura 5.17:** Campo de velocidades para módulo com pequena barreira trapezoidal à pressão transmembrana de 69,75 kPa.



**Figura 5.18:** Campo de velocidades para módulo com grande barreira trapezoidal à pressão transmembrana de 44,25 kPa.

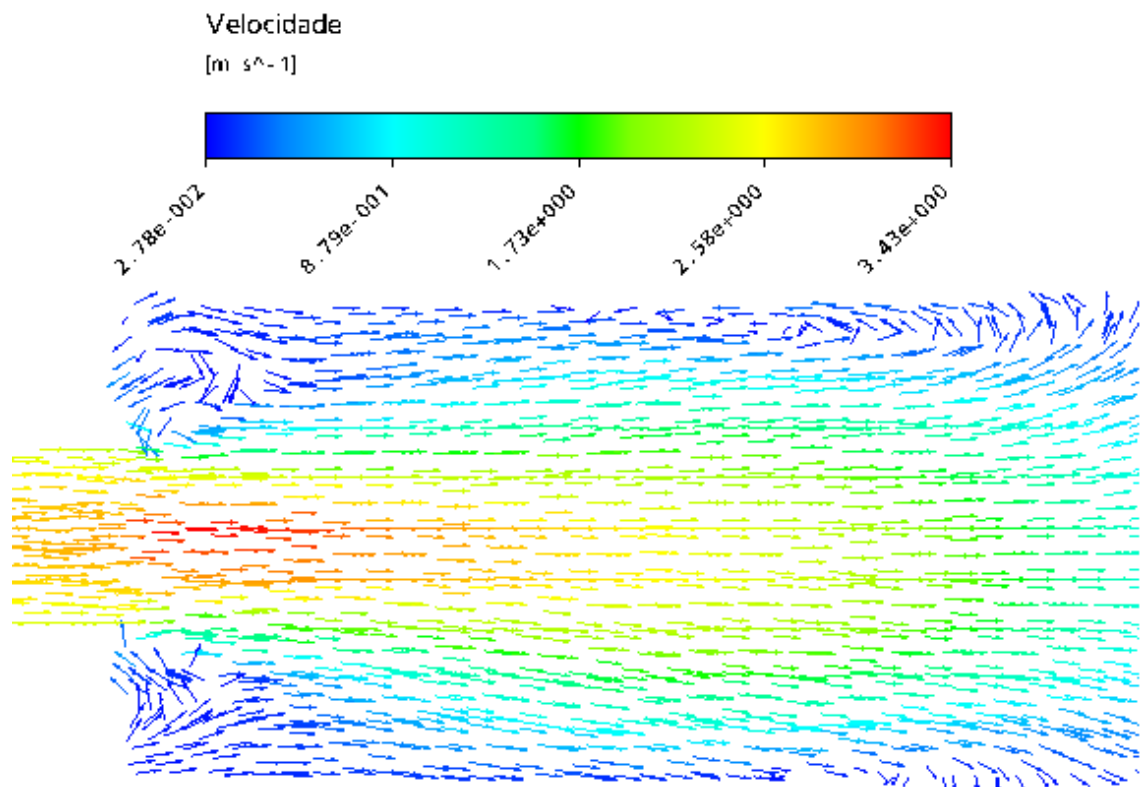


**Figura 5.19:** Campo de velocidades para módulo com obstáculos opostos, à pressão transmembrana de 43,75 kPa.

Em todas as superfícies de contorno ilustradas verifica-se comportamento muito semelhante nas regiões de entrada e saída da geometria do módulo. Por exemplo, na Figura 5.16 verifica-se a queda brusca de velocidade devido à expansão brusca ocorrida quando da passagem do fluido do tubo de entrada para o módulo sem barreiras. A velocidade cai de  $3,4 \text{ m s}^{-1}$  para  $1 \text{ m s}^{-1}$ , aproximadamente, compreendendo uma diminuição de mais de 70% em sua magnitude, e outra mudança de velocidade ocorre quando o fluido deixa o módulo e entra no tubo de saída, na seção à direita do módulo. Nas geometrias com obstáculos trapezoidais, figuras 5.17 e 5.18, a queda é ligeiramente menos acentuada na geometria com maior obstáculo. Isto pode ser explicado pelo fato de que o fluido, ao passar por um obstáculo em forma de trapézio com uma inclinação mais íngreme, não tem espaço suficiente para dissipar

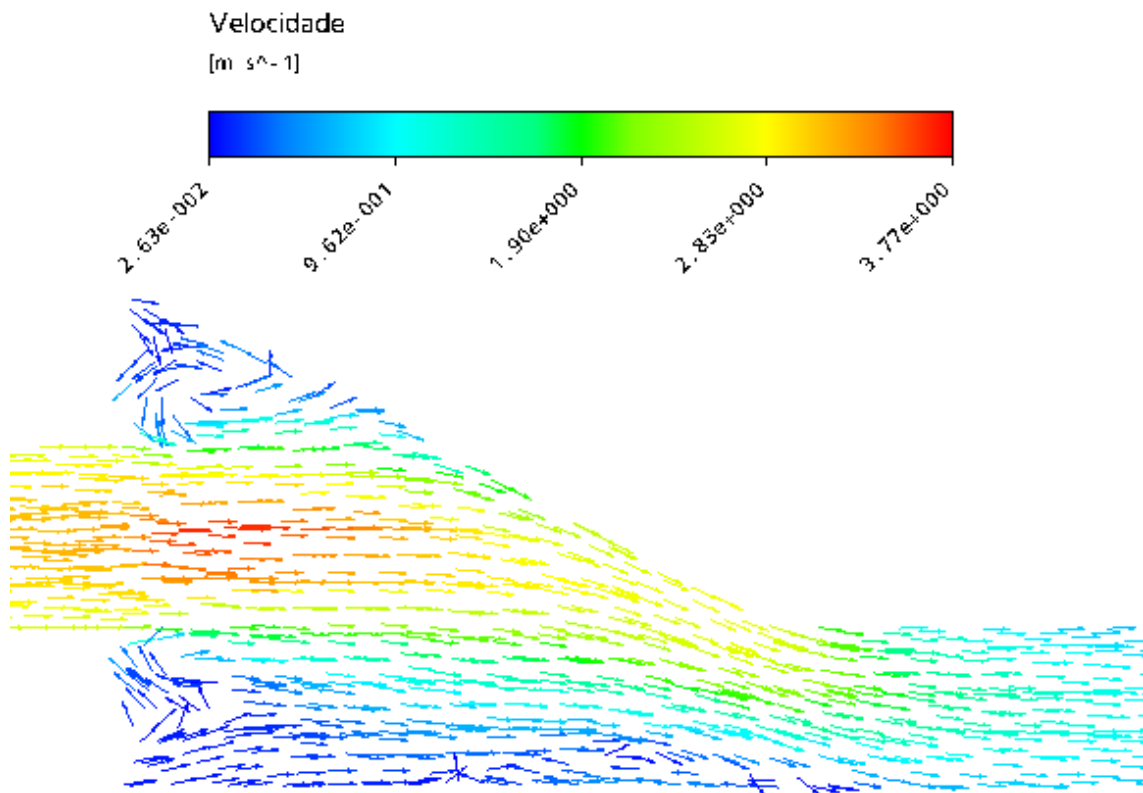
energia cinética da mesma forma que nos casos anteriores, onde o caminho de escoamento é mais aberto. Por fim, na distribuição de velocidades ilustrada na Figura 5.19, a queda na velocidade situa-se ao redor de 68% (de  $4 \text{ m s}^{-1}$  para  $1,3 \text{ m s}^{-1}$ ) até a metade do módulo, aproximadamente, permanecendo ligeiramente constante da metade até a saída, da mesma forma que as outras configurações.

Em processos de separação por membranas o acúmulo de soluto sobre a mesma constitui-se em um problema difícil de ser simulado, que se torna mais grave no caso de geometrias mais complexas, onde este acúmulo pode ser facilitado, como no caso das geometrias estudadas. De forma a verificar se estas geometrias possuem algum efeito no escoamento que possa, porventura, facilitar o acúmulo de soluto em alguma região do módulo, construiu-se os campos vetoriais correspondentes ilustrados nas figuras 5.20 a 5.23. Para fins de melhor visualização, apenas parte do módulo na direção do escoamento está mostrada.

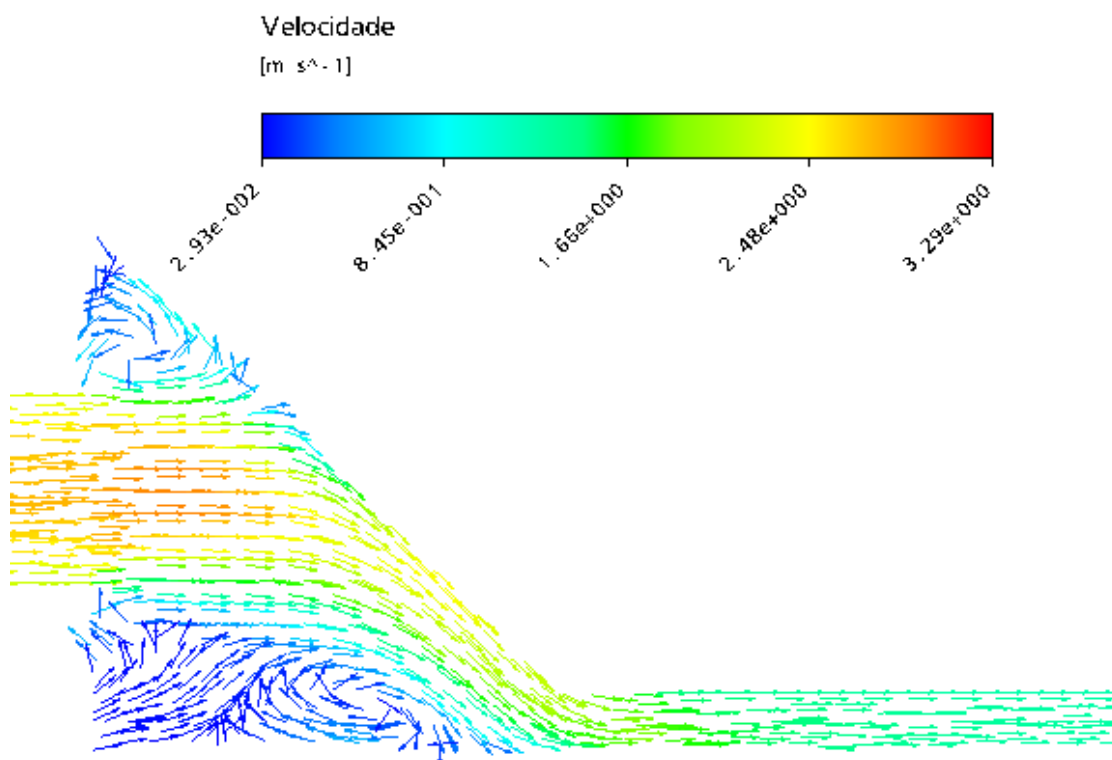


**Figura 5.20:** Campo vetorial para módulo sem barreira à pressão transmembrana de 45,5 kPa.

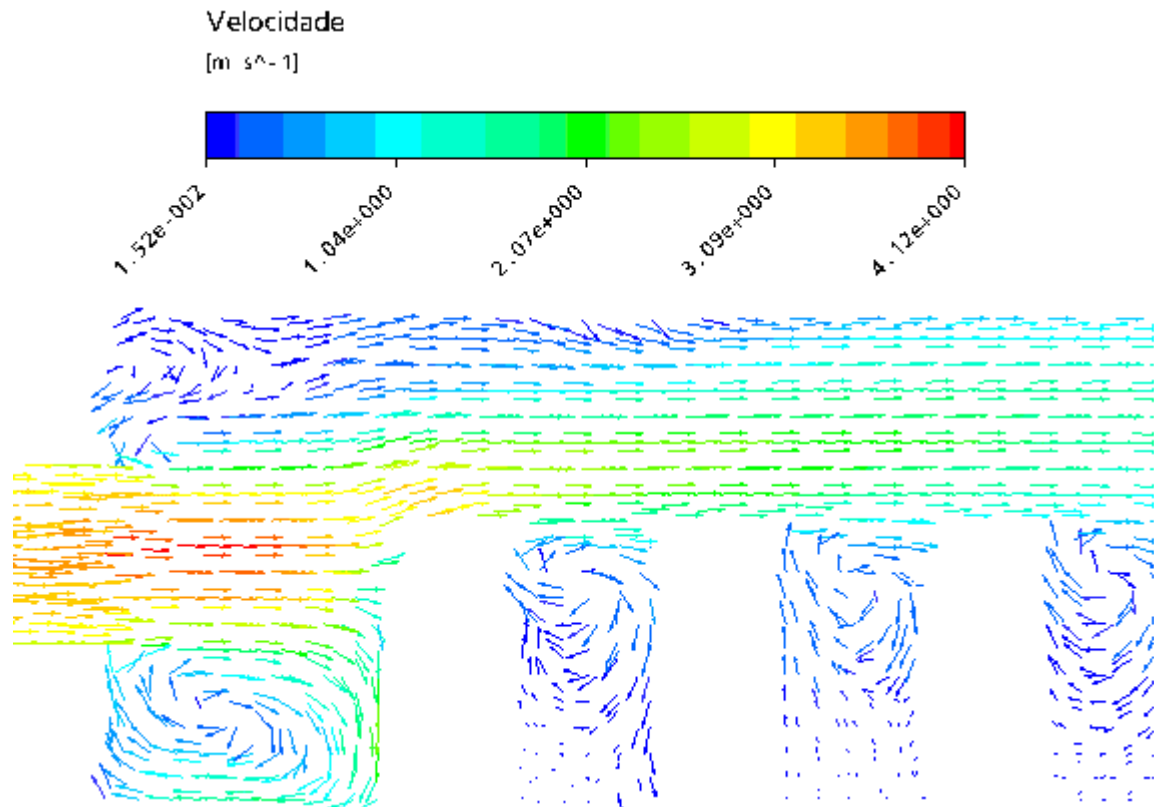




**Figura 5.21:** Campo vetorial para módulo com pequena barreira trapezoidal à pressão transmembrana de 69,75 kPa.



**Figura 5.22:** Campo vetorial para módulo com grande barreira trapezoidal à pressão transmembrana de 44,25 kPa.



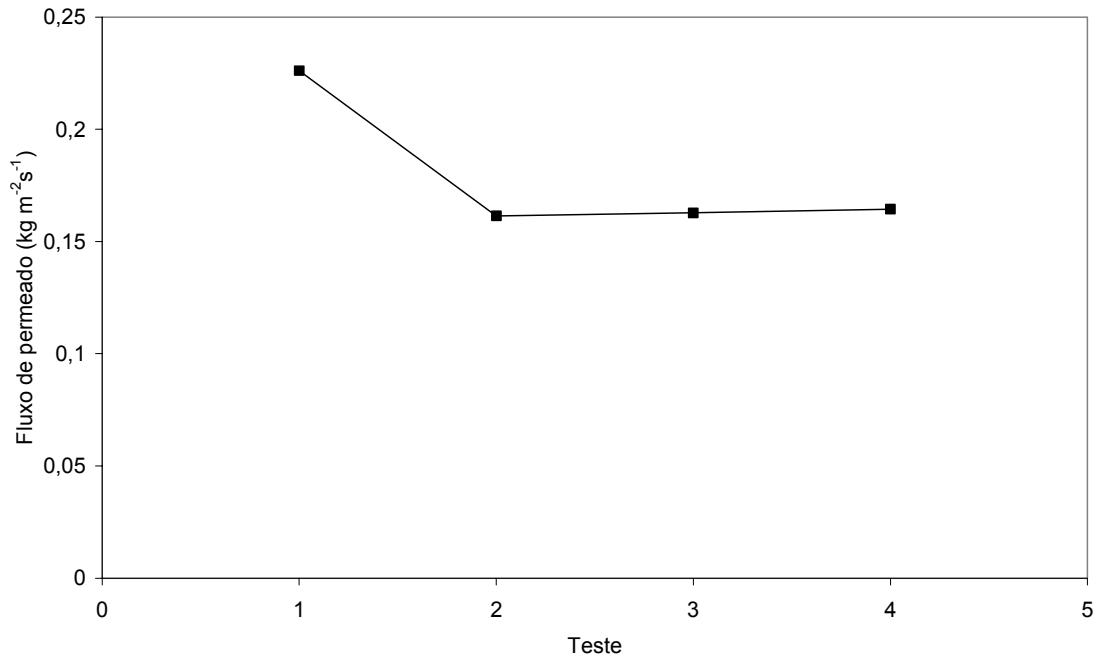
**Figura 5.23:** Campo vetorial para módulo com obstáculos opostos, à pressão transmembrana de 43,75 kPa.

A análise destes campos vetoriais mostra que existe uma pequena tendência para a formação de escoamento reverso levando à formação de vórtices. Este fato mostra-se mais significativo no escoamento representado nas figuras 5.22 e 5.23, onde o resultado da simulação claramente indica uma tendência à recirculação de fluido. Na presença de um soluto, estas regiões da geometria possuem grandes chances de facilitarem o acúmulo de material sobre a membrana, causando uma queda mais acentuada no fluxo de permeado e diminuindo a eficiência do processo de microfiltração. Isto demonstra que a geometria do sistema é um importante parâmetro a ser considerado na escolha de um módulo de membrana.

Na Figura 5.23 verifica-se a presença de recirculação entre as barreiras retangulares opostas, indicando que várias regiões de acúmulo de fluido podem aparecer. Vale lembrar que em PSM é comum o uso de promotores de turbulência de forma a aumentar a transferência de massa local. Somente estudos detalhados, variando-se parâmetros de diferentes geometrias, podem esclarecer quais as configurações de barreira que facilitam a tendência de acúmulo de soluto, e quais as que dificultam a ocorrência deste fenômeno.

## 5.5 Ultrafiltração de soluto macromolecular

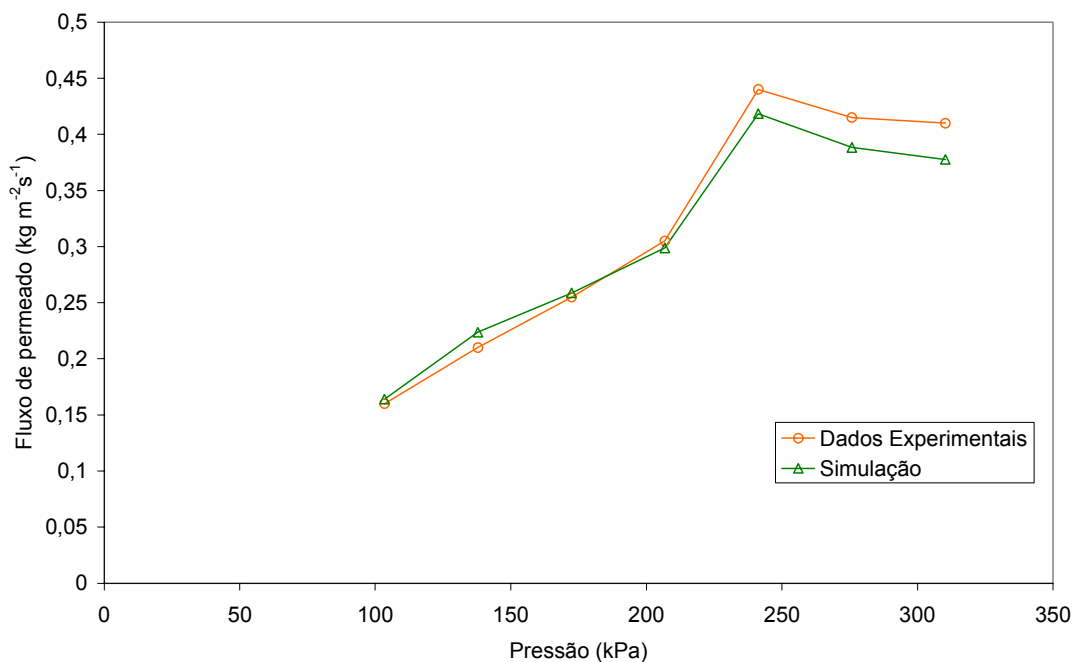
A Figura 5.24 apresenta os resultados do teste de malha para ultrafiltração de BSA. Um número menor de testes foi realizado quando comparado com as outras simulações, pois o fluxo estabilizou-se já nos primeiros testes realizados.



**Figura 5.24:** Fluxo de permeado médio para cada teste de malha

Verifica-se que, a partir do segundo teste, o fluxo permeado permaneceu praticamente constante (uma variação em torno de 0,6% entre o último e o penúltimo valor foi alcançada) de forma que a partir da malha com 36846 tetraedros, o fluxo praticamente não mais era influenciado pela malha, conforme desejado.

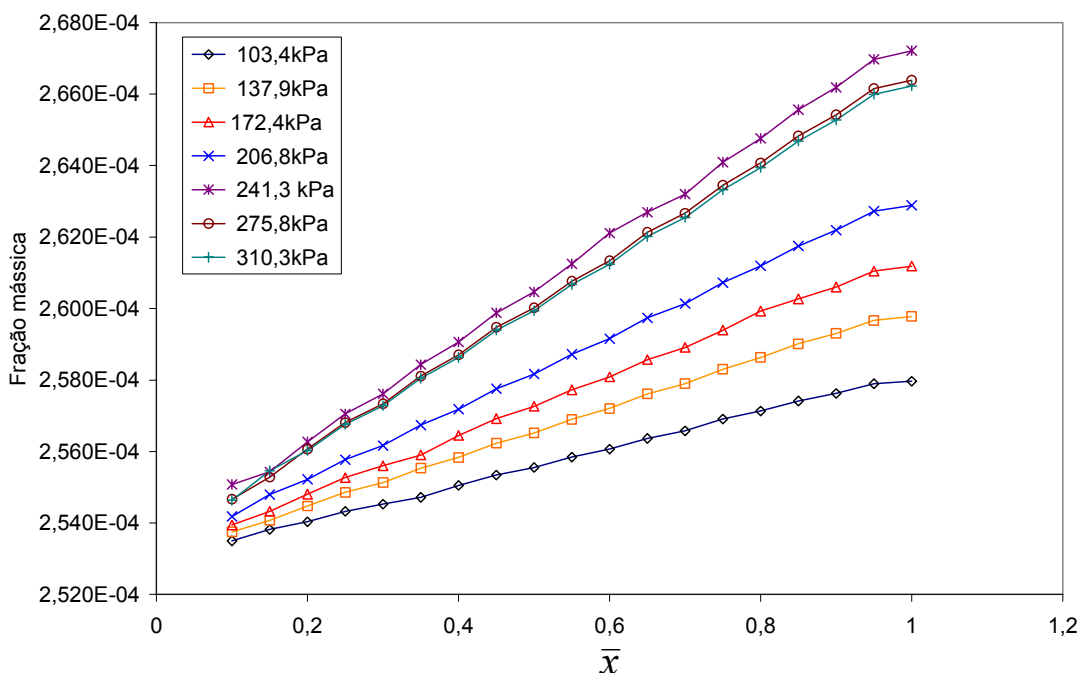
A Figura 5.25 apresenta a comparação dos resultados experimentais obtidos por GARDIOL (2000), com os resultados obtidos pelo CFX, de fluxo permeado *versus* a pressão transmembrana para o processo de ultrafiltração de BSA.



**Figura 5.25:** Fluxo permeado *versus* pressão transmembrana na ultrafiltração tangencial de BSA

O maior valor para a diferença percentual entre simulação e média entre experimentos e réplicas foi quase de 8%, para o último ponto (pressão de 310,3 kPa). A partir da pressão de 206,8 kPa os desvios apresentaram comportamento ascendente, sendo que os dados experimentais foram sempre maiores que os de simulação. Nos três primeiros pontos os dados de simulação foram ligeiramente maiores que os experimentais, todavia, não houve um comportamento constante de crescimento ou decréscimo dos desvios percentuais.

Os dados experimentais da Figura 5.25 indicam a presença de polarização por concentração e/ou *fouling*, uma vez que à medida que a pressão aumenta, os valores de fluxo de permeado apresentam um comportamento aproximadamente assintótico. Isto pode ser confirmado nos resultados de fração mássica *versus* comprimento adimensional para cada pressão transmembrana, ilustrados na Figura 5.26:



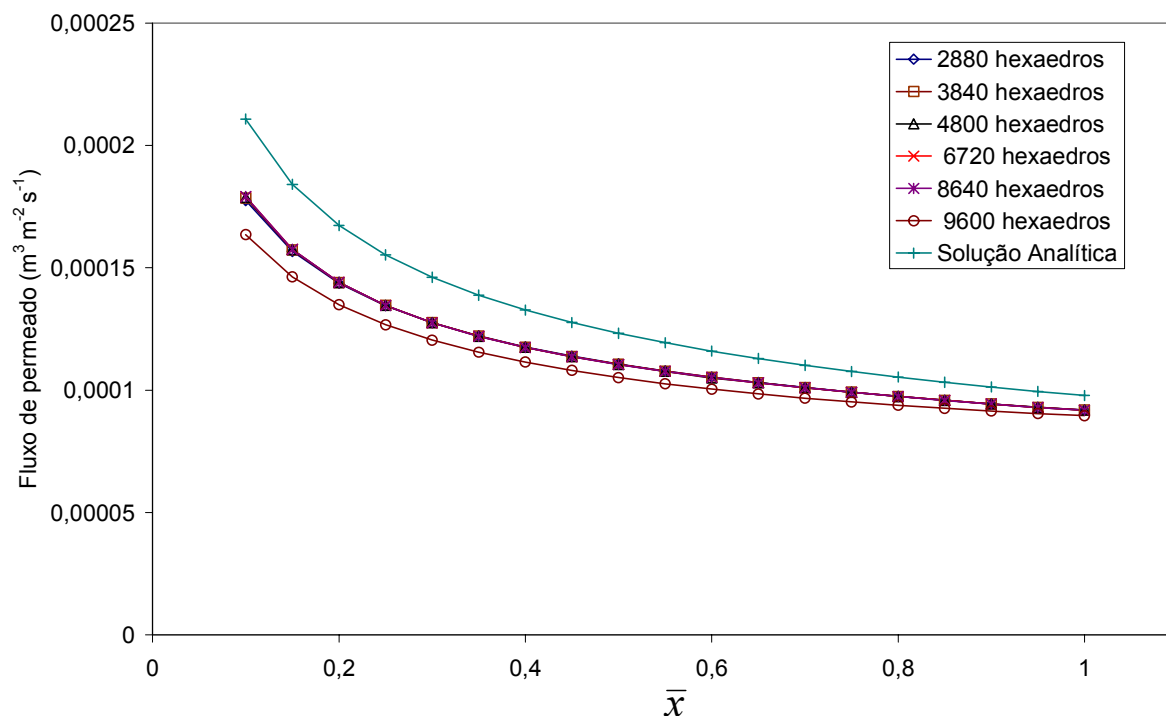
**Figura 5.26:** Perfis de fração mássica de BSA em diferentes pressões transmembrana

Os resultados ilustrados na Figura 5.26 indicam que a fração mássica do soluto macromolecular cresce quanto maior é o comprimento do módulo. Isto está de acordo com o que é esperado pela teoria, pois sabe-se que a diminuição do fluxo de permeado na direção do escoamento é devido ao aumento de concentração de soluto próximo à superfície da membrana, devido à formação da camada limite de concentração. À medida que a pressão aumenta, a concentração de soluto sobre a membrana também aumenta. Nos três últimos valores de pressão, porém, houve um decréscimo muito sutil do perfil de concentrações de BSA, indicando que na pressão de 241,3 kPa um valor máximo de perfil de concentração foi atingido. É a partir deste ponto que o fluxo de permeado começa a diminuir, conforme ilustrado na Figura 5.25, demonstrando-se o efeito que a camada limite polarizada possui de reduzir o fluxo em altos valores de pressões transmembrana.

O CFX não conseguiu reproduzir o comportamento da retenção. Obteve-se um perfil ao longo da membrana, e os valores de retenção média ficaram muito abaixo dos valores experimentais; enquanto os valores de retenção experimentais situaram-se ao redor de 90%, os valores de simulação permaneceram em torno de 30%. Desta forma, a abordagem da colocação de uma taxa de consumo como alternativa ao efeito da retenção da macromolécula pelo meio poroso, discutida no capítulo anterior, não foi adequada. Acredita-se que isto representa uma limitação do simulador, de forma que seriam necessárias outras considerações para simular o comportamento da retenção na membrana. A distribuição de tamanhos de poros na membrana deve ser levada em conta, sendo que no CFX a modelagem de escoamento em meios porosos é realizada considerando-se um único tamanho de poro. Além disto, efeitos de interação entre o soluto e a membrana, efeitos de compactação da mesma, entre outros, deveriam ser previstos pelo modelo numérico. Neste sentido, um trabalho de modelagem em meios porosos foi realizado por MACDONALD (1992), que estudou a difusão macromolecular em meios porosos a partir de distribuições de tamanhos de poros conhecidas, e levando em consideração efeitos como a tortuosidade.

## 5.6 Ultrafiltração e a solução por similaridade

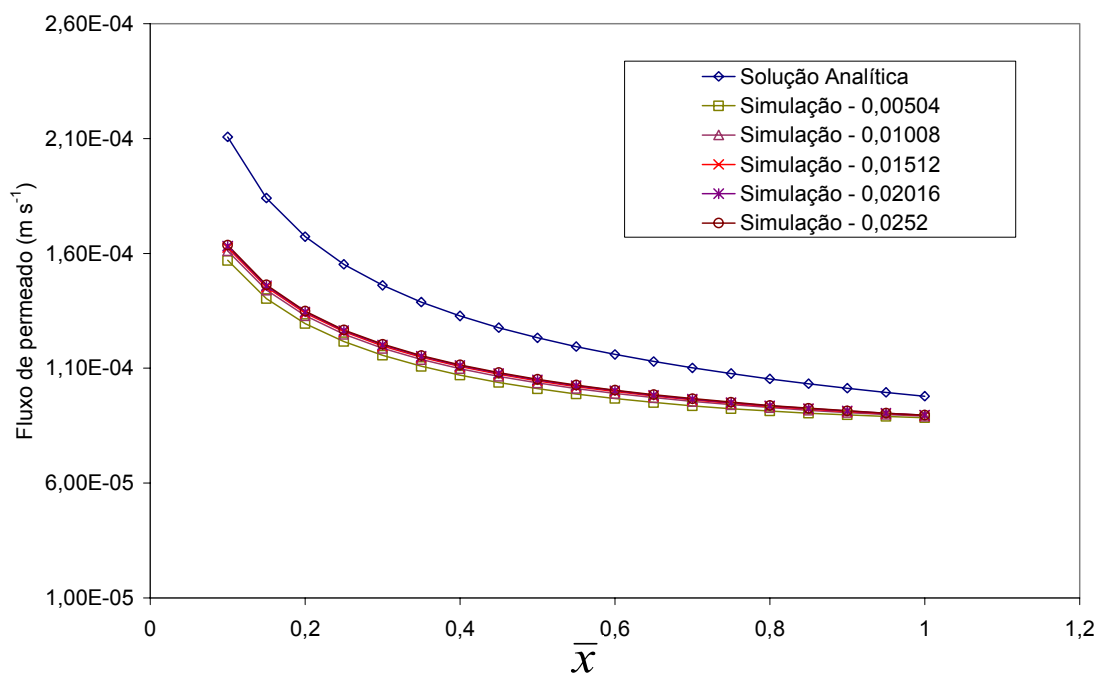
Na Figura 5.27 estão ilustrados os diferentes perfis de fluxo de permeado em função do comprimento adimensional, para cada configuração de malha empregada (Figura 4.10).



**Figura 5.27:** Perfis de fluxo de permeado para cada configuração de malha

Através da Figura 5.27, verifica-se que entre 2880 e 8640 hexaedros praticamente não ocorreu variação nos perfis, independentemente do refino da malha próximo à parede da membrana. Uma diferença levemente mais acentuada verificou-se para a geometria com 9600 hexaedros. Apesar de apresentar mais subdivisões da malha, o perfil ficou um pouco mais distante do perfil analítico, quando comparado com os anteriores. Uma explicação para este fato pode estar na própria malha: o refino próximo à parede ilustrado na Figura 4.10f apresenta espaçamentos iguais, ao contrário dos anteriores onde uma variação gradual no refino foi realizada. A diferença entre o perfil com o maior número de hexaedros e os anteriores é pouco maior que 4%, em média, ao passo que as diferenças percentuais entre as malhas de 2880 a 8640 hexaedros e a solução analítica chegaram a mais de 15%. Isto demonstra que, mesmo naquelas malhas onde um diferente número de subdivisões levou a uma quase independência dos resultados, a grande discrepância entre tais perfis e a solução analítica não se deve justamente às características da malha.

Os resultados das simulações envolvendo sílica como soluto, estão apresentados na Figura 5.28 para diferentes relações entre fração mássica de sílica na superfície da membrana e a fração mássica de sílica na solução *bulk*. Os dados obtidos são de fluxo permeado *versus* comprimento adimensional do canal retangular,  $\bar{x}$  ( $x/L$ , onde  $L$  é o comprimento do canal).

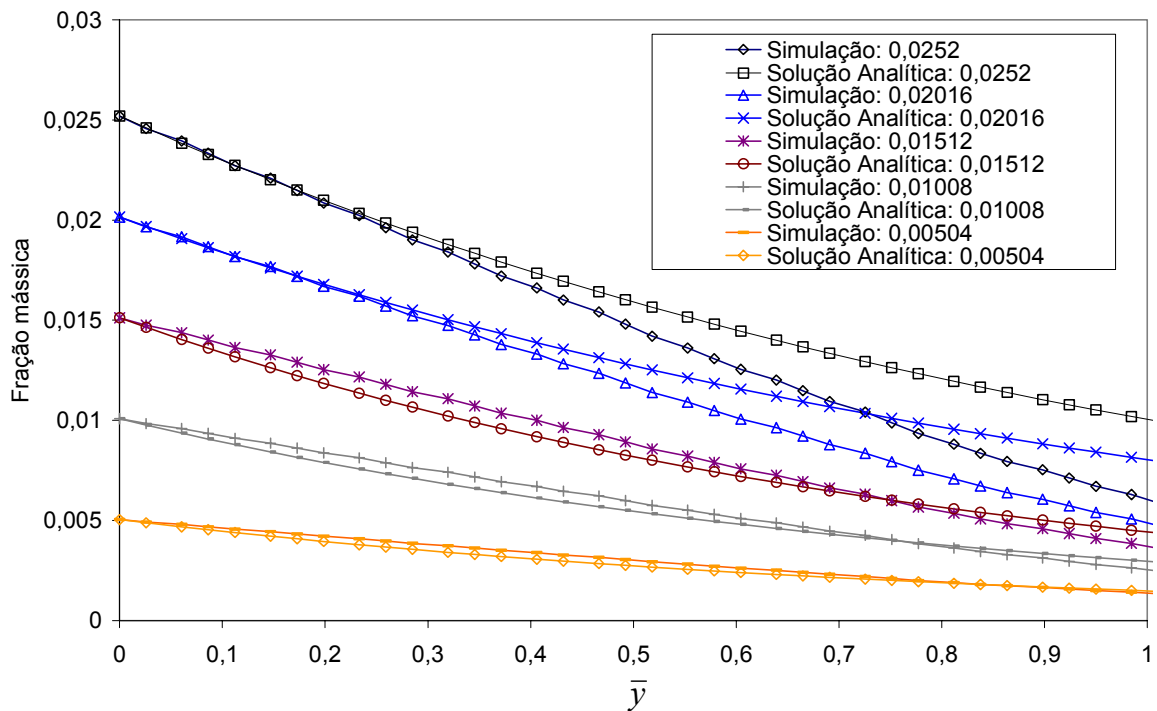


**Figura 5.28:** Perfis de fluxo de permeado para cada fração mássica na membrana

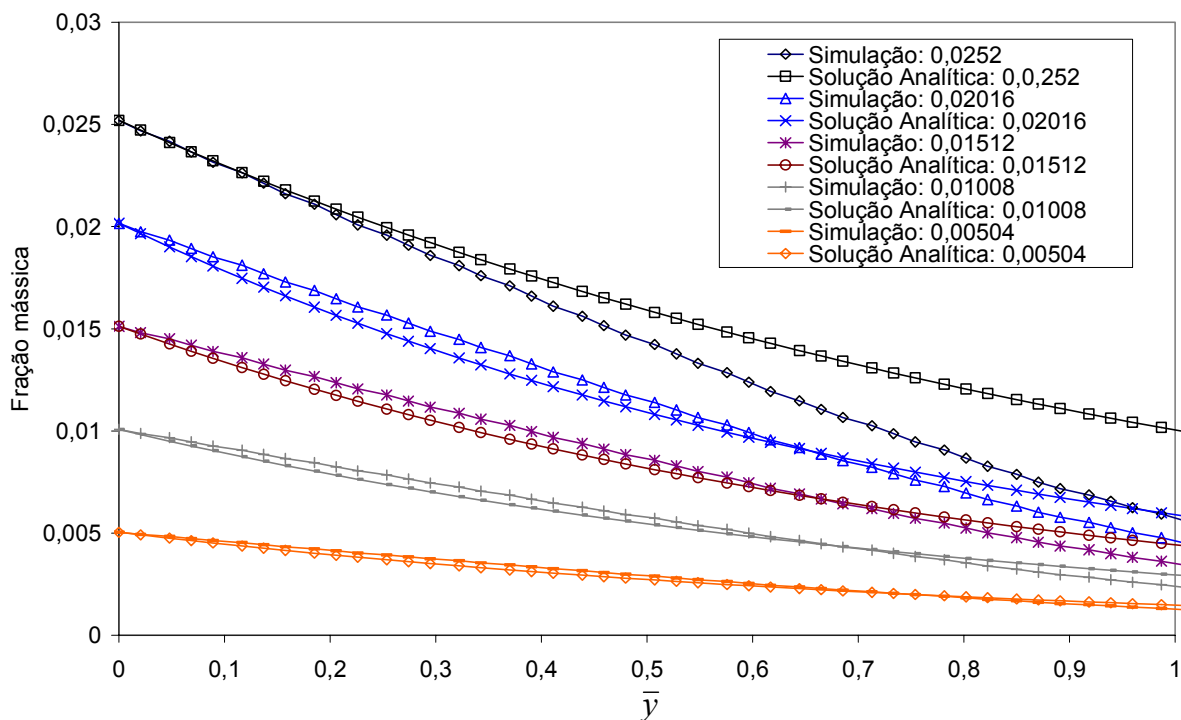
A análise da Figura 5.28 revela que a simulação resultou em um perfil de fluxo local de formato semelhante ao previsto pela solução analítica (Equação (4.29)). Além disto, os perfis obtidos foram praticamente idênticos, independentemente dos valores de frações mássicas de sílica na superfície da membrana; isto demonstra que os dados de simulação foram capazes de reproduzir o comportamento de fluxo de permeado como sendo independente da fração mássica na parede,  $\phi_w$ , da mesma forma que a Equação (4.29), o que é válido para suspensões diluídas. Todavia, os desvios percentuais entre os resultados da simulação e aqueles previstos analiticamente variaram numa faixa de 8 a 30 %, aproximadamente, verificando-se que, quanto mais próximo da entrada do canal, maiores são os desvios. A solução analítica prevê que, à medida que se aumenta o comprimento do canal, o fluxo permeado decresce - devido à formação da camada limite polarizada - e os dados de simulação conseguiram reproduzir este comportamento. À medida que o comprimento do canal tende a zero, o fluxo permeado previsto pela solução analítica tende ao infinito, o que não é possível fisicamente; a presença deste ponto singular pode ser a explicação para os maiores desvios percentuais entre simulação e solução analítica obtidos para menores valores do comprimento do canal. Uma modificação da Equação (4.29), de forma a remover a existência de singularidade no início do canal, seria uma alternativa para a comparação com dados da simulação. Isto poderia ser feito pela troca da variável  $x$  por uma variável  $x + \delta$ , sendo  $\delta \sim 0$ , no denominador da Equação (4.29). Esta mudança, além de remover a singularidade em  $x = 0$ , promoveria a diminuição dos valores dos perfis de fluxo permeado apresentado na Figura 5.28, aproximando-os da solução numérica. Além disto, os testes de malha confirmam que o aumento do desvio entre o perfil do CFX e aquele da solução analítica não está ligado diretamente às características da malha.

As figuras 5.29 e 5.30 apresentam os perfis de fração mássica em função da distância adimensional  $\bar{y}$ , em duas posições axiais (na metade ( $x = 5,75\text{cm}$ ) e na saída ( $x=11,5\text{cm}$ ) do

canal de escoamento, respectivamente) para diferentes frações mássicas na superfície da membrana ( $\phi_w$ ). Na legenda destas figuras estão indicados os valores das frações mássicas na membrana utilizadas: 20, 40, 60, 80 e 100 vezes o valor da alimentação.



**Figura 5.29:** Perfis de fração mássica na metade do canal retangular



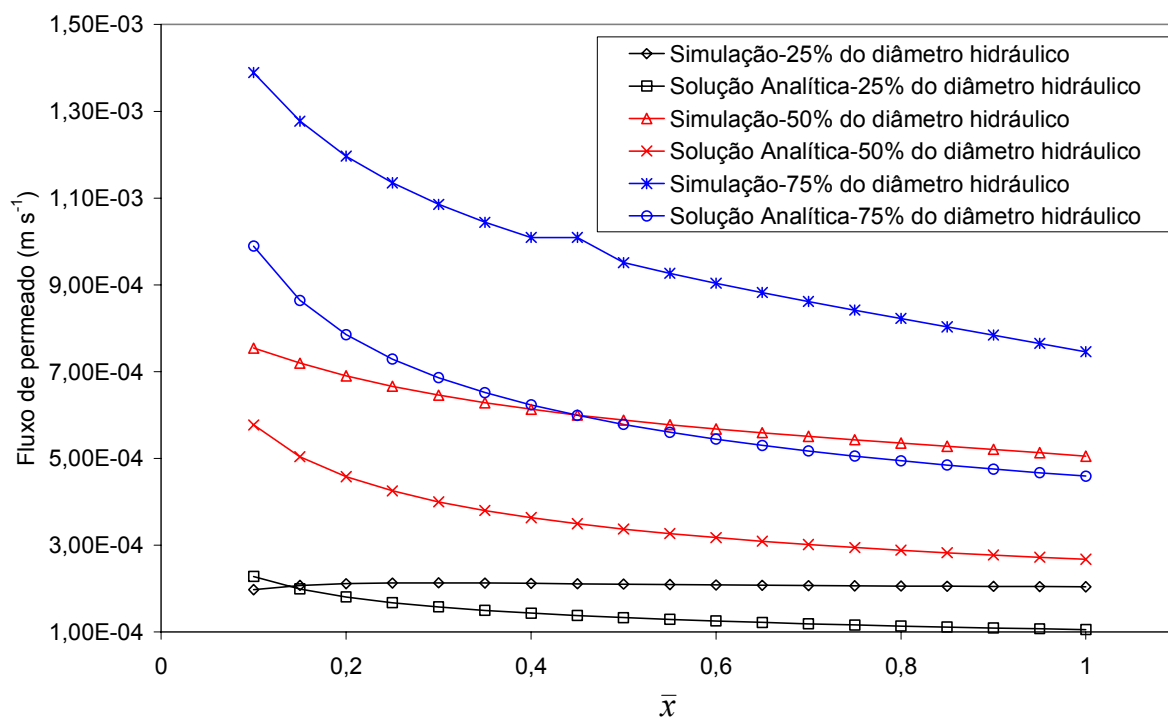
**Figura 5.30:** Perfis de fração mássica na saída do canal retangular



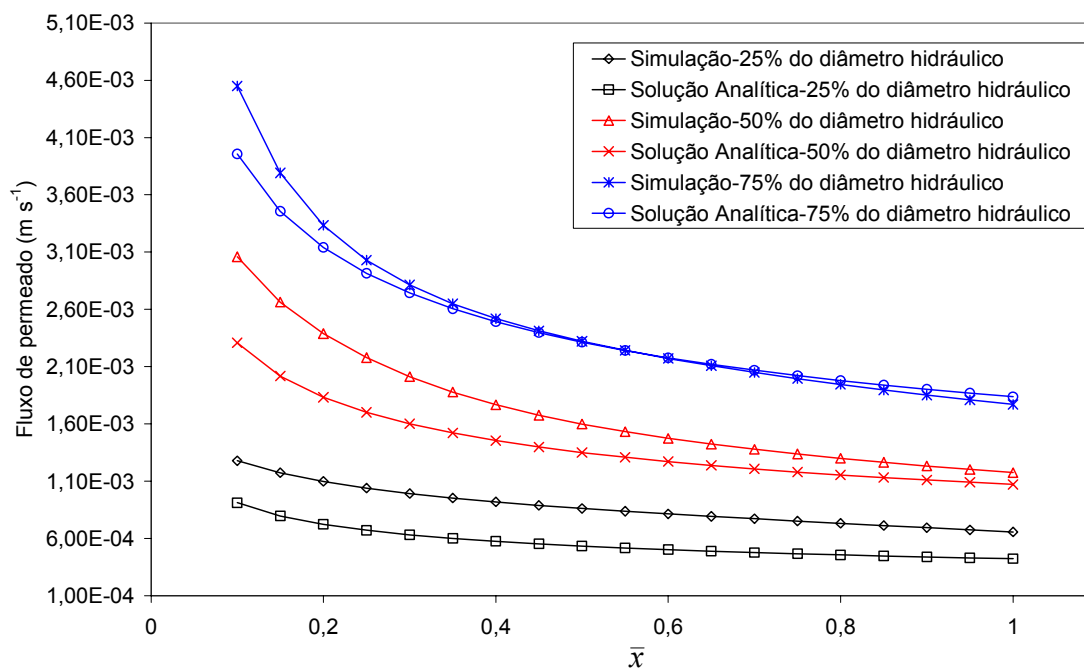
Para a maioria das concentrações, o simulador descreve bem o perfil de frações mássicas, fornecendo desvios em relação ao resultado analítico da ordem de 0,02 % a 10%, tanto para o perfil na metade quanto na saída do canal retangular. Todavia, estes valores de desvio somente são verificados quando  $\bar{y} > 0,5$ , sobretudo para as situações onde a fração mássica na membrana é maior. Quando a fração mássica na membrana é 100 vezes o valor do escoamento *bulk* (0,0252), verifica-se que os desvios aumentam rapidamente a partir do valor de  $\bar{y}=0,5$ , alcançando até 40 %, aproximadamente. A partir de valores de fração mássica na membrana iguais a 60 vezes o valor *bulk* (0,01512), os desvios aumentam de forma menos acentuada com o aumento de  $\bar{y}$ , alcançando valores da ordem de 17,5 %, 15,2 % e 8,5 % para as frações mássicas iguais a 0,01512, 0,01008 e 0,00504, na metade do canal, respectivamente, e valores da ordem de 21,5 %, 19,5 % e 13,8 % para as frações mássicas iguais a 0,01512, 0,01008 e 0,00504, na saída do canal, respectivamente.

Os valores de fração mássica gerados pelo simulador tendem a se comportar de uma forma mais linear do que o previsto pela Equação (4.37). Isto está de acordo com os resultados obtidos por ROMERO e DAVIS (1988) para difusividade e viscosidade variáveis e frações volumétricas na membrana até 0,5, os quais, por sua vez, concordam com aqueles obtidos por DAVIS e LEIGHTON (1987). Tais resultados demonstram que, mesmo para propriedades variáveis, o perfil se aproxima do comportamento linear para baixas concentrações de soluto, tanto na alimentação como na membrana. Finalmente, também é possível verificar que os perfis obtidos na metade e na saída do canal são muito semelhantes entre si, de maneira que é razoável admitir a inexistência de efeitos de difusão axial.

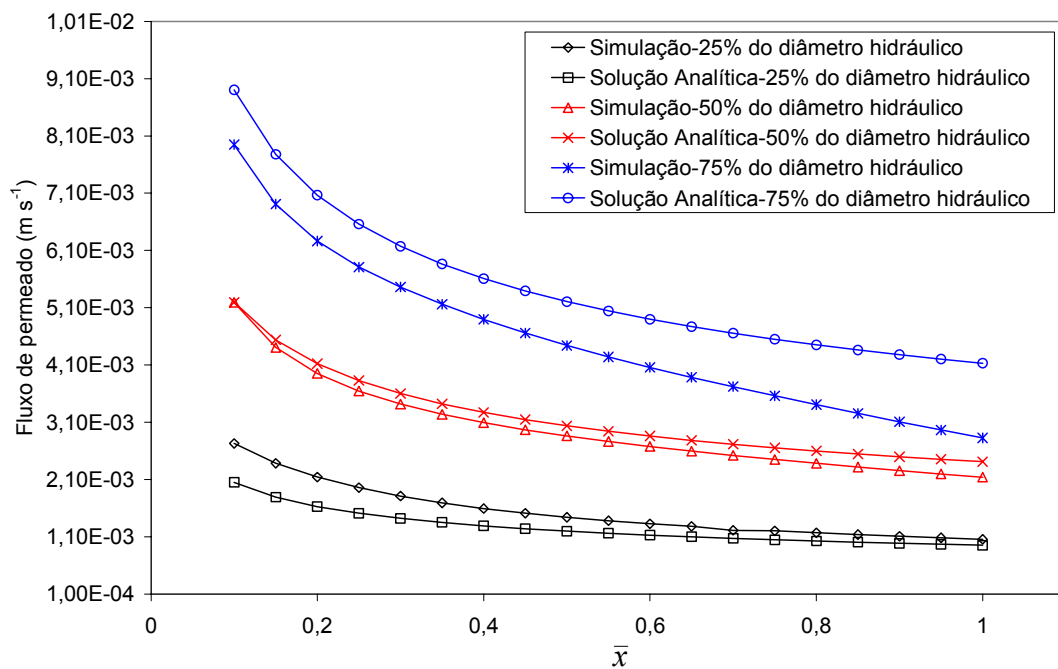
Os resultados do estudo do efeito da correção do coeficiente de difusão para a ultrafiltração de BSA, conforme discutido no capítulo anterior, são apresentados nas figuras 5.31 a 5.35. As simulações foram avaliadas da seguinte forma: primeiramente, compararam-se os valores de fluxo permeado local com aqueles obtidos da Equação (4.46); posteriormente, o valor médio no comprimento foi comparado para diferentes intensidades e escalas de turbulência, para cada valor de fração mássica na membrana. As figuras 5.31 a 5.35 apresentam os perfis de fluxo permeado local obtidos nas simulações, em função do comprimento adimensional do canal, comparados com o perfil analítico. Escalas de turbulência na faixa de 25, 50 e 75% do diâmetro hidráulico ( $1,22 \cdot 10^{-4}$  m,  $2,45 \cdot 10^{-4}$  m e  $3,67 \cdot 10^{-4}$  m, respectivamente) foram testadas, juntamente com intensidades turbulentas de 0,1, 0,2, 0,3, 0,4 e 0,5%.



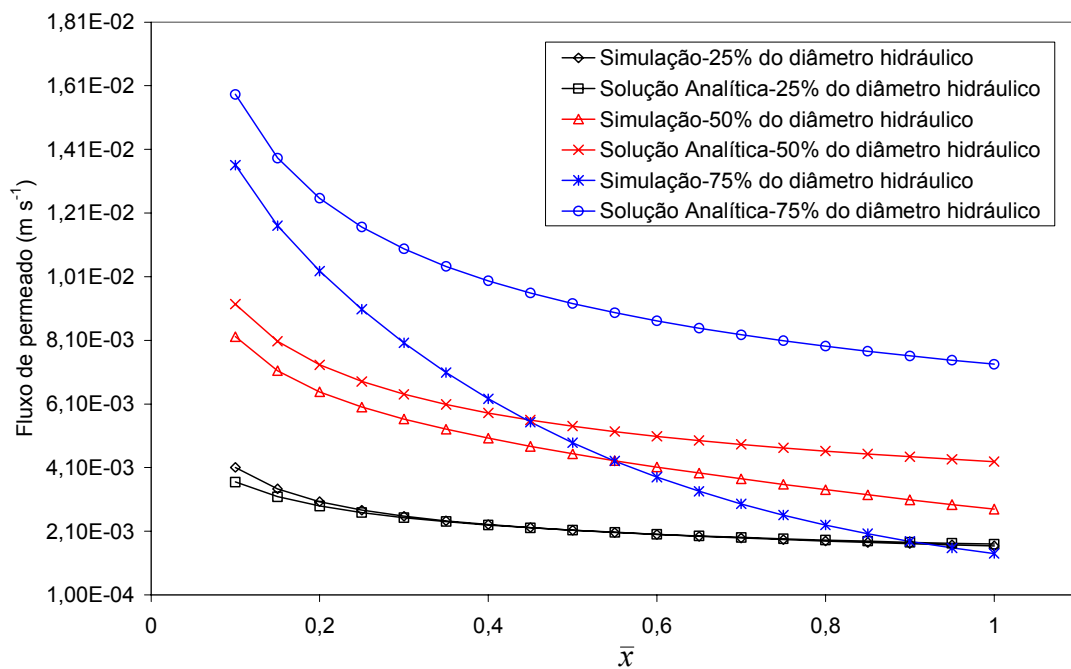
**Figura 5.31:** Fluxo permeado *versus* comprimento adimensional do canal para cada escala de turbulência, na intensidade turbulenta de 0,1%.



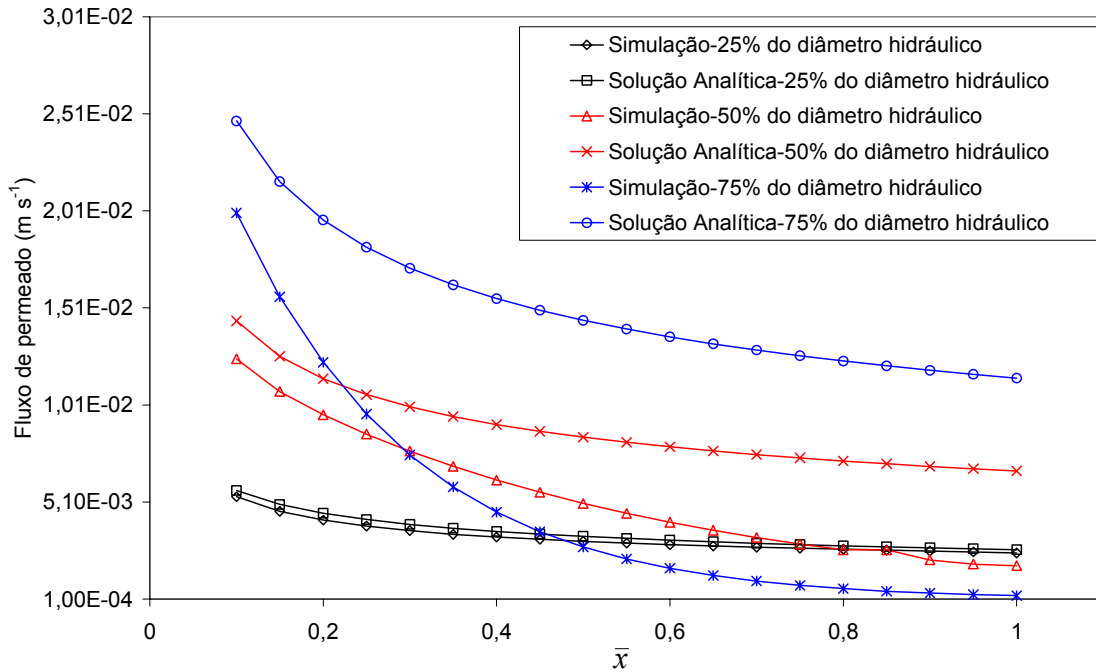
**Figura 5.32:** Fluxo permeado *versus* comprimento adimensional do canal para cada escala de turbulência, na intensidade turbulenta de 0,2%.



**Figura 5.33:** Fluxo permeado *versus* comprimento adimensional do canal para cada escala de turbulência, na intensidade turbulenta de 0,3%.



**Figura 5.34:** Fluxo permeado *versus* comprimento adimensional do canal para cada escala de turbulência, na intensidade turbulenta de 0,4%.



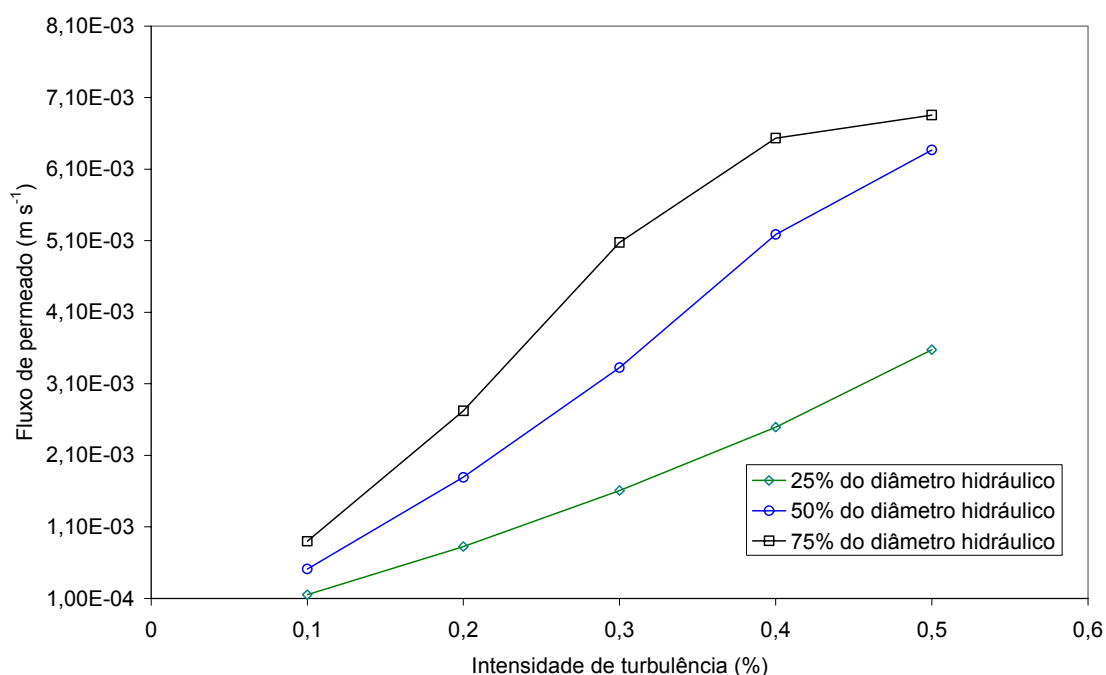
**Figura 5.35:** Fluxo permeado *versus* comprimento adimensional do canal para cada escala de turbulência, na intensidade turbulenta de 0,5%.

As figuras 5.31 a 5.35 mostram que não existe um comportamento único para as diferentes condições testadas, uma vez que, para algumas escalas de turbulência, um aumento na intensidade turbulenta resulta em uma melhor comparação entre a simulação e os resultados analíticos e para outras não se observa a mesma tendência. Para a escala de turbulência calculada para 25 % do diâmetro hidráulico, à medida que se aumenta a intensidade turbulenta aumenta a concordância entre os resultados; para a escala de turbulência calculada para 75 % do diâmetro hidráulico tem-se um comparação boa apenas para a intensidade turbulenta de 0,2 %. Ainda, percebe-se que não existe um valor de intensidade turbulenta ótimo para os três casos testados; para a escala de turbulência calculada para 25 % do diâmetro hidráulico tem-se a melhor comparação para as intensidades turbulentas de 0,4 e 0,5 %. Para a escala de turbulência correspondente a 50 % do diâmetro hidráulico tem-se a melhor comparação para a intensidade turbulenta de 0,3 %. Finalmente, para a escala de turbulência com 75 % do diâmetro hidráulico tem-se a melhor comparação para a intensidade turbulenta de 0,2 %.

A fim de verificar a influência de diferentes valores de fração mássica na membrana sobre o comportamento do fluxo permeado, para diferentes valores de intensidade ou escala turbulenta, foram simulados casos nos quais  $\phi_w$  foi considerado igual a 20, 40, 60, 80 e 100 vezes a fração mássica *bulk*,  $\phi_B$ . Plotaram-se os valores do fluxo permeado médio em função da intensidade de turbulência tendo como parâmetro de curva os três valores da escala de turbulência testados (25, 50 e 75 % do diâmetro hidráulico) para cada uma das razões entre  $\phi_w$  e  $\phi_B$ . Como os gráficos apresentaram o mesmo comportamento, optou-se por apresentar apenas o gráfico para a situação com  $\phi_w = 20\phi_B$ , mostrado na Figura 5.36.

A independência do fluxo permeado médio com a fração mássica na superfície da membrana, está de acordo com o previsto pela Equação (4.46), para a qual o fluxo depende

apenas da concentração de alimentação. Este fato é uma consequência direta de se estar trabalhando com suspensões diluídas, onde a dependência das propriedades físicas do sistema (viscosidade e difusividade) com a concentração de soluto é assumida como sendo constante. A solução numérica da Equação (4.32) realizada por DAVIS e SHERWOOD (1990) considera que as variáveis difusividade e viscosidade adimensionais variem com  $\phi$ ; provavelmente, tal consideração levaria a resultados diferentes dos obtidos uma vez que tais propriedades variam na camada limite polarizada de concentração. A escolha da escala para capturar tais variações, bem como os aspectos relativos à construção da malha, seria uma tarefa mais complexa, pois escalas próximas à ordem de grandeza molecular seriam necessárias para a resolução completa dos efeitos da camada limite.

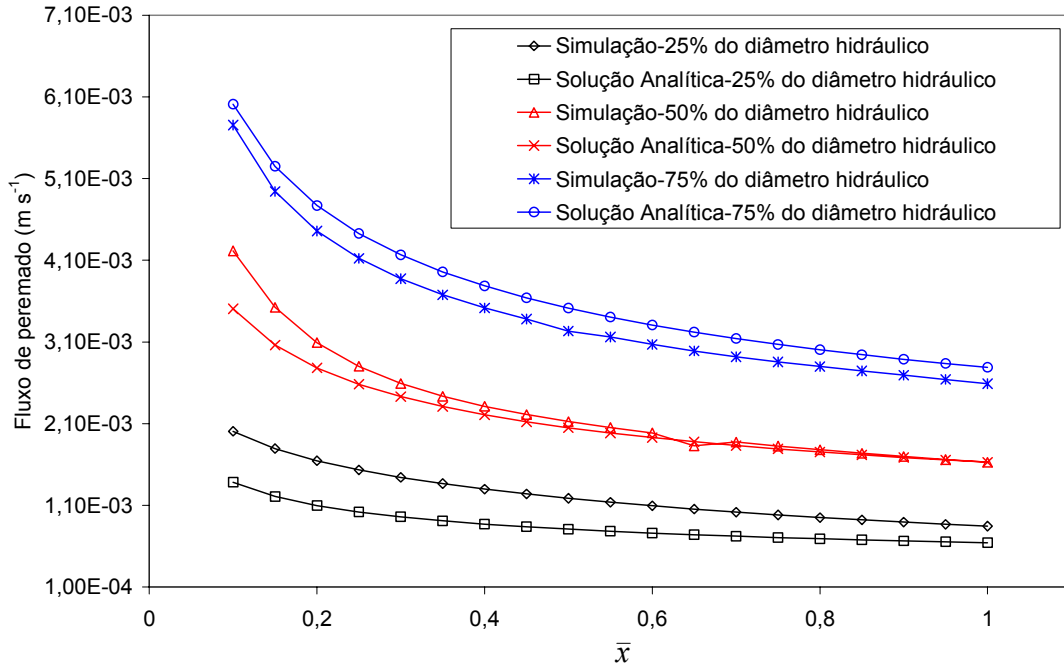


**Figura 5.36:** Fluxo permeado *versus* intensidade turbulenta para diferentes escalas, com  $\phi_w = 20\phi_B$

Com relação aos resultados do fluxo permeado em função da intensidade e da escala de turbulência, a análise da Figura 5.36 mostra que a forma como o fluxo varia em função da intensidade turbulenta é diferente para cada escala. Na escala de 25% a variação do fluxo é a menos acentuada ao passo que, na escala de 75%, esta variação é mais brusca, o que resulta em maior discordância entre o resultado simulado e o analítico.

Além disto, observa-se que o fluxo permeado aumenta tanto com a intensidade quanto com a escala de turbulência; este resultado é esperado, pois o aumento do coeficiente de difusão no escoamento turbulento promove a remoção de soluto da superfície da membrana, promovendo a contradifusão deste para o seio da suspensão, facilitando, assim, a passagem de solvente através da membrana. Isto comprova o fato de que os fenômenos turbulentos são altamente dissipativos; as partículas movimentam-se rapidamente, entrando em contato com outras partículas de forma dinâmica, aumentando os gradientes dos potenciais associados a elas (gradientes de concentração) e acelerando o fenômeno de difusão molecular.

Como foi observado que entre as intensidades de 0,2 e 0,3% tem-se uma boa concordância para as três faixas de escala de turbulência testadas, realizou-se simulações para a intensidade de 0,25%, usando uma fração mássica na membrana de 0,0252 ( $\phi_w = 100\phi_B$ ). Os resultados estão apresentados na Figura 5.37.



**Figura 5.37:** Fluxo permeado *versus* comprimento adimensional do canal para cada escala de turbulência, na intensidade turbulenta de 0,25%.

A análise da Figura 5.37 indica que a comparação entre a simulação e a solução analítica é bastante boa para os três primeiros casos de escalas de turbulência, indicando que, provavelmente, esta escala seja a mais próxima da situação real. Vale ressaltar que, à medida que se diminui o valor da escala turbulenta, a escala empregada nas simulações aproxima-se da ordem de grandeza das escalas moleculares, o que requer o uso de malhas mais densas. Se a tendência apresentada pela Figura 5.36 estiver correta, então o fluxo permeado se torna independente das escalas de turbulência, à medida que estas se tornam menores. Uma provável explicação para a maior escala de turbulência sofrer uma variação mais brusca em função da intensidade turbulenta pode ser dada pela análise da Equação (4.42), onde tem-se que a difusividade efetiva é diretamente proporcional ao quadrado da escala de tempo turbulenta ( $L_T/U$ ). Assim, um aumento de  $L_T$  acarreta um aumento na difusividade efetiva (e, por conseguinte, na difusividade corrigida, Equação (4.41)) de maneira quadrática. Pela Equação (4.46), o fluxo permeado é proporcional à difusividade corrigida elevada à potência  $2/3$  e, portanto, proporcional à escala de tempo turbulenta por um fator de  $4/3$ . Analisando apenas a Equação (4.46), a dependência do fluxo permeado com a escala de tempo turbulenta não é muito brusca (proporcional a aproximadamente 1,33). No entanto, o fluxo calculado pelo simulador é aquele expresso pela Equação (4.31), onde  $D$  é a difusividade corrigida. A substituição das equações (4.42) e (4.41) na Equação (4.31) demonstra que o fluxo permeado em  $y=0$  é proporcional ao quadrado da escala de turbulência, o que pode explicar a alta dependência do fluxo permeado com esta escala.

## Capítulo 6

# Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

O objetivo deste trabalho foi a simulação numérica de alguns estudos de caso de processos de separação com membranas, através do uso do simulador CFX. Foram escolhidos os processos de micro e ultrafiltração, por existirem muitos trabalhos experimentais e teóricos nestas áreas, podendo-se comparar os resultados de simulação com aqueles obtidos da literatura.

A fim de atingir este objetivo, inicialmente foram simulados dois problemas conhecidos de escoamento e transferência de massa comparando-se com as respectivas soluções analíticas. Na seqüência, foram simulados os casos para os quais foi feita uma comparação com modelos utilizados para a previsão teórica do fluxo permeado.

A experimentação numérica tem crescido rapidamente nos últimos anos, de forma que muitos fenômenos estão sendo compreendidos antes mesmo de qualquer experimento ser realizado. Neste contexto, uma das grandes aplicações da tecnologia CFD é a previsão e o entendimento de fenômenos onde experimentos são mais difíceis de serem realizados, devido a questões técnicas ou econômicas.

As conclusões obtidas no desenvolvimento deste trabalho são:

- problemas simplificados de escoamento e transferência de massa podem ser simulados pelo CFX de forma que os resultados se assemelham muito àqueles previstos pelas soluções analíticas e/ou numéricas conhecidas;

- a simulação fluidodinâmica de sistemas de micro e ultrafiltração é capaz de prever o fluxo permeado em função da pressão transmembrana; mas a condição de contorno na interface módulo-membrana é um parâmetro que influencia sobremaneira os resultados;
- os efeitos relativos à presença de vórtices e recirculação local são previstos para diferentes tipos de configurações de módulo de membranas (RAHIMI *et al.* (2005)), mostrando-se como um efeito importante a ser considerado no projeto de tais equipamentos; da mesma forma, o fluxo permeado resultante independe do tipo de geometria usada para a construção do módulo;
- os desvios entre os resultados de simulação e experimentais dependem da pressão transmembrana aplicada, independente do tipo de processo estudado; esta característica pode estar relacionada ao fato de se aplicar o mesmo valor médio de intensidade turbulenta na entrada do canal de escoamento para os diferentes valores de pressão;
- simulações que tentam reproduzir o efeito da retenção de soluto pela membrana necessitam de um estudo mais profundo, relativo principalmente aos detalhes da distribuição de tamanhos de poros e da estrutura porosa da membrana, bem como de possíveis forças adicionais de interação soluto-membrana; a abordagem de consumo de soluto na mesma não se mostrou adequada para reproduzir uma retenção média próxima aos valores experimentais;
- a comparação dos resultados obtidos via simulação com aqueles provenientes da solução por similaridade obtidos por DAVIS e SHERWOOD (1990) apresentam comportamento semelhante: fluxo permeado decrescente com o aumento do comprimento do canal; todavia, as diferenças percentuais aumentam à medida que o comprimento do canal tende a zero, o que pode ser uma conseqüência da comparação de um resultado numérico com um perfil que se aproxima da singularidade no início do canal;
- modificações no perfil de fluxo permeado obtido por DAVIS e SHERWOOD (1990) de forma a corrigir o coeficiente de difusão de solutos macromoleculares se mostraram dependentes da intensidade turbulenta e, principalmente, da escala de turbulência usada, obtendo-se valores de fluxo que aumentam à medida que ambas crescem. Isto concorda com o fato de que a turbulência aumenta o coeficiente de difusão e promove uma melhor mistura do soluto na suspensão, facilitando a passagem de solvente pela membrana; entretanto, os desvios entre simulação e solução analítica modificada são muito sensíveis aos parâmetros de turbulência, parecendo indicar uma região de maior concordância entre ambas as previsões nas intensidades turbulentas testadas;

Face aos resultados obtidos e às conclusões apresentadas, propõe-se algumas sugestões a serem desenvolvidas em trabalhos futuros:

- realização de simulações de processos transientes;
- realização de simulações de outros tipos de geometrias usadas na micro e ultrafiltração, bem como estudos de outros processos de separação com membranas (pervaporação, permeação de gases, osmose inversa, etc.);



- 
- estudos comparando-se diferentes modelos de turbulência para um mesmo sistema;
  - estudos para estimativa de intensidade de turbulência na seção de entrada do canal de escoamento em função da pressão, de forma a minimizar os desvios entre simulação e experimento;
  - abordagem ligando a modelagem de escoamento em meios porosos utilizada pelo CFX (Lei de Darcy) juntamente com o sistema formado pelas equações governantes mediante a aplicação da condição de contorno de retenção total;
  - simulações de compactação de membranas, já que o CFX permite que se trabalhe com deformação de malha;
  - aplicação de novas abordagens para a simulação da retenção de partículas, levando-se em consideração a interação entre estas e a membrana através de modelos de adesão na parede;
  - simulação de problemas que envolvam variação da viscosidade e da difusividade com a concentração;
  - modificação da solução de DAVIS e SHERWOOD (1990) de forma a remover a singularidade da solução no início do canal de escoamento e comparando-se com os resultados de simulação;
  - investigação de maneira mais ampla como as escalas e intensidades turbulentas influenciam nos perfis de fluxo permeado local;
  - comparação dos resultados de simulação e de solução analítica com experimentos que visam medir o fluxo permeado local, juntamente com as duas propostas imediatamente anteriores;
  - realização de simulações envolvendo reatores com membranas.

## Capítulo 7

### Bibliografía

ANSYS ® CFX 10.0 MANUAL

BAKER, R.W.; CUSSLER, E.L.; EYKAMP, W.; KOROS, W.J.; RILEY, R.L.; STRATHMANN, H. *Membrane Separation Systems – Recent Developments and Future Directions*, Noyes Data Corporation, 1991.

BELLARA, S.R.; CUI, Z. A Maxwell-Stefan approach to modelling the cross-flow ultrafiltration of protein solutions in tubular membranes. **Chemical Engineering Science**, v.53, p.2153-2166, 1998.

BIRD, R.B.; STEWART, W.E.; LIGHTFOOT, E.N. *Transport Phenomena*. New York, John Wiley, 1960.

BOUCHARD, C.R.; CARREAU, P.J.; MTSUURA, T., SOURIRAJAN, S. Modeling of ultrafiltration: predictions of concentration polarization effects. **Journal of Membrane Science**, v. 97, p. 215-229, 1994.

BOWEN, W.R.; CAO, X. Electrokinetics effects in membrane pores and the determination of zeta-potential. **Journal of Membrane Science**, v. 140, p. 267-273, 1998.

BOWEN, W.R.; JENNER, F. Theoretical descriptions of membrane filtration of colloids and fine particles: an assessment and review. **Advances in Colloid and Interface Science**, v. 56, p. 141-200, 1995.

CAO, Z.; WILEY, D.E.; FANE, A.G. CFD simulations of net-type turbulence promoters in a narrow channel. **Journal of Membrane Science**, v.185, p.157-176, 2001.

CHENG, T.; WU, J. Modified boundary layer resistance model for membrane ultrafiltration. **Tamkang Journal of Science and Engineering**, v. 4, p. 111-117, 2001.

COSTA, A.R.; FANE, A.G.; WILEY, D.E. Spacer characterization and pressure drop modelling in spacer-filled channels for ultrafiltration. **Journal of Membrane Science**, v. 87, p. 79-98, 1994.

DAVIS, R.H.; LEIGHTON, D.T. Shear-induced transport of a particle layer along a porous wall. **Chemical Engineering Science**, v. 42, p. 275-281, 1987.

DAVIS, R.H.; SHERWOOD, J.D. A similarity solution for steady-state crossflow microfiltration. **Chemical Engineering Science**, v. 45, p. 3203-3209, 1990.

FLETCHER, D.F.; WILEY, D.E. A computational fluid dynamics study of buoyancy effects in reverse osmosis. **Journal of Membrane Science**, v. 245, p. 175-181, 2004.

FONTES, R.S. Mass transfer in microfiltration with laminar and turbulent flow of macromolecular solutions. **Journal of Membrane Science**, v. 249, p. 207-211, 2005.

GARDIOL, M.K.J. Estudo da Influência de Parâmetros Operacionais em Membranas no Processo de Ultrafiltração de Solutos Macomoleculares. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. Porto Alegre, 2000.

FREIRE, A.P.S.; MENUT, P.P.M.; SU, J. *Turbulência*. Rio de Janeiro, ABCM, 2002.

GEKAS, V.; HALLSTRÖM, B. Mass Transfer in the membrane concentration polarization layer under turbulent cross flow – Critical literature review and adaptation of existing sherwood correlations to membrane operations. **Journal of Membrane Science**, v. 30, p. 153-170, 1987.

GEKAS, V.; AIMAR, P.; LAFAILLE J.; SANCHEZ, V. A simulation study of the adsorption-concentration polarisation interplay in protein ultrafiltration. **Chemical Engineering Science**, v. 48, p. 2753-2765, 1993.

GÉSAN, G.; DAUFIN, G.; MERIN, U. Performance of whey crossflow microfiltration during transient and stationary operating conditions. **Journal of Membrane Science**, v.104, p.271-281, 1995.

GOODING, C.H.; ALEXANDER, W.K. A dynamic model for low-pressure, hollow-fiber ultrafiltration. **Aiche Journal**, v. 31, p. 1728-1732, 1985.

HUISMAN, I.H.; TRÄGARDDH, C. Particle transport in crossflow microfiltration – I.Effects of hydrodynamics and diffusion **Chemical Engineering Science**, v. 54, p. 271-280, 1999a.

JÖNSSON, A.; JÖNSSON, B. Ultrafiltration of colloidal dispersions – A theoretical model of the concentration polarization phenomena. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 180, p. 504-518, 1996.

KARTHIK, V.; DASGUPTA, S.; DE, S. Modeling and simulation of osmotic pressure controlled electro-ultrafiltration in a cross-flow system. **Journal of Membrane Science**, v.199, p.29-40, 2002.

KOUTSOU, C.P, YIANTSIOS, S.G, KARABELAS, A.J. Numerical simulation of the flow in a plane-channel containing a periodic array of cylindrical turbulence promoters. **Journal of Membrane Science**, v.231, p.81-90, 2004.

KRSTIC, D.M.; TEKIC, M.N.; CARIC, M.D.; MILANOVIC, S.P. Static Turbulence promoter in cross-flow microfiltration of skim milk. **Desalination**, v. 163, p.297-309, 2004.

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 polarisation in crossflow microfiltration. **Journal of Membrane Science**, v.253, p.67-79, 2005.

LAMMINEN, M.O.; WALKER, W.W.; WEAVERS, L.K. Cleaning of particle-fouled membranes during cross-flow filtration using an embedded ultrasonic transducer system. **Journal of Membrane Science**, v.283, p.225-232, 2006.

LI, J.; HALLBAUER, D.K.; SANDERSON, D.R. Direct monitoring of membrane fouling and cleaning during ultrafiltration using a non-invasive ultrasonic technique. **Journal of Membrane Science**, v.215, p.33-52, 2003.

LIU, S.X.; PENG, M.; VANE, L.M. CFD modeling of pervaporative on mass transfer in the boundary layer. **Journal of Membrane Science**, v. 59, p. 5853-5857, 2004.

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

MACDONALD, R.A. Modelling macromolecular diffusion through a porous medium. **Journal of Membrane Science**, v.68, p.93-106, 1992.

MALISKA, C.R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional – Fundamentos e Coordenadas Generalizadas* – Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor – SINMEC – Departamento de Engenharia Mecânica, UFSC. LTC, 1995.

MULDER, M. Basic Principles of Membrane Technology, Klever Academic Publishers, 1996.

NAKAO, S.; KIMURA, S. Analysis of solutes rejection in ultrafiltration **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 14, p. 32-37, 1981.

PERRY, R.H., GREEN D.H. *Chemical Engineers Handbook*, 7<sup>th</sup> Edition, McGraw-Hill, 1999.

PERSSON, K.M.; NILSSON, J.L. Fouling resistance models in MF and UF. **Desalination**, v.80, p. 123-138, 1991.

RÄDER, S.A. Estudo Teórico-Experimental do Processo de Microfiltração de Partículas de Sílica em Suspensão Aquosa. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química. Porto Alegre, 2003.

RAHIMI, M.; MADAENI, S.S.; ABBASI, K. CFD modeling of permeate flux in cross-flow microfiltration membrane. **Journal of Membrane Science**, v.255, p.223-32, 2005.

ROMERO, C. A.; DAVIS, R. H., Global Model of Crossflow Microfiltration Based on Hydrodynamic Particle Diffusion. **Journal of Membrane Science**, v.39, p. 157-185, 1988.

SCHLICHTING, H. *Boundary Layer Theory*.4<sup>th</sup> Edition, McGraw-Hill, 1960.

SECCHI, A.R.; WADA, K.; TESSARO, I.C. Simulation of an ultrafiltration process of bovine serum albumin in hollow-fiber membranes. **Journal of Membrane Science**, v.160, p.255-265, 1999.

SHAW, C.T. *Using Computational Fluid Dynamics*. Department of Engineering. University of Warwick – Prentice Hall – 1992.

TAKABA, H.; NAKAO, S. Computational fluid dynamics study on concentration polarization in H<sub>2</sub>/CO separation membranes. **Journal of Membrane Science**, v. 249, p. 83-88, 2005.

TANDON, A.; GUPTA S.K.; AGARWAL, G.P. Modelling of protein transmission through ultrafiltration membranes. **Journal of Membrane Science**, v. 97, p. 83-90, 1994.

TRETTIN, D.R. An investigation of mass transfer mechanisms in ultrafiltration. Doctor Thesis. Lawrence University, 1980.

TRETTIN, D.R.; DOSHI, M.R. Limiting flux in ultrafiltration of macromolecular solutions. **Chemical Engineering Communications**, v. 4, p. 507-522, 1980.

VAN DEN BERG, G.B. Concentration Polarization in ultrafiltration – models and experiments. Doctor thesis. Universiteit Twente, 1988.

VLADISAVLJEVIC, G.T.; MILONJIC, S.K.; PAVASOVIC, V.L. Flux decline and gel resistance in unstirred ultrafiltration of aluminium hydrous oxide sols. **Journal of Colloid and Interface Science**, v.176, p.491-494, 1995.

---

VLADISAVLJEVIC, G.T.; RAJKOVIC, M.B. The effect of concentration dependent viscosity on permeate flux limitation in ultrafiltration. **The Scientific Journal Facta Universitatis**, v.2, p.9-19, 1999.

WILEY D.E.; FLETCHER, D.F. Techniques for computational fluid dynamics modelling of flow in membrane channels. **Journal of Membrane Science**, v.211, p.127-137, 2003.

ZHAO, Y.; XING W.; XU, N.; WONG F. Effects of inorganic salt on ceramic membrane microfiltration of titanium dioxide suspension. **Journal of Membrane Science**, v. 254, p. 81-88, 2005.

## Apêndice

### Resultados das Simulações

Este apêndice apresenta os resultados das simulações realizadas. A ordem seguida é a mesma nos capítulos 4 e 5, ou seja: resultados de filme líquido descendente sem e com transferência de massa, microfiltração tangencial de suspensão de sílica, microfiltração tangencial com barreiras ao escoamento, ultrafiltração de BSA, e solução por similaridade. A maior parte dos resultados vem seguida dos desvios percentuais em relação aos experimentos ou soluções analíticas, calculados da seguinte forma:

$$\text{desvio (\%)} = [(\text{solução analítica} - \text{simulação}) / \text{solução analítica}] \cdot 100 \quad (\text{A.1})$$

Para as simulações de microfiltração tangencial de sílica, ultrafiltração de BSA e microfiltração com e sem barreiras, os desvios apresentados foram calculados trocando o denominador da Equação (A.1) pelos respectivos dados experimentais. No caso das simulações envolvendo barreiras trapezoidais, os desvios entre os resultados dos CFX e aqueles obtidos nas simulações realizadas por RAHIMI *et al.* (2005) foram calculados trocando-se o termo “solução analítica” da Equação (A.1) pelos resultados de simulação obtidos por estes autores.

**Tabela A.1:** Perfil de velocidades no filme líquido descendente (próximo à parede, até  $y = 3,81 \cdot 10^{-5}$ ), (Figura 5.1)

y (m)	Velocidade ( $\text{m s}^{-1}$ ), Simulação	Velocidade ( $\text{m s}^{-1}$ ) Solução Analítica	desvio
0	0	0	0
9,00E-09	1,38E-05	1,33E-05	-3,32
2,36E-07	3,53E-04	3,49E-04	-1,10
4,40E-07	6,82E-04	6,51E-04	-4,72
6,62E-07	9,71E-04	9,79E-04	0,79
9,68E-07	1,36E-03	1,43E-03	4,86
1,24E-06	1,71E-03	1,83E-03	6,77

1,51E-06	2,18E-03	2,23E-03	1,90
1,84E-06	2,75E-03	2,71E-03	-1,18
2,35E-06	3,59E-03	3,45E-03	-4,10
2,87E-06	4,51E-03	4,20E-03	-7,29
3,68E-06	5,90E-03	5,38E-03	-9,51
4,81E-06	7,66E-03	7,00E-03	-9,44
5,61E-06	8,76E-03	8,15E-03	-7,46
1,63E-05	2,31E-02	2,27E-02	-2,11
2,23E-05	3,04E-02	3,03E-02	-0,34
3,18E-05	4,16E-02	4,15E-02	-0,12
3,81E-05	4,83E-02	4,85E-02	0,35
4,53E-05	5,58E-02	5,58E-02	0,16
5,25E-05	6,23E-02	6,27E-02	0,55
6,08E-05	6,96E-02	6,98E-02	0,30
6,77E-05	7,47E-02	7,52E-02	0,66
7,72E-05	8,15E-02	8,17E-02	0,33
8,31E-05	8,48E-02	8,53E-02	0,60
9,33E-05	9,02E-02	9,05E-02	0,35
9,86E-05	9,23E-02	9,28E-02	0,50
1,07E-04	9,55E-02	9,58E-02	0,36
1,17E-04	9,77E-02	9,82E-02	0,55
1,23E-04	9,90E-02	9,93E-02	0,29
1,29E-04	9,93E-02	9,99E-02	0,58
1,35E-04	9,95E-02	1,00E-01	0,57

**Tabela A.2:** Perfil de concentração da difusão em filme líquido descendente (Figura 5.3)

y (m)	Concentração (kg m <sup>-3</sup> ) Simulação	Concentração (kg m <sup>-3</sup> ) Solução Analítica	Desvio
0	3,8526	3,8526	0
3,36E-07	3,8252	3,8317	0,17
3,74E-07	3,8223	3,8294	0,19
6,36E-07	3,7975	3,8131	0,41
1,12E-06	3,7644	3,783	0,49
1,46E-06	3,7372	3,7617	0,65
1,95E-06	3,6992	3,7312	0,86
2,40E-06	3,6619	3,7032	1,12
4,05E-06	3,5363	3,6008	1,79
4,93E-06	3,4683	3,5461	2,19
1,30E-05	2,8998	3,0478	4,86
2,46E-05	2,0932	2,339	10,51
4,18E-05	1,1173	1,3879	19,50
4,37E-05	1,0080	1,2942	22,11
4,46E-05	0,9706	1,2493	22,31
6,03E-05	0,4524	0,6193	26,96
6,78E-05	0,3068	0,4078	24,77
7,31E-05	0,2036	0,2906	29,93
7,62E-05	0,1740	0,2361	26,30
8,38E-05	0,0972	0,1323	26,56



9,69E-05	0,0428	0,0405	-5,61
1,01E-04	0,0271	0,0268	-1,10
1,03E-04	0,0250	0,0209	-19,75
1,19E-04	0,0062	0,0071	12,49

**Tabela A.3:** Valores de fluxo de permeado médio para cada teste de malha – microfiltração de suspensão de sílica (Figura 5.4)

Teste	Fluxo ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ )
1	10,89
2	10,88
3	11,05
4	11,05
5	11,06
6	11,06

**Tabela A.4:** Valores de fluxo de permeado *versus* pressão transmembrana, experimentais e de simulação, para velocidade de entrada igual a  $0,16 \text{ m s}^{-1}$  (Figura 5.5)

$\Delta P$ (Bar)	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Experimento	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação	desvios
0,5	14,45	11,00	23,88
1,50	35,65	33,05	7,29
2,0	47,35	44,07	6,93
2,5	60,40	55,10	7,98
3,5	82,30	77,14	6,27

**Tabela A.5:** Valores de fluxo de permeado *versus* pressão transmembrana, experimentais e de simulação, para velocidade de entrada igual a  $1,67 \text{ m s}^{-1}$  (Figura 5.6)

$\Delta P$ (Bar)	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Experimento	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação	Desvios
0,5	16,45	11,38	30,82
1,5	37,50	34,63	7,65
2,0	51,75	46,27	10,58
2,5	64,55	57,90	10,30
3,5	85,00	81,16	4,52

**Tabela A.6:** Fluxo de permeado médio para cada teste de malha – microfiltração com e sem barreiras (Figura 5.7)

Teste	Fluxo ( $L\ m^{-2}\ h^{-1}$ )			
	Sem barreiras	Pequena barreira	Grande barreira	Barreiras opostas
1	349,80	519,69	329,69	325,97
2	348,02	519,68	329,69	325,96
3	347,67	519,71	329,71	325,99
4	348,82	519,72	329,71	325,99
5	348,29	519,70	329,70	325,98
6	347,73	519,70	329,71	325,98

**Tabela A.7:** Fluxo de permeado *versus* pressão transmembrana para módulo sem barreira – condição de interface (Figura 5.8)

$\Delta P$ (kPa)	Fluxo de permeado ( $L\ m^{-2}\ h^{-1}$ ) Experimental	Fluxo de permeado ( $L\ m^{-2}\ h^{-1}$ ) Simulação Artigo*	Fluxo de permeado ( $L\ m^{-2}\ h^{-1}$ ) Simulação - CFX	Desvios	
				CFX-Experimental	CFX - Simulação artigo*
45,5	326	341	349,80	-7,30	-2,58
62,5	542	457	503,60	7,08	-10,20
83,0	577	603	670,25	-16,16	-11,15
112,5	803	838	868,16	-8,11	-3,60
134	989	994	1037,90	-4,94	-4,42

\* RAHIMI *et al* (2005)**Tabela A.8:** Fluxo de permeado *versus* pressão transmembrana para módulo com pequena barreira trapezoidal – condição de interface (Figura 5.9)

$\Delta P$ (kPa)	Fluxo de permeado ( $L\ m^{-2}\ h^{-1}$ ) Experimental	Fluxo de permeado ( $L\ m^{-2}\ h^{-1}$ ) Simulação artigo	Fluxo de permeado ( $L\ m^{-2}\ h^{-1}$ ) Simulação - CFX	Desvios	
				CFX-Experimental	CFX - Simulação artigo
69,75	525	529	529,10	-0,78	-0,02
82,5	604	616	665,78	-10,23	-8,08
112,3	834	842	891,39	-6,88	-5,87
132	972	995	1026,20	-5,58	-3,14
141,25	1048	1059	1124,61	-7,31	-6,20

**Tabela A.9:** Fluxo de permeado *versus* pressão transmembrana para módulo com grande barreira trapezoidal – condição de interface (Figura 5.10)

$\Delta P$ (kPa)	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Experimental	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação artigo	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação - CFX	Desvios	
				CFX-Experimental	CFX - Simulação artigo
44,25	326	334	337,48	-3,52	-1,04
60,25	415	449	474,22	-14,27	-5,62
81,3	567	607	636,33	-12,23	-4,83
100,25	699	749	791,54	-13,24	-5,68
120,75	850	903	951,74	-11,97	-5,40

**Tabela A.10:** Fluxo de permeado *versus* pressão transmembrana para módulo com barreiras opostas – condição de interface (Figura 5.11)

$\Delta P$ (kPa)	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Experimental	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação artigo	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação - CFX	Desvios	
				CFX-Experimental	CFX - Simulação artigo
43,75	320	328	283,19	11,50	13,66
65,25	482	489	423,24	12,19	13,45
87,8	653	659	566,33	13,27	14,06
109,75	818	825	707,93	13,46	14,19
131,75	973	991	849,52	12,69	14,28
155,5	1142	1174	996,60	12,73	15,11

**Tabela A.11:** Fluxo de permeado *versus* pressão transmembrana para módulo sem barreira – condição de contorno modificada (Figura 5.12)

$\Delta P$ (kPa)	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Experimental	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação artigo	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação - CFX	Desvios	
				CFX-Experimental	CFX - Simulação artigo
45,5	326	341	339,02	-4,00	0,58
62,5	542	457	465,69	14,08	-1,90
83,0	577	603	618,42	-7,18	-2,56
112,5	803	838	838,21	-4,39	-0,03
134	989	994	998,42	-0,95	-0,44

**Tabela A.12:** Fluxo de permeado *versus* pressão transmembrana para módulo com pequena barreira trapezoidal – condição de contorno modificada (Figura 5.13)

$\Delta P$ (kPa)	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Experimental	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação artigo	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação - CFX	Desvios	
				CFX-Experimental	CFX - Simulação artigo
69,75	525	529	529,10	-1,01	-1,76
82,5	604	616	665,78	-1,77	-0,21
112,3	834	842	891,39	-0,28	-0,67
132	972	995	1026,20	-1,18	-1,16
141,25	1048	1059	1124,61	-0,42	-0,62

**Tabela A.13:** Fluxo de permeado *versus* pressão transmembrana para módulo com grande barreira trapezoidal – condição de contorno modificada (Figura 5.14)

$\Delta P$ (kPa)	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Experimental	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação artigo	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação - CFX	Desvios	
				CFX-Experimental	CFX - Simulação artigo
44,25	326	334	337,48	-1,14	-1,28
60,25	415	449	474,22	-8,18	-0,02
81,3	567	607	636,33	-6,77	-0,26
100,25	699	749	791,54	-6,86	-0,27
120,75	850	903	951,74	-5,85	-0,37

**Tabela A.14:** Fluxo de permeado *versus* pressão transmembrana para módulo com barreiras opostas – condição de contorno modificada (Figura 5.15)

$\Delta P$ (kPa)	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Experimental	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação artigo	Fluxo de permeado ( $L \cdot m^{-2} \cdot h^{-1}$ ) Simulação - CFX	Desvios	
				CFX-Experimental	CFX - Simulação artigo
43,75	320	328	283,19	-1,87	0,62
65,25	482	489	423,24	-2,41	0,95
87,8	653	659	566,33	-0,12	0,79
109,75	818	825	707,93	0,03	0,88
131,75	973	991	849,52	-0,89	0,95
155,5	1142	1174	996,60	-1,45	1,31

**Tabela A.15:** Fluxo de permeado para cada teste de malha – ultrafiltração de BSA (Figura 5.24)

Teste	Fluxo ( $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$ )
1	0,226
2	0,161
3	0,163
4	0,164

**Tabela A.16:** Fluxo de permeado *versus* pressão transmembrana na ultrafiltração tangencial de BSA (Figura 5.25)

$\Delta P$ (kPa)	Fluxo permeado ( $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ) Experimento	Fluxo permeado ( $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ) Simulação	desvio
103,4	0,160	0,185	-15,63
137,9	0,210	0,224	-6,67
172,4	0,255	0,259	-1,57
206,8	0,305	0,299	1,97
241,3	0,440	0,418	5,00
275,8	0,415	0,388	6,51
310,3	0,410	0,378	7,80

**Tabela A.17:** Perfis de fração mássica de BSA em diferentes pressões transmembrana - I (Figura 5.26)

$\bar{x}$	103,4kPa	137,9kPa	172,4kPa
0,1	2,535E-04	2,538E-04	2,539E-04
0,15	2,538E-04	2,541E-04	2,543E-04
0,2	2,540E-04	2,545E-04	2,548E-04
0,25	2,543E-04	2,549E-04	2,553E-04
0,3	2,545E-04	2,551E-04	2,556E-04
0,35	2,547E-04	2,555E-04	2,559E-04
0,4	2,550E-04	2,558E-04	2,564E-04
0,45	2,553E-04	2,562E-04	2,569E-04
0,5	2,556E-04	2,565E-04	2,573E-04
0,55	2,558E-04	2,569E-04	2,577E-04
0,6	2,561E-04	2,572E-04	2,581E-04
0,65	2,564E-04	2,576E-04	2,586E-04
0,7	2,566E-04	2,579E-04	2,589E-04
0,75	2,569E-04	2,583E-04	2,594E-04
0,8	2,571E-04	2,586E-04	2,599E-04
0,85	2,574E-04	2,590E-04	2,603E-04
0,9	2,576E-04	2,593E-04	2,606E-04
0,95	2,579E-04	2,597E-04	2,610E-04
1	2,580E-04	2,598E-04	2,612E-04

**Tabela A.18:** Perfis de fração mássica de BSA em diferentes pressões transmembrana - II  
(Figura 5.26)

$\bar{x}$	206,8kPa	241,3 kPa	275,8kPa	310,3kPa
0,1	2,542E-04	2,551E-04	2,547E-04	2,546E-04
0,15	2,548E-04	2,554E-04	2,553E-04	2,555E-04
0,2	2,552E-04	2,563E-04	2,561E-04	2,560E-04
0,25	2,558E-04	2,571E-04	2,568E-04	2,568E-04
0,3	2,562E-04	2,576E-04	2,573E-04	2,573E-04
0,35	2,567E-04	2,584E-04	2,581E-04	2,580E-04
0,4	2,572E-04	2,591E-04	2,587E-04	2,586E-04
0,45	2,578E-04	2,599E-04	2,595E-04	2,594E-04
0,5	2,582E-04	2,605E-04	2,600E-04	2,599E-04
0,55	2,587E-04	2,612E-04	2,608E-04	2,607E-04
0,6	2,592E-04	2,621E-04	2,613E-04	2,612E-04
0,65	2,597E-04	2,627E-04	2,621E-04	2,620E-04
0,7	2,601E-04	2,632E-04	2,627E-04	2,625E-04
0,75	2,607E-04	2,641E-04	2,634E-04	2,633E-04
0,8	2,612E-04	2,648E-04	2,641E-04	2,639E-04
0,85	2,617E-04	2,656E-04	2,648E-04	2,647E-04
0,9	2,622E-04	2,662E-04	2,654E-04	2,653E-04
0,95	2,627E-04	2,670E-04	2,662E-04	2,660E-04
1	2,629E-04	2,672E-04	2,664E-04	2,662E-04

**Tabela A.19:** Perfis de fluxo de permeado para cada configuração de malha – ultrafiltração bidimensional de BSA – I (Figura 5.27)

$\bar{x}$	2880 hexaedros	3840 hexaedros	4800 hexaedros
0,1	1,7747E-04	1,7851E-04	1,7884E-04
0,15	1,5672E-04	1,5724E-04	1,5740E-04
0,2	1,4368E-04	1,4397E-04	1,4403E-04
0,25	1,3452E-04	1,3464E-04	1,3465E-04
0,3	1,2761E-04	1,2762E-04	1,2760E-04
0,35	1,2215E-04	1,2209E-04	1,2205E-04
0,4	1,1768E-04	1,1758E-04	1,1754E-04
0,45	1,1392E-04	1,1382E-04	1,1377E-04
0,5	1,1069E-04	1,1059E-04	1,1056E-04
0,55	1,0787E-04	1,0779E-04	1,0776E-04
0,6	1,0537E-04	1,0530E-04	1,0499E-04
0,65	1,0312E-04	1,0307E-04	1,0305E-04
0,7	1,0108E-04	1,0105E-04	1,0103E-04
0,75	9,9211E-05	9,9187E-05	9,9175E-05
0,8	9,7482E-05	9,7469E-05	9,7466E-05
0,85	9,5872E-05	9,5874E-05	9,5879E-05
0,9	9,4366E-05	9,4382E-05	9,4397E-05
0,95	9,2952E-05	9,2984E-05	9,3010E-05
1	9,1792E-05	9,1850E-05	9,1895E-05

**Tabela A.20:** Perfis de fluxo de permeado para cada configuração de malha – ultrafiltração bidimensional de BSA – II (Figura 5.27)

$\bar{x}$	6720 hexaedros	8640 hexaedros	9600 hexaedros
0,1	1,7903E-04	1,7909E-04	1,6358E-04
0,15	1,5748E-04	1,5749E-04	1,4626E-04
0,2	1,4405E-04	1,4404E-04	1,3489E-04
0,25	1,3463E-04	1,3462E-04	1,2671E-04
0,3	1,2756E-04	1,2754E-04	1,2047E-04
0,35	1,2200E-04	1,2199E-04	1,1553E-04
0,4	1,1749E-04	1,1748E-04	1,1147E-04
0,45	1,1373E-04	1,1371E-04	1,0808E-04
0,5	1,1051E-04	1,1050E-04	1,0518E-04
0,55	1,0772E-04	1,0771E-04	1,0266E-04
0,6	1,0525E-04	1,0524E-04	1,0045E-04
0,65	1,0302E-04	1,0302E-04	9,8490E-05
0,7	1,0100E-04	1,0100E-04	9,6752E-05
0,75	9,9149E-05	9,9148E-05	9,5201E-05
0,8	9,7434E-05	9,7433E-05	9,3813E-05
0,85	9,5837E-05	9,5833E-05	9,2575E-05
0,9	9,4341E-05	9,4332E-05	9,1467E-05
0,95	9,2936E-05	9,2917E-05	9,0476E-05
1	9,1815E-05	9,1790E-05	8,9616E-05

**Tabela A.21:** Fluxo permeado em função do comprimento do canal ( $\phi_w = 20\phi_B$ ) – microfiltração de suspensão de sílica (Figura 5.28)

$\bar{x}$	Fluxo permeado ( $m^3 m^{-2} s^{-1}$ ) Simulação	Fluxo permeado ( $m^3 m^{-2} s^{-1}$ ) Solução Analítica	desvio
0,10	1,5697E-04	2,1075E-04	25,52
0,15	1,4035E-04	1,8411E-04	23,77
0,20	1,2944E-04	1,6727E-04	22,62
0,25	1,2159E-04	1,5528E-04	21,70
0,30	1,1561E-04	1,4612E-04	20,88
0,35	1,1087E-04	1,3881E-04	20,13
0,40	1,0701E-04	1,3276E-04	19,40
0,45	1,0380E-04	1,2765E-04	18,69
0,50	1,0109E-04	1,2325E-04	17,98
0,55	9,8783E-05	1,1939E-04	17,26
0,60	9,6807E-05	1,1598E-04	16,53
0,65	9,5116E-05	1,1293E-04	15,77
0,70	9,3668E-05	1,1017E-04	14,98
0,75	9,2427E-05	1,0767E-04	14,15
0,80	9,1364E-05	1,0537E-04	13,30
0,85	9,0460E-05	1,0327E-04	12,40
0,90	8,9688E-05	1,0132E-04	11,48
0,95	8,9031E-05	9,9508E-05	10,53
1,00	8,8487E-05	9,7821E-05	9,54

**Tabela A.22:** Fluxo permeado em função do comprimento do canal ( $\phi_w = 40\phi_B$ ) – microfiltração de suspensão de sílica (Figura 5.28)

$\bar{x}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica	desvio
0,10	1,6110E-04	2,1075E-04	23,56
0,15	1,4405E-04	1,8411E-04	21,76
0,20	1,3284E-04	1,6727E-04	20,58
0,25	1,2479E-04	1,5528E-04	19,64
0,30	1,1865E-04	1,4612E-04	18,80
0,35	1,1378E-04	1,3881E-04	18,03
0,40	1,0979E-04	1,3276E-04	17,30
0,45	1,0646E-04	1,2765E-04	16,60
0,50	1,0363E-04	1,2325E-04	15,92
0,55	1,0118E-04	1,1939E-04	15,25
0,60	9,9052E-05	1,1598E-04	14,60
0,65	9,7189E-05	1,1293E-04	13,94
0,70	9,5553E-05	1,1017E-04	13,27
0,75	9,4114E-05	1,0767E-04	12,59
0,80	9,2846E-05	1,0537E-04	11,89
0,85	9,1733E-05	1,0327E-04	11,17
0,90	9,0754E-05	1,0132E-04	10,43
0,95	8,9892E-05	9,9508E-05	9,66
1,00	8,9157E-05	9,7821E-05	8,86

**Tabela A.23:** Fluxo permeado em função do comprimento do canal ( $\phi_w = 60\phi_B$ ) – microfiltração de suspensão de sílica (Figura 5.28)

$\bar{x}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica	desvio
0,10	1,6248E-04	2,1075E-04	22,90
0,15	1,4528E-04	1,8411E-04	21,09
0,20	1,3398E-04	1,6727E-04	19,90
0,25	1,2586E-04	1,5528E-04	18,95
0,30	1,1966E-04	1,4612E-04	18,11
0,35	1,1475E-04	1,3881E-04	17,33
0,40	1,1073E-04	1,3276E-04	16,60
0,45	1,0736E-04	1,2765E-04	15,90
0,50	1,0449E-04	1,2325E-04	15,22
0,55	1,0200E-04	1,1939E-04	14,57
0,60	9,9824E-05	1,1598E-04	13,93
0,65	9,7910E-05	1,1293E-04	13,30
0,70	9,6219E-05	1,1017E-04	12,66
0,75	9,4718E-05	1,0767E-04	12,03
0,80	9,3385E-05	1,0537E-04	11,38
0,85	9,2205E-05	1,0327E-04	10,71
0,90	9,1156E-05	1,0132E-04	10,03



0,95	9,0226E-05	9,9508E-05	9,33
1,00	8,9425E-05	9,7821E-05	8,58

**Tabela A.24:** Fluxo permeado em função do comprimento do canal ( $\phi_w = 80\phi_B$ ) – microfiltração de suspensão de sílica (Figura 5.28)

$\bar{x}$	Fluxo permeado ( $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ ) Simulação	Fluxo permeado ( $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ ) Solução Analítica	desvio
0,10	1,6317E-04	2,1075E-04	22,58
0,15	1,4590E-04	1,8411E-04	20,75
0,20	1,3455E-04	1,6727E-04	19,56
0,25	1,2639E-04	1,5528E-04	18,61
0,30	1,2017E-04	1,4612E-04	17,76
0,35	1,1523E-04	1,3881E-04	16,98
0,40	1,1119E-04	1,3276E-04	16,25
0,45	1,0781E-04	1,2765E-04	15,54
0,50	1,0492E-04	1,2325E-04	14,87
0,55	1,0241E-04	1,1939E-04	14,22
0,60	1,0022E-04	1,1598E-04	13,59
0,65	9,8280E-05	1,1293E-04	12,97
0,70	9,6563E-05	1,1017E-04	12,35
0,75	9,5034E-05	1,0767E-04	11,73
0,80	9,3671E-05	1,0537E-04	11,11
0,85	9,2460E-05	1,0327E-04	10,46
0,90	9,1379E-05	1,0132E-04	9,81
0,95	9,0416E-05	9,9508E-05	9,14
1,00	8,9584E-05	9,7821E-05	8,42

**Tabela A.25:** Fluxo permeado em função do comprimento do canal ( $\phi_w = 100\phi_B$ ) – microfiltração de suspensão de sílica (Figura 5.28)

$\bar{x}$	Fluxo permeado ( $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ ) Simulação	Fluxo permeado ( $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ ) Solução Analítica	desvio
0,10	1,6358E-04	2,1075E-04	22,38
0,15	1,4626E-04	1,8411E-04	20,56
0,20	1,3489E-04	1,6727E-04	19,36
0,25	1,2671E-04	1,5528E-04	18,40
0,30	1,2047E-04	1,4612E-04	17,56
0,35	1,1553E-04	1,3881E-04	16,77
0,40	1,1147E-04	1,3276E-04	16,04
0,45	1,0808E-04	1,2765E-04	15,33
0,50	1,0518E-04	1,2325E-04	14,66
0,55	1,0266E-04	1,1939E-04	14,01
0,60	1,0045E-04	1,1598E-04	13,39
0,65	9,8490E-05	1,1293E-04	12,78
0,70	9,6752E-05	1,1017E-04	12,18

0,75	9,5201E-05	1,0767E-04	11,58
0,80	9,3813E-05	1,0537E-04	10,97
0,85	9,2575E-05	1,0327E-04	10,35
0,90	9,1467E-05	1,0132E-04	9,72
0,95	9,0476E-05	9,9508E-05	9,08
1,00	8,9616E-05	9,7821E-05	8,39

**Tabela A.26:** Perfis de fração mássica na metade do canal retangular para  $\phi_w = 0,00504$  (Figura 5.29)

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação: 0,00504	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica: 0,00504	desvio
0	5,0390E-03	5,0400E-03	0,02
0,03	4,9200E-03	4,8821E-03	-0,78
0,06	4,8009E-03	4,6792E-03	-2,60
0,09	4,6819E-03	4,5325E-03	-3,30
0,11	4,5629E-03	4,3905E-03	-3,93
0,15	4,4439E-03	4,2080E-03	-5,60
0,17	4,3248E-03	4,0762E-03	-6,10
0,20	4,2058E-03	3,9485E-03	-6,52
0,23	4,0868E-03	3,7844E-03	-7,99
0,26	3,9677E-03	3,6658E-03	-8,24
0,28	3,8508E-03	3,5509E-03	-8,45
0,32	3,7355E-03	3,4033E-03	-9,76
0,35	3,6203E-03	3,2967E-03	-9,82
0,37	3,5051E-03	3,1934E-03	-9,76
0,41	3,3898E-03	3,0607E-03	-10,75
0,43	3,2746E-03	2,9648E-03	-10,45
0,47	3,1594E-03	2,8415E-03	-11,19
0,49	3,0441E-03	2,7525E-03	-10,59
0,52	2,9289E-03	2,6662E-03	-9,85
0,55	2,8148E-03	2,5554E-03	-10,15
0,58	2,7124E-03	2,4754E-03	-9,58
0,60	2,6100E-03	2,3978E-03	-8,85
0,64	2,5077E-03	2,2981E-03	-9,12
0,66	2,4053E-03	2,2261E-03	-8,05
0,69	2,3029E-03	2,1564E-03	-6,80
0,73	2,2005E-03	2,0668E-03	-6,47
0,75	2,0981E-03	2,0020E-03	-4,80
0,78	1,9958E-03	1,9393E-03	-2,92
0,81	1,8934E-03	1,8587E-03	-1,87
0,84	1,8058E-03	1,8004E-03	-0,30
0,86	1,7267E-03	1,7440E-03	0,99
0,90	1,6477E-03	1,6715E-03	1,42
0,92	1,5687E-03	1,6191E-03	3,12
0,95	1,4897E-03	1,5684E-03	5,02
0,98	1,4106E-03	1,5032E-03	6,16
1,01	1,3316E-03	1,4561E-03	8,55

**Tabela A.27:** Perfis de fração mássica na metade do canal retangular para  $\phi_w = 0,01008$   
(Figura 5.29)

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação: 0,01008	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica: 0,01008	desvio
0	1,0078E-02	1,0080E-02	0,02
0,03	9,8338E-03	9,7641E-03	-0,71
0,06	9,5896E-03	9,3583E-03	-2,47
0,09	9,3454E-03	9,0651E-03	-3,09
0,11	9,1013E-03	8,7810E-03	-3,65
0,15	8,8571E-03	8,4161E-03	-5,24
0,17	8,6129E-03	8,1524E-03	-5,65
0,20	8,3687E-03	7,8969E-03	-5,97
0,23	8,1246E-03	7,5687E-03	-7,34
0,26	7,8804E-03	7,3315E-03	-7,49
0,28	7,6404E-03	7,1018E-03	-7,58
0,32	7,4038E-03	6,8067E-03	-8,77
0,35	7,1673E-03	6,5934E-03	-8,70
0,37	6,9308E-03	6,3868E-03	-8,52
0,41	6,6943E-03	6,1213E-03	-9,36
0,43	6,4577E-03	5,9295E-03	-8,91
0,47	6,2212E-03	5,6831E-03	-9,47
0,49	5,9847E-03	5,5050E-03	-8,71
0,52	5,7481E-03	5,3325E-03	-7,79
0,55	5,5139E-03	5,1109E-03	-7,89
0,58	5,3037E-03	4,9507E-03	-7,13
0,60	5,0935E-03	4,7956E-03	-6,21
0,64	4,8833E-03	4,5963E-03	-6,24
0,66	4,6731E-03	4,4523E-03	-4,96
0,69	4,4629E-03	4,3127E-03	-3,48
0,73	4,2526E-03	4,1335E-03	-2,88
0,75	4,0424E-03	4,0040E-03	-0,96
0,78	3,8322E-03	3,8785E-03	1,19
0,81	3,6220E-03	3,7173E-03	2,56
0,84	3,4421E-03	3,6008E-03	4,41
0,86	3,2798E-03	3,4880E-03	5,97
0,90	3,1175E-03	3,3430E-03	6,75
0,92	2,9553E-03	3,2383E-03	8,74
0,95	2,7930E-03	3,1368E-03	10,96
0,98	2,6308E-03	3,0064E-03	12,49
1,01	2,4685E-03	2,9122E-03	15,24

**Tabela A.28:** Perfis de fração mássica na metade do canal retangular para  $\phi_w = 0,01512$  (Figura 5.29)

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação: 0,0512	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica: 0,0512	desvio
0	1,5117E-02	1,5120E-02	0,02
0,03	1,4748E-02	1,4646E-02	-0,69
0,06	1,4378E-02	1,4038E-02	-2,43
0,09	1,4009E-02	1,3598E-02	-3,03
0,11	1,3640E-02	1,3172E-02	-3,56
0,15	1,3270E-02	1,2624E-02	-5,12
0,17	1,2901E-02	1,2229E-02	-5,50
0,20	1,2531E-02	1,1845E-02	-5,79
0,23	1,2162E-02	1,1353E-02	-7,13
0,26	1,1793E-02	1,0997E-02	-7,24
0,28	1,1430E-02	1,0653E-02	-7,30
0,32	1,1072E-02	1,0210E-02	-8,44
0,35	1,0714E-02	9,8900E-03	-8,33
0,37	1,0356E-02	9,5801E-03	-8,10
0,41	9,9984E-03	9,1820E-03	-8,89
0,43	9,6406E-03	8,8943E-03	-8,39
0,47	9,2828E-03	8,5246E-03	-8,89
0,49	8,9250E-03	8,2575E-03	-8,08
0,52	8,5672E-03	7,9987E-03	-7,11
0,55	8,2128E-03	7,6663E-03	-7,13
0,58	7,8948E-03	7,4261E-03	-6,31
0,60	7,5767E-03	7,1934E-03	-5,33
0,64	7,2587E-03	6,8944E-03	-5,28
0,66	6,9407E-03	6,6784E-03	-3,93
0,69	6,6226E-03	6,4691E-03	-2,37
0,73	6,3046E-03	6,2003E-03	-1,68
0,75	5,9866E-03	6,0060E-03	0,32
0,78	5,6685E-03	5,8178E-03	2,57
0,81	5,3505E-03	5,5760E-03	4,04
0,84	5,0782E-03	5,4013E-03	5,98
0,86	4,8328E-03	5,2320E-03	7,63
0,90	4,5873E-03	5,0146E-03	8,52
0,92	4,3418E-03	4,8574E-03	10,62
0,95	4,0963E-03	4,7052E-03	12,94
0,98	3,8508E-03	4,5097E-03	14,61
1,01	3,6053E-03	4,3684E-03	17,47

**Tabela A.29:** Perfis de fração mássica na metade do canal retangular para  $\phi_w = 0,02016$   
(Figura 5.29)

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação: 0,02016	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica: 0,02016	desvio
0	2,0156E-02	2,0160E-02	0,02
0,03	1,9661E-02	1,9685E-02	0,12
0,06	1,9167E-02	1,9070E-02	-0,51
0,09	1,8672E-02	1,8620E-02	-0,28
0,11	1,8178E-02	1,8182E-02	0,02
0,15	1,7683E-02	1,7613E-02	-0,40
0,17	1,7189E-02	1,7199E-02	0,06
0,20	1,6694E-02	1,6793E-02	0,59
0,23	1,6200E-02	1,6268E-02	0,42
0,26	1,5705E-02	1,5885E-02	1,13
0,28	1,5219E-02	1,5511E-02	1,88
0,32	1,4740E-02	1,5026E-02	1,90
0,35	1,4261E-02	1,4672E-02	2,80
0,37	1,3782E-02	1,4327E-02	3,80
0,41	1,3303E-02	1,3878E-02	4,15
0,43	1,2823E-02	1,3552E-02	5,38
0,47	1,2344E-02	1,3128E-02	5,97
0,49	1,1865E-02	1,2819E-02	7,44
0,52	1,1386E-02	1,2517E-02	9,03
0,55	1,0912E-02	1,2125E-02	10,01
0,58	1,0486E-02	1,1840E-02	11,43
0,60	1,0060E-02	1,1561E-02	12,98
0,64	9,6340E-03	1,1199E-02	13,98
0,66	9,2082E-03	1,0936E-02	15,80
0,69	8,7823E-03	1,0678E-02	17,75
0,73	8,3565E-03	1,0344E-02	19,21
0,75	7,9306E-03	1,0100E-02	21,48
0,78	7,5047E-03	9,8626E-03	23,91
0,81	7,0789E-03	9,5542E-03	25,91
0,84	6,7144E-03	9,3292E-03	28,03
0,86	6,3857E-03	9,1095E-03	29,90
0,90	6,0570E-03	8,8246E-03	31,36
0,92	5,7282E-03	8,6167E-03	33,52
0,95	5,3995E-03	8,4138E-03	35,83
0,98	5,0708E-03	8,1507E-03	37,79
1,01	4,7421E-03	7,9587E-03	40,42

**Tabela A.30:** Perfis de fração mássica na metade do canal retangular para  $\phi_w = 0,0252$   
(Figura 5.29)

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação: 0,0252	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica: 0,0252	desvio
0	2,5195E-02	2,5200E-02	0,02
0,03	2,4575E-02	2,4607E-02	0,13
0,06	2,3955E-02	2,3837E-02	-0,50
0,09	2,3336E-02	2,3276E-02	-0,26
0,11	2,2716E-02	2,2727E-02	0,05
0,15	2,2096E-02	2,2017E-02	-0,36
0,17	2,1477E-02	2,1498E-02	0,10
0,20	2,0857E-02	2,0992E-02	0,64
0,23	2,0237E-02	2,0335E-02	0,48
0,26	1,9618E-02	1,9856E-02	1,20
0,28	1,9008E-02	1,9389E-02	1,96
0,32	1,8408E-02	1,8782E-02	1,99
0,35	1,7808E-02	1,8340E-02	2,90
0,37	1,7207E-02	1,7908E-02	3,92
0,41	1,6607E-02	1,7348E-02	4,27
0,43	1,6006E-02	1,6940E-02	5,51
0,47	1,5406E-02	1,6410E-02	6,12
0,49	1,4805E-02	1,6023E-02	7,60
0,52	1,4205E-02	1,5646E-02	9,21
0,55	1,3610E-02	1,5157E-02	10,20
0,58	1,3077E-02	1,4800E-02	11,64
0,60	1,2543E-02	1,4451E-02	13,20
0,64	1,2009E-02	1,3999E-02	14,22
0,66	1,1476E-02	1,3669E-02	16,05
0,69	1,0942E-02	1,3348E-02	18,02
0,73	1,0408E-02	1,2930E-02	19,51
0,75	9,8747E-03	1,2626E-02	21,79
0,78	9,3410E-03	1,2328E-02	24,23
0,81	8,8073E-03	1,1943E-02	26,25
0,84	8,3505E-03	1,1661E-02	28,39
0,86	7,9386E-03	1,1387E-02	30,28
0,90	7,5267E-03	1,1031E-02	31,77
0,92	7,1147E-03	1,0771E-02	33,95
0,95	6,7028E-03	1,0517E-02	36,27
0,98	6,2909E-03	1,0188E-02	38,25
1,01	5,8789E-03	9,9484E-03	40,91

**Tabela A.31:** Perfis de fração mássica na saída do canal retangular para  $\phi_w = 0,00504$  (Figura 5.30)

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação: 0,00504	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica: 0,00504	desvio
0	5,0394E-03	5,0400E-03	0,01
0,02	4,9382E-03	4,9142E-03	-0,49
0,05	4,8369E-03	4,7514E-03	-1,80
0,07	4,7357E-03	4,6329E-03	-2,22
0,09	4,6345E-03	4,5173E-03	-2,60
0,12	4,5332E-03	4,3676E-03	-3,79
0,14	4,4320E-03	4,2586E-03	-4,07
0,16	4,3308E-03	4,1524E-03	-4,30
0,19	4,2295E-03	4,0148E-03	-5,35
0,21	4,1283E-03	3,9146E-03	-5,46
0,23	4,0294E-03	3,8169E-03	-5,57
0,25	3,9323E-03	3,6905E-03	-6,55
0,27	3,8353E-03	3,5984E-03	-6,58
0,29	3,7383E-03	3,5086E-03	-6,55
0,32	3,6413E-03	3,3924E-03	-7,34
0,34	3,5442E-03	3,3077E-03	-7,15
0,37	3,4472E-03	3,1981E-03	-7,79
0,39	3,3502E-03	3,1183E-03	-7,44
0,41	3,2532E-03	3,0405E-03	-6,99
0,44	3,1569E-03	2,9398E-03	-7,39
0,46	3,0687E-03	2,8664E-03	-7,06
0,48	2,9804E-03	2,7949E-03	-6,64
0,51	2,8922E-03	2,7023E-03	-7,03
0,53	2,8040E-03	2,6349E-03	-6,42
0,55	2,7157E-03	2,5691E-03	-5,70
0,58	2,6275E-03	2,4840E-03	-5,78
0,60	2,5393E-03	2,4220E-03	-4,84
0,62	2,4510E-03	2,3616E-03	-3,79
0,64	2,3628E-03	2,2834E-03	-3,48
0,66	2,2829E-03	2,2264E-03	-2,54
0,69	2,2079E-03	2,1708E-03	-1,71
0,71	2,1328E-03	2,0989E-03	-1,61
0,73	2,0578E-03	2,0465E-03	-0,55
0,75	1,9827E-03	1,9955E-03	0,64
0,78	1,9076E-03	1,9294E-03	1,13
0,80	1,8326E-03	1,8812E-03	2,58
0,82	1,7575E-03	1,8343E-03	4,19
0,85	1,6825E-03	1,7735E-03	5,13
0,87	1,6103E-03	1,7293E-03	6,88
0,89	1,5519E-03	1,6861E-03	7,96
0,92	1,4934E-03	1,6302E-03	8,39
0,94	1,4349E-03	1,5896E-03	9,73
0,96	1,3764E-03	1,5499E-03	11,19
0,99	1,3179E-03	1,4986E-03	12,06
1,01	1,2594E-03	1,4612E-03	13,81

**Tabela A.32:** Perfis de fração mássica na saída do canal retangular para  $\phi_w = 0,01008$  (Figura 5.30)

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação: 0,01008	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica: 0,001008	desvio
0	1,0079E-02	1,0080E-02	0,01
0,02	9,8749E-03	9,8285E-03	-0,47
0,05	9,6710E-03	9,5029E-03	-1,77
0,07	9,4671E-03	9,2657E-03	-2,17
0,09	9,2632E-03	9,0345E-03	-2,53
0,12	9,0594E-03	8,7352E-03	-3,71
0,14	8,8555E-03	8,5173E-03	-3,97
0,16	8,6516E-03	8,3047E-03	-4,18
0,19	8,4477E-03	8,0296E-03	-5,21
0,21	8,2438E-03	7,8292E-03	-5,30
0,23	8,0437E-03	7,6339E-03	-5,37
0,25	7,8467E-03	7,3810E-03	-6,31
0,27	7,6498E-03	7,1968E-03	-6,29
0,29	7,4528E-03	7,0172E-03	-6,21
0,32	7,2559E-03	6,7847E-03	-6,94
0,34	7,0589E-03	6,6154E-03	-6,70
0,37	6,8619E-03	6,3963E-03	-7,28
0,39	6,6650E-03	6,2367E-03	-6,87
0,41	6,4680E-03	6,0810E-03	-6,36
0,44	6,2724E-03	5,8796E-03	-6,68
0,46	6,0913E-03	5,7329E-03	-6,25
0,48	5,9102E-03	5,5898E-03	-5,73
0,51	5,7291E-03	5,4046E-03	-6,00
0,53	5,5480E-03	5,2698E-03	-5,28
0,55	5,3668E-03	5,1383E-03	-4,45
0,58	5,1857E-03	4,9680E-03	-4,38
0,60	5,0046E-03	4,8441E-03	-3,31
0,62	4,8235E-03	4,7232E-03	-2,12
0,64	4,6423E-03	4,5667E-03	-1,65
0,66	4,4773E-03	4,4528E-03	-0,55
0,69	4,3217E-03	4,3417E-03	0,46
0,71	4,1662E-03	4,1978E-03	0,75
0,73	4,0106E-03	4,0931E-03	2,02
0,75	3,8550E-03	3,9910E-03	3,41
0,78	3,6994E-03	3,8587E-03	4,13
0,80	3,5438E-03	3,7624E-03	5,81
0,82	3,3882E-03	3,6686E-03	7,64
0,85	3,2326E-03	3,5470E-03	8,86
0,87	3,0829E-03	3,4585E-03	10,86
0,89	2,9609E-03	3,3722E-03	12,20
0,92	2,8390E-03	3,2605E-03	12,93
0,94	2,7170E-03	3,1791E-03	14,54
0,96	2,5951E-03	3,0998E-03	16,28
0,99	2,4731E-03	2,9971E-03	17,48
1,01	2,3512E-03	2,9223E-03	19,54



**Tabela A.33:** Perfis de fração mássica na saída do canal retangular para  $\phi_w = 0,01512$  (Figura 5.30)

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação: 0,01512	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica: 0,01512	desvio
0	1,5118E-02	1,5120E-02	0,01
0,02	1,4811E-02	1,4743E-02	-0,46
0,05	1,4505E-02	1,4254E-02	-1,76
0,07	1,4198E-02	1,3899E-02	-2,15
0,09	1,3891E-02	1,3552E-02	-2,50
0,12	1,3585E-02	1,3103E-02	-3,68
0,14	1,3278E-02	1,2776E-02	-3,93
0,16	1,2971E-02	1,2457E-02	-4,13
0,19	1,2665E-02	1,2044E-02	-5,15
0,21	1,2358E-02	1,1744E-02	-5,23
0,23	1,2056E-02	1,1451E-02	-5,29
0,25	1,1759E-02	1,1071E-02	-6,21
0,27	1,1462E-02	1,0795E-02	-6,18
0,29	1,1165E-02	1,0526E-02	-6,07
0,32	1,0868E-02	1,0177E-02	-6,79
0,34	1,0571E-02	9,9232E-03	-6,53
0,37	1,0274E-02	9,5944E-03	-7,08
0,39	9,9773E-03	9,3550E-03	-6,65
0,41	9,6802E-03	9,1216E-03	-6,12
0,44	9,3852E-03	8,8194E-03	-6,42
0,46	9,1112E-03	8,5993E-03	-5,95
0,48	8,8371E-03	8,3847E-03	-5,40
0,51	8,5630E-03	8,1069E-03	-5,63
0,53	8,2890E-03	7,9047E-03	-4,86
0,55	8,0149E-03	7,7074E-03	-3,99
0,58	7,7408E-03	7,4521E-03	-3,87
0,60	7,4668E-03	7,2661E-03	-2,76
0,62	7,1927E-03	7,0848E-03	-1,52
0,64	6,9186E-03	6,8501E-03	-1,00
0,66	6,6685E-03	6,6792E-03	0,16
0,69	6,4324E-03	6,5125E-03	1,23
0,71	6,1963E-03	6,2967E-03	1,60
0,73	5,9602E-03	6,1396E-03	2,92
0,75	5,7241E-03	5,9864E-03	4,38
0,78	5,4880E-03	5,7881E-03	5,18
0,80	5,2519E-03	5,6437E-03	6,94
0,82	5,0158E-03	5,5028E-03	8,85
0,85	4,7797E-03	5,3205E-03	10,16
0,87	4,5525E-03	5,1878E-03	12,25
0,89	4,3672E-03	5,0583E-03	13,66
0,92	4,1818E-03	4,8907E-03	14,50
0,94	3,9965E-03	4,7687E-03	16,19
0,96	3,8112E-03	4,6497E-03	18,03
0,99	3,6259E-03	4,4957E-03	19,35
1,01	3,4406E-03	4,3835E-03	21,51

**Tabela A.34:** Perfis de fração mássica na saída do canal retangular para  $\phi_w = 0,02016$  (Figura 5.30)

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação: 0,02016	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica: 0,02016	desvio
0	2,0158E-02	2,0160E-02	0,01
0,02	1,9748E-02	1,9657E-02	-0,46
0,05	1,9338E-02	1,9006E-02	-1,75
0,07	1,8929E-02	1,8531E-02	-2,15
0,09	1,8519E-02	1,8069E-02	-2,49
0,12	1,8109E-02	1,7470E-02	-3,66
0,14	1,7700E-02	1,7035E-02	-3,91
0,16	1,7290E-02	1,6609E-02	-4,10
0,19	1,6881E-02	1,6059E-02	-5,12
0,21	1,6471E-02	1,5658E-02	-5,19
0,23	1,6068E-02	1,5268E-02	-5,24
0,25	1,5671E-02	1,4762E-02	-6,16
0,27	1,5274E-02	1,4394E-02	-6,12
0,29	1,4877E-02	1,4034E-02	-6,00
0,32	1,4479E-02	1,3569E-02	-6,70
0,34	1,4082E-02	1,3231E-02	-6,43
0,37	1,3685E-02	1,2793E-02	-6,98
0,39	1,3288E-02	1,2473E-02	-6,53
0,41	1,2891E-02	1,2162E-02	-5,99
0,44	1,2496E-02	1,1759E-02	-6,27
0,46	1,2129E-02	1,1466E-02	-5,78
0,48	1,1762E-02	1,1180E-02	-5,21
0,51	1,1395E-02	1,0809E-02	-5,42
0,53	1,1028E-02	1,0540E-02	-4,63
0,55	1,0661E-02	1,0277E-02	-3,74
0,58	1,0294E-02	9,9361E-03	-3,60
0,60	9,9270E-03	9,6882E-03	-2,47
0,62	9,5600E-03	9,4464E-03	-1,20
0,64	9,1930E-03	9,1335E-03	-0,65
0,66	8,8578E-03	8,9056E-03	0,54
0,69	8,5412E-03	8,6833E-03	1,64
0,71	8,2247E-03	8,3957E-03	2,04
0,73	7,9081E-03	8,1862E-03	3,40
0,75	7,5915E-03	7,9819E-03	4,89
0,78	7,2749E-03	7,7175E-03	5,73
0,80	6,9584E-03	7,5249E-03	7,53
0,82	6,6418E-03	7,3371E-03	9,48
0,85	6,3252E-03	7,0940E-03	10,84
0,87	6,0206E-03	6,9170E-03	12,96
0,89	5,7719E-03	6,7444E-03	14,42
0,92	5,5233E-03	6,5210E-03	15,30
0,94	5,2747E-03	6,3583E-03	17,04
0,96	5,0261E-03	6,1996E-03	18,93
0,99	4,7775E-03	5,9942E-03	20,30
1,01	4,5288E-03	5,8447E-03	22,51

**Tabela A.35:** Perfis de fração mássica na saída do canal retangular para  $\phi_w = 0,0252$  (Figura 5.30)

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação: 0,0252	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica: 0,0252	desvio
0	2,5197E-02	2,5200E-02	0,01
0,02	2,4685E-02	2,4728E-02	0,17
0,05	2,4173E-02	2,4112E-02	-0,25
0,07	2,3660E-02	2,3660E-02	0,00
0,09	2,3148E-02	2,3217E-02	0,30
0,12	2,2636E-02	2,2639E-02	0,01
0,14	2,2124E-02	2,2214E-02	0,41
0,16	2,1612E-02	2,1798E-02	0,85
0,19	2,1099E-02	2,1255E-02	0,74
0,21	2,0587E-02	2,0857E-02	1,29
0,23	2,0083E-02	2,0466E-02	1,87
0,25	1,9586E-02	1,9957E-02	1,86
0,27	1,9089E-02	1,9583E-02	2,52
0,29	1,8592E-02	1,9216E-02	3,25
0,32	1,8095E-02	1,8737E-02	3,43
0,34	1,7598E-02	1,8386E-02	4,29
0,37	1,7101E-02	1,7928E-02	4,61
0,39	1,6603E-02	1,7592E-02	5,62
0,41	1,6106E-02	1,7263E-02	6,70
0,44	1,5612E-02	1,6833E-02	7,25
0,46	1,5152E-02	1,6517E-02	8,27
0,48	1,4692E-02	1,6208E-02	9,35
0,51	1,4232E-02	1,5804E-02	9,95
0,53	1,3772E-02	1,5508E-02	11,19
0,55	1,3312E-02	1,5217E-02	12,52
0,58	1,2852E-02	1,4838E-02	13,39
0,60	1,2392E-02	1,4560E-02	14,89
0,62	1,1932E-02	1,4288E-02	16,49
0,64	1,1472E-02	1,3932E-02	17,66
0,66	1,1052E-02	1,3671E-02	19,16
0,69	1,0655E-02	1,3415E-02	20,57
0,71	1,0258E-02	1,3080E-02	21,58
0,73	9,8605E-03	1,2835E-02	23,18
0,75	9,4633E-03	1,2595E-02	24,86
0,78	9,0661E-03	1,2281E-02	26,18
0,80	8,6689E-03	1,2051E-02	28,07
0,82	8,2717E-03	1,1825E-02	30,05
0,85	7,8745E-03	1,1531E-02	31,71
0,87	7,4922E-03	1,1315E-02	33,78
0,89	7,1801E-03	1,1103E-02	35,33
0,92	6,8680E-03	1,0826E-02	36,56
0,94	6,5559E-03	1,0623E-02	38,29
0,96	6,2438E-03	1,0424E-02	40,10
0,99	5,9317E-03	1,0165E-02	41,64
1,01	5,6196E-03	9,9742E-03	43,66

**Tabela A.36:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 25% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,1% (Figura 5.31).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ ) Simulação-25% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ ) Solução Analítica-25% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	1,9774E-04	2,2784E-04	13,21
0,15	2,0749E-04	1,9904E-04	-4,25
0,2	2,1152E-04	1,8084E-04	-16,97
0,25	2,1304E-04	1,6788E-04	-26,90
0,3	2,1331E-04	1,5798E-04	-35,03
0,35	2,1292E-04	1,5006E-04	-41,89
0,4	2,1220E-04	1,4353E-04	-47,84
0,45	2,1133E-04	1,3801E-04	-53,13
0,5	2,1041E-04	1,3324E-04	-57,91
0,55	2,0949E-04	1,2908E-04	-62,30
0,6	2,0860E-04	1,2539E-04	-66,37
0,65	2,0778E-04	1,2209E-04	-70,19
0,7	2,0705E-04	1,1911E-04	-73,84
0,75	2,0643E-04	1,1640E-04	-77,35
0,8	2,0593E-04	1,1392E-04	-80,77
0,85	2,0555E-04	1,1164E-04	-84,12
0,9	2,0525E-04	1,0954E-04	-87,38
0,95	2,0500E-04	1,0758E-04	-90,56
1,00	2,0447E-04	1,0575E-04	-93,34

**Tabela A.37:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 50% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,1% (Figura 5.31).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ ) Simulação-50% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ ) Solução Analítica-50% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	7,5425E-04	5,7719E-04	-30,68
0,15	7,1970E-04	5,0423E-04	-42,73
0,2	6,9049E-04	4,5812E-04	-50,72
0,25	6,6622E-04	4,2528E-04	-56,65
0,3	6,4581E-04	4,0020E-04	-61,37
0,35	6,2841E-04	3,8016E-04	-65,30
0,4	6,1333E-04	3,6361E-04	-68,68
0,45	6,0010E-04	3,4961E-04	-71,65
0,5	5,8832E-04	3,3755E-04	-74,29
0,55	5,7771E-04	3,2699E-04	-76,68
0,6	5,6805E-04	3,1764E-04	-78,83
0,65	5,5915E-04	3,0928E-04	-80,79
0,7	5,5086E-04	3,0173E-04	-82,57
0,75	5,4303E-04	2,9487E-04	-84,16
0,8	5,3551E-04	2,8860E-04	-85,56
0,85	5,2818E-04	2,8282E-04	-86,75
0,9	5,2087E-04	2,7749E-04	-87,71

0,95	5,1342E-04	2,7253E-04	-88,39
1,00	5,0529E-04	2,6791E-04	-88,60

**Tabela A.38:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 75% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,1% (Figura 5.31).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ ) Simulação-75% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ ) Solução Analítica-75% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	1,3889E-03	9,8933E-04	-40,39
0,15	1,2770E-03	8,6426E-04	-47,76
0,2	1,1967E-03	7,8523E-04	-52,40
0,25	1,1350E-03	7,2894E-04	-55,70
0,3	1,0854E-03	6,8596E-04	-58,23
0,35	1,0442E-03	6,5161E-04	-60,25
0,4	1,0091E-03	6,2324E-04	-61,91
0,45	1,0091E-03	5,9924E-04	-68,40
0,5	9,5133E-04	5,7856E-04	-64,43
0,55	9,2662E-04	5,6047E-04	-65,33
0,6	9,0377E-04	5,4445E-04	-66,00
0,65	8,8230E-04	5,3011E-04	-66,44
0,7	8,6177E-04	5,1718E-04	-66,63
0,75	8,4189E-04	5,0542E-04	-66,57
0,8	8,2242E-04	4,9466E-04	-66,26
0,85	8,0320E-04	4,8477E-04	-65,69
0,9	7,8410E-04	4,7562E-04	-64,86
0,95	7,6505E-04	4,6712E-04	-63,78
1,00	7,4585E-04	4,5921E-04	-62,42

**Tabela A.39:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 25% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,2% (Figura 5.32).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ ) Simulação-25% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $m^3 \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$ ) Solução Analítica-25% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	1,2779E-03	9,1128E-04	-40,23
0,15	1,1735E-03	7,9608E-04	-47,41
0,2	1,0981E-03	7,2328E-04	-51,82
0,25	1,0398E-03	6,7144E-04	-54,86
0,3	9,9254E-04	6,3185E-04	-57,09
0,35	9,5297E-04	6,0020E-04	-58,78
0,4	9,1893E-04	5,7407E-04	-60,07
0,45	8,8899E-04	5,5197E-04	-61,06
0,5	8,6208E-04	5,3292E-04	-61,77
0,55	8,3743E-04	5,1626E-04	-62,21
0,6	8,1444E-04	5,0150E-04	-62,40
0,65	7,9268E-04	4,8829E-04	-62,34
0,7	7,7181E-04	4,7638E-04	-62,02

0,75	7,5158E-04	4,6555E-04	-61,44
0,8	7,3183E-04	4,5564E-04	-60,62
0,85	7,1247E-04	4,4653E-04	-59,56
0,9	6,9341E-04	4,3810E-04	-58,28
0,95	6,7465E-04	4,3027E-04	-56,80
1,00	6,5632E-04	4,2298E-04	-55,17

**Tabela A.40:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 50% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,2% (Figura 5.32).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação-50% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica-50% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	3,0591E-03	2,3089E-03	-32,49
0,15	2,6639E-03	2,0170E-03	-32,07
0,2	2,3884E-03	1,8326E-03	-30,33
0,25	2,1786E-03	1,7012E-03	-28,06
0,3	2,0122E-03	1,6009E-03	-25,69
0,35	1,8777E-03	1,5207E-03	-23,48
0,4	1,7673E-03	1,4545E-03	-21,51
0,45	1,6755E-03	1,3985E-03	-19,81
0,5	1,5982E-03	1,3502E-03	-18,36
0,55	1,5320E-03	1,3080E-03	-17,12
0,6	1,4745E-03	1,2706E-03	-16,04
0,65	1,4238E-03	1,2372E-03	-15,08
0,7	1,3784E-03	1,2070E-03	-14,20
0,75	1,3374E-03	1,1795E-03	-13,38
0,8	1,2997E-03	1,1544E-03	-12,58
0,85	1,2649E-03	1,1313E-03	-11,80
0,9	1,2325E-03	1,1100E-03	-11,04
0,95	1,2022E-03	1,0902E-03	-10,28
1,00	1,1744E-03	1,0717E-03	-9,58

**Tabela A.41:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 75% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,2% (Figura 5.32).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação-75% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica-75% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	4,5499E-03	3,9565E-03	-15,00
0,15	3,7912E-03	3,4563E-03	-9,69
0,2	3,3336E-03	3,1403E-03	-6,16
0,25	3,0298E-03	2,9152E-03	-3,93
0,3	2,8131E-03	2,7433E-03	-2,55
0,35	2,6493E-03	2,6059E-03	-1,67
0,4	2,5195E-03	2,4924E-03	-1,09
0,45	2,4126E-03	2,3965E-03	-0,67
0,5	2,3216E-03	2,3138E-03	-0,34

0,55	2,2423E-03	2,2414E-03	-0,04
0,6	2,1717E-03	2,1773E-03	0,26
0,65	2,1078E-03	2,1200E-03	0,58
0,7	2,0492E-03	2,0683E-03	0,92
0,75	1,9949E-03	2,0213E-03	1,30
0,8	1,9442E-03	1,9782E-03	1,72
0,85	1,8966E-03	1,9387E-03	2,17
0,9	1,8517E-03	1,9021E-03	2,65
0,95	1,8091E-03	1,8681E-03	3,16
1,00	1,7698E-03	1,8364E-03	3,63

**Tabela A.42:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 25% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,3% (Figura 5.33).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação-25% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica-25% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	2,7297E-03	2,0503E-03	-33,13
0,15	2,3850E-03	1,7911E-03	-33,16
0,2	2,1433E-03	1,6274E-03	-31,70
0,25	1,9587E-03	1,5107E-03	-29,65
0,3	1,8114E-03	1,4216E-03	-27,42
0,35	1,6916E-03	1,3504E-03	-25,26
0,4	1,5926E-03	1,2916E-03	-23,30
0,45	1,5101E-03	1,2419E-03	-21,60
0,5	1,4402E-03	1,1990E-03	-20,11
0,55	1,3803E-03	1,1616E-03	-18,83
0,6	1,3283E-03	1,1283E-03	-17,72
0,65	1,2823E-03	1,0986E-03	-16,72
0,7	1,2113E-03	1,0718E-03	-13,01
0,75	1,2041E-03	1,0475E-03	-14,95
0,8	1,1701E-03	1,0252E-03	-14,14
0,85	1,1388E-03	1,0047E-03	-13,35
0,9	1,1097E-03	9,8570E-04	-12,58
0,95	1,0824E-03	9,6810E-04	-11,81
1,00	1,0576E-03	9,5169E-04	-11,13

**Tabela A.43:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 50% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,3% (Figura 5.33).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação-50% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica-50% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	5,1931E-03	5,1954E-03	0,04
0,15	4,4076E-03	4,5386E-03	2,89
0,2	3,9525E-03	4,1236E-03	4,15
0,25	3,6453E-03	3,8280E-03	4,77
0,3	3,4178E-03	3,6023E-03	5,12

0,35	3,2392E-03	3,4219E-03	5,34
0,4	3,0927E-03	3,2729E-03	5,51
0,45	2,9686E-03	3,1469E-03	5,67
0,5	2,8605E-03	3,0383E-03	5,85
0,55	2,7643E-03	2,9433E-03	6,08
0,6	2,6771E-03	2,8591E-03	6,37
0,65	2,5968E-03	2,7839E-03	6,72
0,7	2,5216E-03	2,7159E-03	7,16
0,75	2,4506E-03	2,6542E-03	7,67
0,8	2,3829E-03	2,5977E-03	8,27
0,85	2,3182E-03	2,5457E-03	8,94
0,9	2,2560E-03	2,4977E-03	9,68
0,95	2,1963E-03	2,4531E-03	10,47
1,00	2,1408E-03	2,4115E-03	11,23

**Tabela A.44:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 75% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,3% (Figura 5.33).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação-75% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica-75% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	7,9500E-03	8,9031E-03	10,71
0,15	6,9072E-03	7,7776E-03	11,19
0,2	6,2647E-03	7,0664E-03	11,35
0,25	5,8082E-03	6,5599E-03	11,46
0,3	5,4611E-03	6,1731E-03	11,53
0,35	5,1600E-03	5,8639E-03	12,00
0,4	4,8954E-03	5,6086E-03	12,72
0,45	4,6572E-03	5,3927E-03	13,64
0,5	4,4404E-03	5,2066E-03	14,72
0,55	4,2419E-03	5,0438E-03	15,90
0,6	4,0582E-03	4,8996E-03	17,17
0,65	3,8858E-03	4,7706E-03	18,55
0,7	3,7215E-03	4,6542E-03	20,04
0,75	3,5626E-03	4,5484E-03	21,67
0,8	3,4077E-03	4,4516E-03	23,45
0,85	3,2560E-03	4,3625E-03	25,36
0,9	3,1080E-03	4,2802E-03	27,39
0,95	2,9645E-03	4,2037E-03	29,48
1,00	2,8271E-03	4,1325E-03	31,59



**Tabela A.45:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 25% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,4% (Figura 5.34).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação-25% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica-25% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	4,1070E-03	3,6451E-03	-12,67
0,15	3,4321E-03	3,1843E-03	-7,78
0,2	3,0282E-03	2,8931E-03	-4,67
0,25	2,7608E-03	2,6858E-03	-2,79
0,3	2,5695E-03	2,5274E-03	-1,67
0,35	2,4243E-03	2,4008E-03	-0,98
0,4	2,3083E-03	2,2963E-03	-0,52
0,45	2,2124E-03	2,2079E-03	-0,20
0,5	2,1304E-03	2,1317E-03	0,06
0,55	2,0588E-03	2,0650E-03	0,30
0,6	1,9950E-03	2,0060E-03	0,55
0,65	1,9376E-03	1,9532E-03	0,80
0,7	1,8853E-03	1,9055E-03	1,06
0,75	1,8365E-03	1,8622E-03	1,38
0,8	1,7913E-03	1,8226E-03	1,72
0,85	1,7492E-03	1,7861E-03	2,07
0,9	1,7093E-03	1,7524E-03	2,46
0,95	1,6715E-03	1,7211E-03	2,88
1,00	1,6367E-03	1,6919E-03	3,26

**Tabela A.46:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 50% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,4% (Figura 5.34).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação-50% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) 1) Solução Analítica-50% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	8,2151E-03	9,2358E-03	11,05
0,15	7,1435E-03	8,0682E-03	11,46
0,2	6,4794E-03	7,3305E-03	11,61
0,25	6,0032E-03	6,8050E-03	11,78
0,3	5,6265E-03	6,4038E-03	12,14
0,35	5,3063E-03	6,0830E-03	12,77
0,4	5,0232E-03	5,8182E-03	13,66
0,45	4,7662E-03	5,5942E-03	14,80
0,5	4,5310E-03	5,4011E-03	16,11
0,55	4,3150E-03	5,2322E-03	17,53
0,6	4,1146E-03	5,0827E-03	19,05
0,65	3,9265E-03	4,9489E-03	20,66
0,7	3,7474E-03	4,8281E-03	22,38
0,75	3,5749E-03	4,7183E-03	24,23
0,8	3,4075E-03	4,6179E-03	26,21
0,85	3,2450E-03	4,5255E-03	28,30
0,9	3,0874E-03	4,4401E-03	30,47

0,95	2,9356E-03	4,3608E-03	32,68
1,00	2,7962E-03	4,2869E-03	34,77

**Tabela A.47:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 75% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,4% (Figura 5.34).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação-75% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica-75% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	1,3610E-02	1,5830E-02	14,02
0,15	1,1702E-02	1,3829E-02	15,38
0,2	1,0280E-02	1,2564E-02	18,18
0,25	9,0772E-03	1,1664E-02	22,18
0,3	8,0227E-03	1,0976E-02	26,91
0,35	7,0888E-03	1,0426E-02	32,01
0,4	6,2608E-03	9,9723E-03	37,22
0,45	5,5279E-03	9,5884E-03	42,35
0,5	4,8795E-03	9,2575E-03	47,29
0,55	4,3069E-03	8,9680E-03	51,97
0,6	3,8012E-03	8,7116E-03	56,37
0,65	3,3537E-03	8,4823E-03	60,46
0,7	2,9571E-03	8,2753E-03	64,27
0,75	2,6062E-03	8,0872E-03	67,77
0,8	2,2956E-03	7,9151E-03	71,00
0,85	2,0217E-03	7,7567E-03	73,94
0,9	1,7820E-03	7,6103E-03	76,58
0,95	1,5729E-03	7,4744E-03	78,96
1,00	1,4000E-03	7,3477E-03	80,95

**Tabela A.48:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 25% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,5% (Figura 5.35).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação-25% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) 1) Solução Analítica-25% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	5,3737E-03	5,6961E-03	5,66
0,15	4,6202E-03	4,9760E-03	7,15
0,2	4,1704E-03	4,5210E-03	7,75
0,25	3,8604E-03	4,1969E-03	8,02
0,3	3,6293E-03	3,9494E-03	8,11
0,35	3,4318E-03	3,7516E-03	8,52
0,4	3,3000E-03	3,5883E-03	8,03
0,45	3,1760E-03	3,4501E-03	7,95
0,5	3,0698E-03	3,3311E-03	7,84
0,55	2,9784E-03	3,2269E-03	7,70
0,6	2,8995E-03	3,1347E-03	7,50
0,65	2,8316E-03	3,0521E-03	7,23
0,7	2,7728E-03	2,9777E-03	6,88

0,75	2,7206E-03	2,9100E-03	6,51
0,8	2,6721E-03	2,8480E-03	6,18
0,85	2,6249E-03	2,7910E-03	5,95
0,9	2,5770E-03	2,7384E-03	5,89
0,95	2,5273E-03	2,6895E-03	6,03
1,00	2,4769E-03	2,6439E-03	6,32

**Tabela A.49:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 50% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,5% (Figura 5.35).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação-50% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica-50% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	1,2470E-02	1,4430E-02	13,58
0,15	1,0792E-02	1,2606E-02	14,39
0,2	9,5946E-03	1,1453E-02	16,23
0,25	8,5988E-03	1,0632E-02	19,12
0,3	7,7229E-03	1,0005E-02	22,81
0,35	6,9388E-03	9,5040E-03	26,99
0,4	6,2332E-03	9,0902E-03	31,43
0,45	5,5993E-03	8,7403E-03	35,94
0,5	5,0295E-03	8,4386E-03	40,40
0,55	4,5186E-03	8,1748E-03	44,72
0,6	4,0600E-03	7,9411E-03	48,87
0,65	3,6467E-03	7,7320E-03	52,84
0,7	3,2745E-03	7,5433E-03	56,59
0,75	2,9387E-03	7,3718E-03	60,14
0,8	2,6357E-03	7,2149E-03	63,47
0,85	2,6332E-03	7,0706E-03	62,76
0,9	2,1196E-03	6,9372E-03	69,45
0,95	1,9039E-03	6,8132E-03	72,06
1,00	1,8205E-03	6,6977E-03	72,82

**Tabela A.50:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 75% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,5% (Figura 5.35).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação-75% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica-75% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	1,9993E-02	2,4729E-02	19,15
0,15	1,5673E-02	2,1603E-02	27,45
0,2	1,2296E-02	1,9627E-02	37,35
0,25	9,6305E-03	1,8221E-02	47,14
0,3	7,5301E-03	1,7146E-02	56,08
0,35	5,8792E-03	1,6287E-02	63,90
0,4	4,5827E-03	1,5578E-02	70,58
0,45	3,5700E-03	1,4979E-02	76,17
0,5	2,7811E-03	1,4462E-02	80,77

0,55	2,1663E-03	1,4009E-02	84,54
0,6	1,6884E-03	1,3609E-02	87,59
0,65	1,3176E-03	1,3251E-02	90,06
0,7	1,0319E-03	1,2927E-02	92,02
0,75	8,0996E-04	1,2633E-02	93,59
0,8	6,3854E-04	1,2365E-02	94,84
0,85	5,0691E-04	1,2117E-02	95,82
0,9	4,0798E-04	1,1888E-02	96,57
0,95	3,3177E-04	1,1676E-02	97,16
1,00	2,7592E-04	1,1478E-02	97,60

**Tabela A.51:** Fluxo de permeado médio no comprimento *versus* intensidade turbulenta para diferentes escalas, com  $\phi_w = 20\phi_B$  (Figura 5.36)

Intensidade de turbulência (%)	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ), Simulação		
	25% do diâmetro hidráulico	50% do diâmetro hidráulico	75% do diâmetro hidráulico
0,1	1,5041E-04	5,1085E-04	8,9843E-04
0,2	8,2587E-04	1,7928E-03	2,7208E-03
0,3	1,6078E-03	3,3255E-03	5,0755E-03
0,4	2,4934E-03	5,1875E-03	6,5324E-03
0,5	3,5767E-03	6,3698E-03	6,8565E-03

**Tabela A.52:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 25% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,25% (Figura 5.37).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ) Simulação-25% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \text{m}^{-2} \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica-25% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	2,0063E-03	1,3840E-03	-44,96
0,15	1,7948E-03	1,2090E-03	-48,45
0,2	1,6477E-03	1,0985E-03	-50,00
0,25	1,5353E-03	1,0198E-03	-50,56
0,3	1,4441E-03	9,5962E-04	-50,49
0,35	1,3670E-03	9,1156E-04	-49,96
0,4	1,2999E-03	8,7187E-04	-49,09
0,45	1,2406E-03	8,3831E-04	-47,99
0,5	1,1874E-03	8,0938E-04	-46,71
0,55	1,1392E-03	7,8407E-04	-45,29
0,6	1,0953E-03	7,6165E-04	-43,81
0,65	1,0550E-03	7,4160E-04	-42,26
0,7	1,0179E-03	7,2350E-04	-40,69
0,75	9,8369E-04	7,0706E-04	-39,12
0,8	9,5199E-04	6,9201E-04	-37,57
0,85	9,2257E-04	6,7816E-04	-36,04
0,9	8,9513E-04	6,6537E-04	-34,53
0,95	8,6949E-04	6,5348E-04	-33,06
1,00	8,4604E-04	6,4240E-04	-31,70

**Tabela A.53:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 50% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,25% (Figura 5.37).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação-50% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica-50% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	4,2158E-03	3,5066E-03	-20,22
0,15	3,5247E-03	3,0633E-03	-15,06
0,2	3,0933E-03	2,7832E-03	-11,14
0,25	2,8021E-03	2,5837E-03	-8,45
0,3	2,5933E-03	2,4314E-03	-6,66
0,35	2,4361E-03	2,3096E-03	-5,48
0,4	2,3123E-03	2,2090E-03	-4,67
0,45	2,2112E-03	2,1240E-03	-4,11
0,5	2,1260E-03	2,0507E-03	-3,67
0,55	2,0522E-03	1,9866E-03	-3,30
0,6	1,9869E-03	1,9298E-03	-2,96
0,65	1,8285E-03	1,8790E-03	2,69
0,7	1,8753E-03	1,8331E-03	-2,30
0,75	1,8264E-03	1,7914E-03	-1,95
0,8	1,7810E-03	1,7533E-03	-1,58
0,85	1,7386E-03	1,7182E-03	-1,19
0,9	1,6990E-03	1,6858E-03	-0,78
0,95	1,6616E-03	1,6557E-03	-0,36
1,00	1,6274E-03	1,6276E-03	0,01

**Tabela A.54:** Fluxo de permeado *versus* comprimento adimensional do canal para a escala de turbulência de 75% do diâmetro hidráulico e intensidade turbulenta de 0,25% (Figura 5.37).

$\bar{y}$	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Simulação-75% do diâmetro hidráulico	Fluxo permeado ( $\text{m}^3 \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ) Solução Analítica-75% do diâmetro hidráulico	desvio
0,1	5,7549E-03	6,0105E-03	4,25
0,15	4,9428E-03	5,2507E-03	5,86
0,2	4,4586E-03	4,7706E-03	6,54
0,25	4,1241E-03	4,4286E-03	6,88
0,3	3,8742E-03	4,1675E-03	7,04
0,35	3,6778E-03	3,9587E-03	7,10
0,4	3,5171E-03	3,7864E-03	7,11
0,45	3,3817E-03	3,6406E-03	7,11
0,5	3,2343E-03	3,5150E-03	7,99
0,55	3,1611E-03	3,4051E-03	7,16
0,6	3,0701E-03	3,3077E-03	7,18
0,65	2,9899E-03	3,2206E-03	7,16
0,7	2,9192E-03	3,1420E-03	7,09
0,75	2,8566E-03	3,0706E-03	6,97
0,8	2,7997E-03	3,0053E-03	6,84
0,85	2,7464E-03	2,9451E-03	6,75
0,9	2,6945E-03	2,8896E-03	6,75
0,95	2,6421E-03	2,8379E-03	6,90
1,00	2,5899E-03	2,7898E-03	7,17