

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA UNIDADE ACADÊMICA DE ENGENHARIA QUÍMICA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

RANIERE HENRIQUE PEREIRA LIRA

AVALIAÇÃO DOS EFEITOS FLUIDODINÂMICOS EM MÓDULOS DE MEMBRANAS PLANA, CURVA E ESPIRAL VIA CFD

CAMPINA GRANDE – PB 2020

RANIERE HENRIQUE PEREIRA LIRA

AVALIAÇÃO DOS EFEITOS FLUIDODINÂMICOS EM MÓDULOS DE MEMBRANAS PLANA, CURVA E ESPIRAL VIA CFD

Tese apresentada ao programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande – UFCG, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos – Modelagem e Simulação

Orientador: Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto

CAMPINA GRANDE – PB 2020

 L768a Lira, Raniere Henrique Pereira. Avaliação dos efeitos fluidodinâmicos em módulos de membranas plana, curva e espiral via CFD / Raniere Henrique Pereira Lira. - Campina Grande, 2020. 168 f. : il. color.
 Tese (Doutorado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2020. "Orientação: Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto. Referências.
 Membrana. 2. Modelo da Difusão. 3. Modelagem CFD. 4. Pressão Transmembranica. 5. Concentração de Polarização. I. Farias Neto, Severino Rodrigues de. II. Título.

RANIERE HENRIQUE PEREIRA LIRA

AVALIAÇÃO DOS EFEITOS FLUIDODINÂMICOS EM MÓDULOS DE MEMBRANAS PLANA, CURVA E ESPIRAL VIA CFD

Tese de Doutorado aprovada, em <u>30 / 10 / 2020</u>, pela banca examinadora constituída dos seguintes professores:

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto (Orientador) UFCG/CCT/UAEQ

Prof. Dr. José Nilton Silva (Examinador interno) UFCG/CCT/UAEQ

rias KINAHMEN

Prof. Dra. Fabiana Pimentel Macedo Farias (Examinador externo) UFCG/CDSA/UATEC

Prof. Dr. Acto de Lima Cunha (Examinador externo) UFS

(anio

Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira (Examinador externo) UEPB/CCT/DESA

Dedico este trabalho à minha filha Laura S. Lira.

AGRADECIMENTOS

À Deus que está ao nosso lado, nos protegendo e dando força para prosseguirmos na jornada, iluminando os nossos caminhos.

Ao meu orientador Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto, pela amizade, orientação, conhecimentos transmitidos e dedicação.

Ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química (PPGEQ/UAEQ/UFCG), pelo apoio fundamental para a conclusão deste trabalho.

Aos professores do PPGEQ, pelos conhecimentos prestados durante as disciplinas.

Aos membros da banca examinadora, pela avaliação e contribuição dada para melhoria deste trabalho.

A minha família, pelo incentivo, atenção e motivação.

A minha esposa Janaina S. Santos, pela parceria, amor, compreensão, palavras de apoio e atenção durante toda a nossa caminhada.

Aos amigos do Laboratório de Pesquisa em Fluidodinâmica e Imagem (LPFI) Boniek Evangelista, Danilo Pablo, Natalya Bonfim, Daniel Lira, Alysson Dantas, Hortência Luna, Gicélia Moreira, Sirlene Nunes, Diego Diniz, Marcella Aragão, Mábia Ruana, pela troca de experiências e disponibilidade em todos os momentos.

Aos amigos Shefora Henriques, Rosemarie Montenegro, Raphael Magalhães, Giovanne Monteiro, Elói Duarte, Sidinei Kleber e Nilton Silva, pela amizade e incentivo para realização deste trabalho.

A Universidade Federal de Alagoas – Campus Sertão, a todos os colegas e professores, pelo apoio no desenvolvimento e realização deste trabalho.

A todos que, de alguma forma, contribuíram com a realização deste trabalho.

"Um dia é preciso parar de sonhar, tirar os planos das gavetas e, de algum modo, começar."

Amyr Klink

LIRA, R. H. P., **Avaliação dos efeitos fluidodinâmicos em módulos de membranas plana, curva e espiral via CFD**. 2020. 168f. Tese (Doutorado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande, Brasil, 2020.

RESUMO

Os processos de separação por membranas têm várias aplicações nos mais diversos setores da indústria, destacando-se a dessalinização por osmose inversa (OI) para a produção de água potável a partir da água salobra e/ou do mar, usando como força motriz a pressão transmembranica numa membrana semipermeável. Este trabalho teve por objetivo estudar os efeitos fluidodinâmicos em um módulo de membrana espiral. Foi desenvolvido um modelo matemático para o processo de separação, adotando o modelo da difusão da solução com base nas equações de conservação da massa, quantidade de movimento e das espécies químicas. Para este estudo foi utilizando o pacote comercial Ansys CFX® 15.0. O modelo foi aplicado a um módulo de membrana plana em duas e três dimensões onde os resultados numéricos tiveram uma boa concordância com resultados de trabalhos reportados na literatura específica. Foi realizado um estudo de gualidade da malha através do Índice de Convergência de Malha (ICM) para analisar a independência dos resultados numéricos com a malha utilizada. Foram estudadas três variáveis do processo: velocidade de alimentação, pressão transmembranica e concentração inicial da solução de NaCl. O modelo foi aplicado a diferentes curvaturas do módulo de membrana indicou uma melhoria no desempenho da membrana com a intensificação da curvatura do módulo. A configuração da membrana em espiral apresentou um aumento relevante na capacidade de produção do módulo de membrana. A vazão mássica de permeado teve dependência com a concentração inicial de NaCl, pressão transmembranica e com o número de voltas da membrana. Os resultados mostraram que variações nas grandezas envolvidas no processo de separação, como velocidade, concentração inicial e pressão transmembranica, influenciam no desenvolvimento da camada limite de concentração de polarização, assim como no fluxo de permeado. O aumento da velocidade de alimentação e redução da concentração inicial favorecem a redução da camada polarizada, e o aumento da pressão transmembranica eleva o fluxo de permeado. Os resultados das simulações apresentaram uma boa representatividade dos fenômenos de transferência envolvidos no processo de dessalinização.

Palavras-chave: Membrana, Modelo da difusão, Modelagem CFD, Pressão transmembranica, Concentração de polarização.

LIRA, R. H. P., **Evaluation of fluid dynamic effects in flat, curve and spiral membrane modules through CFD.** 2020. 168f. Thesis (Doctoral), Graduate Program in Chemical Engineering, Federal University of Campina Grande, Brazil, 2020.

ABSTRACT

The membrane separation processes have several applications in the most diverse sectors of the industry, standing out the desalination by reverse osmosis (RO) for the production of drinking water from brackish and / or sea water, using as driving force the transmembrane pressure in a semipermeable membrane. This work had the aim to study the fluid dynamics effects in a spiral membrane module. A mathematical model was developed for the separation process, adopting the solution diffusion model based on the equations of conservation of the mass, amount of movement and of the chemical species. For this study was used the commercial package Ansys CFX[®] 15.0. The model was applied to a flat membrane module in two and three dimensions where the numerical results had a good agreement with the results of studies reported in the specific literature. A mesh quality study was carried out using the Grid Convergence Index (GCI) to analyze the independence of the numerical results with the mesh used. Three process variables were studied: feed velocity, transmembrane pressure and initial concentration of the solution of NaCI. The model was applied to different curvatures of the membrane module indicated an improvement in membrane performance with the intensification of the curvature of the module. The configuration of the spiral membrane showed a relevant increase in the production capacity of the membrane module. The permeate mass flow depended on the initial NaCl concentration, transmembrane pressure and the number of turns of the membrane. The results showed that variations in the quantities involved in the separation process, as velocity, initial concentration and transmembrane pressure, influence the development of the layer of polarization concentration, as well as the permeate flux. The increase of the feeding velocity and reduction of the initial concentration favor the reduction of the polarized layer, and the increase of the transmembrane pressure elevates the permeate flow. The results of the simulations showed a good representation of the transfer phenomena involved in the desalination process.

Keywords: Membrane, Diffusion model, CFD Modeling, Transmembrane pressure, Polarization concentration.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Representação esquemática de um sistema básico de filtração
pressurizado33
Figura 2.2: Sistema de osmose inversa34
Figura 2.3: Representação do processo de osmose e osmose inversa
Figura 2.4: Membrana em forma de espiral36
Figura 2.5: Representação das condições da camada limite na membrana/interface
em relação ao fluxo de alimentação40
Figura 3.1: Geometria usada na simulação 2D56
Figura 3.2: Detalhe das fronteiras e do domínio de estudo em vista isométrica para
módulo de membrana 2D59
Figura 3.3: Geometria da membrana plana tridimensional60
Figura 3.4: Geometria da membrana Curva162
Figura 3.5: Geometria da membrana Curva ₂ 63
Figura 3.6: Geometria da membrana Curva ₃ 64
Figura 3.7: Geometria da membrana Curva465
Figura 3.8: Geometria da membrana Curva ₅ 66
Figura 3.9: Geometria da membrana Curva ₆ 67
Figura 3.10: Geometria da membrana curvada em forma de espiral69
Figura 3.11: Geometria da membrana em espiral com uma volta70
Figura 3.12: Geometria da membrana em espiral com duas voltas71
Figura 3.13: Geometria da membrana em espiral com três voltas
Figura 3.14: Geometria da membrana em espiral com cinco voltas73
Figura 3.15: Domínio de estudo de uma membrana espiral com uma volta74
Figura 3.16: Detalhe do domínio de estudo para o módulo de membrana plana 3D.
Figura 4.1: Detalhe da malha gerada para o domínio bidimensional
Figura 4.2: Perfil de velocidade axial nos canais de concentrado e permeado84
Figura 4.3: Perfil da fração mássica de NaCl próximo da membrana
Figura 4.4: Representação do fenômeno da concentração de polarização86
Figura 4.5: Perfil da fração mássica de NaCl nos canais de permeado e concentrado
para deferentes números de Reynolds87

Figura 4.6: Posição onde foi traçada a linha sobre a superfície da membrana (2D). Figura 4.7: Fração mássica de NaCl na superfície da membrana ao longo do canal Figura 4.8: Perfil da fração mássica de NaCl nos canais de permeado e concentrado Figura 4.9: Fração mássica de NaCl ao longo da superfície da membrana para diferentes pressões transmembranica (Re = 40)......90 Figura 4.10: Contornos da fração mássica de NaCl ao longo dos canais do módulo de membrana (Re = 8; ΔP_{TM} = 500 kPa).....91 Figura 4.11: Representação da malha do módulo de separação plana com membranas e detalhes das malhas (a) M1, (b) M2; (c) M3......94 Figura 4.12: Fluxo de permeado para diferentes malhas ($\bar{u} = 0,16$ m/s e Figura 4.13: Fluxo de permeado para diferentes malhas ($\bar{u} = 0,16$ m/s e Figura 4.14: Fluxo de permeado para diferentes malhas ($\bar{u} = 0.12$ m/s e Figura 4.15: Posições onde foram traçadas as linhas L1, L2, L3 e L4 no domínio de Figura 4.16: Perfil de concentração no canal de concentrado ao longo das linhas (a) L1, (b) L2, (c) L3 e (d) L4, para diferentes malhas ($\bar{u} = 0,16$ m/s e $\Delta P_{TM} = 998,7$ kPa)......99 Figura 4.17: Perfil de concentração no canal de concentrado ao longo das linhas (a) L1, (b) L2, (c) L3 e (d) L4, para diferentes malhas ($\bar{u} = 0,16$ m/s, $\Delta P_{TM} = 1198,7$ kPa). Figura 4.18: Perfil de concentração no canal de concentrado ao longo das linhas (a) L1, (b) L2, (c) L3 e (d) L4, para diferentes malhas ($\bar{u} = 0,12$ m/s, $\Delta P_{TM} = 1398,7$ kPa). Figura 4.19: Perfil de velocidade no canal de concentrado para malha M1 com ICM₂₁ em forma de barra de erro (L4, \bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 998,7 kPa)......103 Figura 4.20: Perfil de velocidade no canal de concentrado para malha M2 com ICM₃₂ em forma de barra de erro (L4, \bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 998,7 kPa)......104 Figura 4.28: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K1 e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa.

Figura 4.29: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K2 e $\Delta P_{TM} = 898,7$ kPa..112 Figura 4.30: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K2 e $\Delta P_{TM} = 998,7$ kPa..112 Figura 4.31: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K2 e $\Delta P_{TM} = 998,7$ kPa..112 Figura 4.31: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K2 e $\Delta P_{TM} = 1098,7$ kPa..113

Figura 4.32: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K2 e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa.

Figura 4.33: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K2 e $\Delta P_{TM} = 1298,7$ kPa.

Figura 4.34: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K2 e $\Delta P_{TM} = 1398,7$ kPa.

Figura 4.35: Fluxos de permeado numéricos e experimentais para diferentes velocidades média e pressões transmembranica.....116 Figura 4.36: Concentração na superfície da membrana em função do comprimento Figura 4.37: Campo de concentração no interior do módulo de membrana para os planos yz (\bar{u} = 0,14 m/s e ΔP_{TM} = 1398,7 kPa)......123 Figura 4.38: Campo de concentração no interior do módulo de membrana para o Figura 4.39: Campo de concentração ao longo da superfície da membrana para Figura 4.40: Campo de velocidade ao longo da superfície da membrana para \bar{u} = 0,14 m/s e ΔP_{TM} = 1398,7 kPa......125 Figura 4.41: Linhas de fluxo nos canais de concentrado e permeado para Figura 4.42: Campo de concentração de NaCl ao longo da superfície da membrana para os casos: (a) 01 (Conc. +x), (b) 05 (Conc. +z) e (c) 09 (Conc. -z), Figura 4.43: Vetor velocidade no canal de concentrado do módulo de membrana para os casos: (a) 01 (Conc. +x), (b) 05 (Conc. +z) e (c) 09 (Conc. -z), Figura 4.44: Fluxo de permeado em função da velocidade média para diferentes Figura 4.45: Fluxo de permeado em função da velocidade média para diferentes concentrações de alimentação: (a) 1 kg/m³, (b) 2 kg/m³, (c) 3 kg/m³ e (d) 5 kg/m³, Figura 4.46: Perfil de concentração sobre a membrana para diferentes velocidades Figura 4.47: Campo de concentração de NaCl ao longo da superfície da membrana para diferentes velocidades médias: (a) 0,10 m/s, (b) 0,12 m/s, (c) 0,14 m/s, (d) 0,16 m/s, (e) 0,18 m/s, (f) 0,20 m/s, (g) 0,22 m/s e (h) 0,24 m/s, respectivamente $(C_a = 3 \text{ kg/m}^3, \Delta P_{TM} = 1198,7 \text{ kPa}).....135$ Figura 4.48: Comportamento do fluxo de permeado em função do raio de curvatura

Figura 4.49: Comportamento da concentração de NaCl no permeado em função do Figura 4.50: Comportamento da concentração de NaCl no concentrado em função Figura 4.51: Comportamento da concentração de NaCl na superfície da membrana em função do raio de curvatura para \bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa......139 Figura 4.52: Campo vetorial de velocidade no canal de concentrado para diferentes raios de curvatura: (a) 55 mm, (b) 38 mm, (c) 25 mm, (d) 15,92 mm, (e) 10,61 mm e (f) 7,96 mm, respectivamente, para \bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa......140 Figura 4.53: Campo vetorial de velocidade no canal de concentrado para membrana curvada em forma de espiral ($C_a = 2 \text{ kg/m}^3$, $\bar{u} = 0,16 \text{ m/s} \in \Delta P_{TM} = 1198,7 \text{ kPa}$)....144 Figura 4.54: Campo de concentração de NaCl ao longo da superfície da membrana Figura 4.55: Malha tridimensional para o módulo de membrana espiral com uma volta......146 Figura 4.56: Campo de concentração no interior do módulo de membrana espiral Figura 4.57: Campo de concentração no interior do módulo de membrana espiral $(\overline{w} = 0,16 \text{ m/s e } \Delta P_{TM} = 1200 \text{ kPa}).....149$ Figura 4.58: Variação da concentração de NaCl sobre a membrana para diferentes Figura 4.59: Campo de concentração ao longo da superfície da membrana para: (a) 0,16 m/s, (b) 0,20 m/s, (c) 0,25 m/s e (d) 0,35 m/s, respectivamente $(C_a = 2 \text{ kg/m}^3, \Delta P_{TM} = 1200 \text{ kPa}).....150$ Figura 4.60: Perfil de concentração nos canais de permeado e concentrado em função da velocidade média para diferentes velocidades (ΔP_{TM} = 1200 kPa).151 Figura 4.61: Superfície de resposta do fluxo de permeado em relação a concentração de alimentação e número de voltas da membrana espiral $(\overline{w} = 0.2 \text{ m/s}, \Delta P_{TM} = 1000 \text{ kPa}).....154$ Figura 4.62: Superfície de resposta da vazão mássica de permeado em relação a concentração de alimentação e número de voltas da membrana espiral $(\overline{w} = 0.2 \text{ m/s}, \Delta P_{TM} = 1000 \text{ kPa}).....155$

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1: Propriedades físico-químicas dos componentes da mistura
Tabela 3.2: Casos simulados para diferentes números de Reynolds (2D)77
Tabela 3.3: Casos simulados para diferentes pressões transmembranica (2D)78
Tabela 3.4: Casos simulados para análise do ICM. 78
Tabela 3.5: Casos simulados para diferentes pressões transmembranica e
velocidade média da corrente de alimentação, para coeficiente K179
Tabela 3.6: Casos simulados para diferentes pressões transmembranica e
velocidade média da corrente de alimentação, para coeficiente K279
Tabela 3.7: Casos simulados para diferentes sentidos de escoamento das correntes
de saída do módulo de membrana81
Tabela 3.8: Casos simulados para diferentes raios de curvatura. 82
Tabela 4.1: Informações das malhas criadas para análise o ICM
Tabela 4.2: Avaliação do ICM para o fluxo volumétrico de permeado ($\bar{u} = 0,16$ m/s e
$\Delta P_{TM} = 998.7 \text{ kPa}$
Tabela 4.3: Avaliação do ICM para o fluxo volumétrico de permeado ($\bar{u} = 0,16$ m/s e
$\Delta P_{TM} = 1198,7 \text{ kPa}$
Tabela 4.4: Avaliação do ICM para o fluxo volumétrico de permeado ($\bar{u} = 0,12$ m/s e
$\Delta P_{TM} = 1398,7 \text{ kPa}$
Tabela 4.5: Resultados do ICM para concentração (\bar{u} = 0,16 m/s, ΔP_{TM} = 998,7 kPa).
Tabela 4.6: Resultados do ICM para concentração (\bar{u} = 0,16 m/s, ΔP_{TM} = 1198,7 kPa).
Tabela 4.7: Resultados do ICM para concentração (\bar{u} = 0,12 m/s, ΔP_{TM} = 1398,7 kPa).
Tabela 4.8: Resultados do ICM para velocidade média no canal de concentrado na
posição da linha L4
Tabela 4.9: Fluxo de permeado simulado para diferentes pressões transmembranica
e velocidade média da corrente de alimentação, para K1108
Tabela 4.10: Fluxo de permeado simulado para diferentes pressões
transmembranica e velocidade média da corrente de alimentação, para K2108
Tabela 4.11: Resultados das simulações com K1 e ΔP_{TM} = 898,7 kPa
Tabela 4.12: Resultados das simulações com K1 e ΔP_{TM} = 998,7 kPa

Tabela 4.13: Resultados das simulações com K1 e ΔP_{TM} = 1098,7 kPa......117 Tabela 4.14: Resultados das simulações com K1 e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa......117 Tabela 4.17: Resultados das simulações com K2 e ΔP_{TM} = 1098,7 kPa......119 Tabela 4.18: Resultados das simulações com K2 e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa......119 Tabela 4.19: Resultados das simulações com K2 e ΔP_{TM} = 1298,7 kPa......119 Tabela 4.20: Resultados das simulações com K2 e ΔP_{TM} = 1398,7 kPa......119 Tabela 4.22: Resultados das simulações para vários sentidos de escoamento nas correntes de saída do módulo (\bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa)......127 Tabela 4.23: Resultados das simulações para diferentes raios de curvatura da Tabela 4.24: Resultados das simulações para a membrana em forma de espiral $(C_a = 2 \text{ kg/m}^3, \bar{u} = 0,16 \text{ m/s e } \Delta P_{TM} = 1198,7 \text{ kPa}).....143$ Tabela 4.25: Número de elementos e pontos nodas para os módulos de membrana espiral com duas, três e cinco voltas.....146 Tabela 4.26: Resultados das simulações para diferentes velocidades médias $(C_a = 2 \text{ kg/m}^3, \Delta P_{TM} = 1200 \text{ kPa}).....147$ Tabela 4.27: Resultados das simulações da membrana espiral com uma volta para diferentes concentrações de NaCl na alimentação (\overline{w} = 0,2 m/s, ΔP_{TM} = 1000 kPa). Tabela 4.28: Resultados das simulações da membrana espiral com duas voltas para diferentes concentrações de NaCl na alimentação (\overline{w} = 0,2 m/s, ΔP_{TM} = 1000 kPa). Tabela 4.29: Resultados das simulações da membrana espiral com três voltas para diferentes concentrações de NaCl na alimentação ($\overline{W} = 0.2 \text{ m/s}, \Delta P_{TM} = 1000 \text{ kPa}$). Tabela 4.30: Resultados das simulações da membrana espiral com cinco voltas para

LISTA DE SIGLAS

CFD	Computational Fluid Dynamics	
-----	------------------------------	--

- CP Concentração de Polarização
- GCI Grid Convergence Index
- IC Intervalo de Confiança
- ICM Índice de Convergência de Malha
- LPFI Laboratório de Pesquisa em Fluidodinâmica Computacional
- MF Microfiltração
- NF Nanofiltração
- OI Osmose inversa
- PSM Processos de Separação por Membranas
- RMS Root Mean Square
- UF Ultrafiltração
- UFCG Universidade Federal de Campina Grande

LISTA DE SÍMBOLOS

а	Constante da permeabilidade hidráulica	[m/s.Pa ^{0,809}]
b	Constante da permeabilidade hidráulica	[-]
С	Constante da permeabilidade hidráulica	[m/s.Pa ^{0,547}]
d	Constante da permeabilidade hidráulica	[-]
Α	Coeficiente de permeabilidade do solvente	[L.h.Pa/m ²]
В	Coeficiente de permeabilidade do soluto	[m/s]
С	Constante de convergência	[-]
Ca	Concentração de alimentação	[Kg/m ³]
C_b	Concentração da solução	[Kg/m ³]
C_c	Concentração do concentrado	[Kg/m ³]
$C_{ ho}$	Concentração do permeado	[Kg/m ³]
C_s	Concentração de soluto	[Kg/m ³]
C_w	Concentração na superfície da membrana	[Kg/m ³]

D_{AB}	Coeficiente de difusão	[m²/s]
D_h	Diâmetro hidráulico	[m]
${oldsymbol{\mathcal{C}}_a}^{ji}$	Erro relativo entre as malhas	[-]
e _{ext} ^{ji}	Erro relativo extrapolado entre as malhas	[-]
h	Tamanho representativo da malha	[-]
h _c	Altura do canal	[m]
ICM _{ji}	Índice de convergência de calha entre as malhas	[-]
J	Fluxo de permeado	[L/m².h]
J_s	Fluxo do soluto	[L/m².h]
J_w	Fluxo de solvente	[L/m².h]
k	Coeficiente de transferência de massa	[m/s.Pa]
K	Permeabilidade hidráulica	[m/s.Pa]
L	Comprimento	[m]
Lp	Permeabilidade	[m/s.Pa]
m _A	Fração mássica do soluto	[-]
Ν	Número de elementos de malha	[-]
n	Número de pontos experimentais	[-]
р	Ordem aparente	[-]
Ρ	Pressão	[Pa}
P_e	Pressão na entrada da membrana	[Pa]
P_s	Pressão na saída do concentrado	[Pa]
$P_{ ho}$	Pressão na saída do permeado	[Pa]
Qa	Vazão de alimentação	[m ³ /h]
Q_c	Vazão do concentrado	[m ³ /h]
$Q_{ ho}$	Vazão de permeado	[m ³ /h]
Q _{mp}	Vazão mássica de permeado	[kg/s]
r	Coeficiente de correlação linear de Pearson	[-]
r _{ij}	Razão de refino entre as malhas <i>i</i> e <i>j</i>	[-]
r _p	Raio do poro	[µm]
R	Coeficiente de rejeição	[-]
R _c	Recuperação	[%]
R _{cv}	Raio de curvatura	[mm]
Re	Número de Reynolds	[-]

R_m	Resistência da membrana	[1/m]
R_s	Rejeição de sais	[%]
S	Desvio Padrão	[-]
Sc	Número de Schmidt	[-]
t_Y	Valor tabelado da distribuição t de Student	[-]
u	Velocidade na direção x	[m/s]
ū	Velocidade média na direção x	[m/s]
\vec{U}	Vetor velocidade	[m/s]
V	Velocidade na direção y	[m/s]
Vp	Velocidade de permeação (lado do permeado)	[m/s]
V _W	Velocidade de permeação (lado do concentrado)	[m/s]
W	Velocidade na direção z	[m/s]
Ŵ	Velocidade média na direção z	[m/s]
X	Pontos amostrais	[-]

Letras Gregas

δ	Espessura da camada limite	[m]
ρ	Densidade	[Kg/m ³]
$ ho_ ho$	Massa específica da solução no lado do permeado	[Kg/m ³]
$ ho_w$	Massa específica da solução no lado do concentrado	[Kg/m ³]
φ	Matriz identidade	[-]
μ	Viscosidade dinâmica	[Pa.s]
3	Porosidade da membrana	[-]
τ	Tortuosidade do poro	[-]
π_a	Pressão osmótica da solução de alimentação	[Pa]
π _p	Pressão osmótica da solução permeada	[Pa]
ΔP	Diferença de pressão entre os lados da membrana	[Pa]
Δx	Espessura da membrana	[µm]
Δπ	Diferença de pressão osmótica	[Pa]
ΔΡ _{ΤΜ}	Pressão transmembranica	[Pa]

ΔV_i	Volume ocupado pelo elemento <i>i</i> .	[m ³]
φ _i , φ _j	Soluções do método ICM	[-]
φ _{ext} ^{ji}	Solução extrapolada entre as malhas	[-]

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO	25
1.1 Objetivo Geral	27
1.1.1 Objetivos Específicos	27
CAPÍTULO 2 – FUNDAMENTOS E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	29
2.1 Fundamentação Teórica	29
2.1.1 Dessalinização	30
2.1.2 Processo de Separação por Membranas	31
2.1.2.1 Membranas	32
2.1.3 Osmose Inversa (OI)	34
2.1.3.1 Membrana de Osmose Inversa	36
2.1.4 Modelagem Matemática da Osmose Inversa	37
2.1.4.1 Modelo da Difusão da Solução	38
2.1.4.2 Concentração de Polarização	39
2.1.5 Índice de Convergência de Malha (ICM)	42
2.1.6 Análise Estatística de Dados	43
2.1.6.1 Medidas de Dispersão	44
2.1.6.2 Coeficiente de Correlação	44
2.1.6.3 Distribuição t de Student	45
2.2. Revisão Bibliográfica	46
CAPÍTULO 3 – METODOLOGIA	53
3.1 Geometria e Malha Numérica	53
3.2 Modelo Matemático	54
3.2.1 Condições de Contorno	56
3.3. Módulo de Separação Usando Membranas	58
3.3.1 Módulo com Membranas Planas	58
3.3.1.1 Efeito do Sentido de Escoamento	61
3.3.2 Módulo com Membranas Curvas	61
3.3.3 Módulo com Membrana em Forma de Espiral	68
3.4 Aplicação do Índice de Convergência de Malha	74
3.5 Casos Estudados	77
3.5.1 Membrana Plana em Duas Dimensões	77
3.5.2 Membrana Plana em Três Dimensões	78

3.5.2.1 Avaliação do Modelo	78
3.5.2.2 Orientação do Escoamento	80
3.5.2.3 Efeito da Concentração Inicial e da Velocidade de Alimentação	81
3.5.3 Efeito da Curvatura da Membrana	81
3.5.4 Membrana Espiral	82
CAPÍTULO 4 – RESULTADOS E DISCUSSÕES	83
4.1 Modelo Bidimensional	83
4.2 Modelo Tridimensional	92
4.2.1 Análise da Dependência de Malha	92
4.2.2 Validação do Modelo Matemático	107
4.2.3 Análise do Sentido de Escoamento	
4.2.4 Influência da Concentração Inicial de NaCI e da Velocidade Média da	Corrente
de Alimentação	
4.3 Efeito da Curvatura do Módulo da Membrana	
4.4 Módulo de Membrana em Espiral	142
4.4.1. Análise do Número de Voltas	
CAPÍTULO 5 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTURO	JS160
5.1 Conclusões	
5.2 Sugestões de Trabalhos Futuros	
REFERÊNCIAS	
APÊNDICE A – Coeficientes K1 e K2	

Apresenta uma introdução para contextualizar em linhas gerais o presente trabalho, justificando e ressaltando a importância do tema, trazendo também a motivação e os objetivos propostos para a realização da pesquisa.

O problema da escassez de água utilizada nas diversas atividades humanas, seja para o abastecimento público, industrial e agropecuário, vem crescendo nas últimas décadas. A situação está se tornando cada vez mais crítica não só pelo aumento populacional, que exige uma produção crescente de água, mas também pelo elevado nível de poluição dos corpos d'água, que vem diminuindo a qualidade das águas brutas e exigindo cada vez mais técnicas avançadas para o tratamento visando à produção de água adequada a cada uso.

Em várias regiões do planeta onde a disponibilidade hídrica é baixa, a situação já é tão crítica que a única solução viável é a dessalinização de águas salobras ou salinas. Isso ocorre não somente nos países do Oriente Médio, mas também em algumas cidades da Austrália, Singapura, Argélia, Espanha, Israel, em diversas ilhas e em algumas regiões costeiras dos Estados Unidos, bem como no Brasil, lugares nos quais a dessalinização já é uma alternativa corriqueira e viável (SILVEIRA et al., 2015).

As águas subterrâneas encontradas nas regiões semiáridas, normalmente apresentam um alto índice de sais dissolvidos, devido às composições químicas das rochas. O uso de dessalinizadores para minimizar o problema das águas salobras vem sendo bastante satisfatória. Visando o aumento da disponibilidade de água e o consequente aumento da oferta hídrica, em situações específicas, a alternativa técnico-econômica e social mais viável identificada é a da dessalinização de águas salobras objetivando o atendimento da demanda de consumidores de diferentes portes.

A utilização dos processos de separação por membranas (PSM) para dessalinização de águas salobras e do mar foi uma das primeiras aplicações bem sucedidas da Osmose Inversa (OI), com as primeiras plantas de grande porte que surgiram por volta de 1960. Este nível de desempenho foi conseguido devido ao desenvolvimento da primeira geração de membranas comerciais de OI, pelo fato de terem grandes fluxos de permeado e grande seletividade, permitiram ser uma alternativa aos processos técnicos que são processos de utilização intensiva de energia. A OI apresenta-se como uma ótima alternativa, uma vez que possui um menor custo quando comparado com outros sistemas de dessalinização (SCHNEIDER; TSUTIYA, 2001).

A modelagem e simulação de processos de separação por membranas é uma tarefa complexa, pois à medida que o processo ocorre, as propriedades de permeabilidade e seletividade da membrana vão sofrendo alterações, assim 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 de polarização é de grande importância, pois auxilia na previsão do fenômeno. Desta forma as ferramentas da fluidodinâmica computacional aliadas a bons modelos de previsão de fluxo permeado e polarização, são capazes de simular os fenômenos envolvidos como turbulência, transferência de massa e perda de carga através do módulo de membrana.

Os modelos computacionais de análise de escoamentos utilizados atualmente, em sua grande maioria, têm como fundamentação a solução de equações diferenciais que envolvem a conservação da massa, quantidade de movimento e energia. Como muitas vezes a resolução de tais equações é extremamente complicada, métodos de discretização e análise numérica têm sido desenvolvidos com objetivo de se obter soluções aproximadas para as várias categorias de problemas e uma melhor compreensão do fenômeno físico que está ocorrendo. Nesse contexto a dinâmica dos fluidos com putacional teve um enorme crescimento porque reúne técnicas de simulação com a finalidade de produzir soluções numéricas para os sistemas de equações diferenciais parciais que descrevem o escoamento de fluidos.

O amplo uso da tecnologia, custos com experimentos, dificuldades em encontrar soluções analíticas para resolver as equações diferenciais que descrevem o fluxo dos fluidos no interior de condutos e o crescimento de técnicas de análise numérica para resolver problemas de escoamento junto com o amplo uso da ferramenta CFD pelo meio industrial graças ao desenvolvimento de computadores cada vez mais robustos em termos de processamento são os fatores que influenciaram na escolha do tema desta pesquisa.

Tem-se observado que grande parte dos trabalhos de modelagem e simulação para membranas de osmose inversa foram realizados considerando a membrana como uma superfície plana, onde são estimadas as condições iniciais, fixadas as condições de contorno, realizadas as simulações e validações dos resultados sem levar em consideração a curvatura em espiral da membrana ou que consideram a membrana com raio de curvatura fixo. Em outros trabalhos são analisadas a geometria e configuração do espaçador presente no canal de alimentação da membrana.

A pesquisa visa estudar a influência da configuração em espiral no que diz respeito ao desempenho do elemento, como fluxo de permeado, taxa de recuperação, rejeição de sais, concentração de polarização etc., através de técnicas de CFD. Desta forma, procura-se compreender melhor os fenômenos envolvidos no processo de separação por membranas empregando a simulação numérica da fluidodinâmica, proporcionando o desenvolvimento da tecnologia, diminuição dos problemas encontrados no campo e aperfeiçoamento de sistemas instalados.

1.1 Objetivo Geral

Avaliar os efeitos fluidodinâmicos em módulos de membranas via osmose inversa em função da configuração geométrica e sua influência sobre o fluxo de permeação via CFD.

1.1.1 Objetivos Específicos

- Estudar o comportamento fluidodinâmico em membranas planas, comparando com os resultados do referencial bibliográfico.
- Desenvolver uma modelagem matemática capaz de representar os fenômenos de transferência de massa durantes o processo de separação por membrana via osmose inversa.

- Comparar os resultados obtidos com dados experimentais reportados na literatura para validar a modelagem matemática proposta.
- Avaliar os efeitos de parâmetros operacionais como velocidade, concentração inicial e pressão transmembranica sobre o processo de separação e simulação de membranas espirais para permeação de água.
- Avaliar a influência da curvatura da membrana no fluxo de permeado.
- Analisar o efeito da concentração-polarização em relação à permeabilidade da membrana.

CAPÍTULO 2 – FUNDAMENTOS E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo apresenta uma revisão bibliográfica dos assuntos relevantes ao desenvolvimento da pesquisa, e tem como objetivo apresentar conceitos e definições do processo de separação por membrana para dessalinização de água. Também é apresentada uma revisão sobre alguns tópicos importantes sobre estudo do índice de convergência de malha, estudo estatístico, a distribuição t de Student, intervalo de confiança, os quais foram usados nessa pesquisa.

2.1 Fundamentação Teórica

A crise hídrica que atinge atualmente o planeta Terra possui várias dimensões, resultando em secas severas em várias regiões do planeta, como muitas localidades situadas no semiárido brasileiro. Com a diminuição dos estoques de águas superficiais, armazenadas nos rios, lagos e represas, o uso de águas subterrâneas vem sendo ampliado, atingindo as reservas de aquíferos e diminuindo seus estoques disponíveis. E além da escassez hídrica, muitas localidades têm problema com a qualidade das águas, que apresentam elevada concentração de sais, portanto impróprias para o consumo direto, sendo necessária a utilização e desenvolvimento de tecnologias, como os processos de separação por membranas, para promover o tratamento da água para seus diferentes usos.

A tecnologia de membrana para tratamento de água teve um considerável crescimento no final do século passado. A capacidade de produção de água dessalinizada tem aumentado exponencialmente desde 1960 para diversos usos como municipais, industriais, agrícolas, militares entre outros, onde as membranas têm se mostrado como poderosos filtros para o tratamento de água. Quase metade da capacidade de produção encontra-se no Oriente Médio, aproximadamente 47%. América do Norte, Europa e Ásia cada um tem aproximadamente 15% da capacidade global de produção de água dessalinizada (CADT, 2008).

Em 1995, 79% da água produzida por OI no Japão era destinada à indústria eletrônica. Neste mesmo ano, data-se que o país era o que apresentava o maior número de plantas de OI (36%). Os Estados Unidos e países da comunidade

europeia concentravam 24% e 29% das plantas mundiais respectivamente (ANADÃO, 2010).

A capacidade de produção das plantas de dessalinização tem crescido continuamente com a instalação de novas plantas e ampliação das existentes. No Brasil, as primeiras experiências com dessalinização foram realizadas em 1970, no Instituto Tecnológico da Aeronáutica, com a destilação solar. Em 1987, a Petrobras iniciou seu programa de dessalinização de água do mar por meio do processo de OI para atender às suas plataformas marítimas. Também no Brasil, na ilha de Fernando de Noronha – PE, em 1999, foi instalado uma usina de dessalinização da água do mar por OI, com capacidade de produção de 16 m³/h. Em 2004, houve uma ampliação para 24 m³/h, em 2006 para 36 m³/h e em 2011 para 54,2 m³/h (SILVEIRA et al., 2015).

A instalação de dessalinizadores de pequeno porte em diversos municípios do Nordeste brasileiro vem acontecendo ao longo dos últimos anos por meio de órgão federais, estaduais e municipais. Desde 2004, o Governo Federal, com a criação do Programa Água Doce, do Ministério do Meio Ambiente, vem ampliando o número de equipamentos instalados em toda região semiárida brasileira e ainda recuperando equipamentos atualmente parados por falta de manutenção e mau uso (PAD, 2012).

Atualmente, a dessalinização da água é possibilitada pelo desenvolvimento de membranas compósitas com alta rejeição de sais, pela redução do consumo de energia, pelo aumento da capacidade instalada das plantas em função do arranjo das membranas, permitindo uma melhor otimização hidráulica, e pelo aumento da eficiência energética de bombeamento.

2.1.1 Dessalinização

A dessalinização é um fenômeno que faz parte do ciclo hidrológico, uma vez que a água doce presente no planeta, em seu maior percentual, tem origem na evaporação da água salgada dos mares e oceanos, que depois cai sobre a Terra na forma de precipitação atmosférica e é responsável pela reposição da água doce nos rios, lagos e aquíferos subterrâneos (SILVEIRA et al., 2015).

A dessalinização é um processo de tratamento destinado a remover o teor de sais dissolvidos em águas salobras e salinas para se obter água com características adequadas para uso industrial ou destinada ao abastecimento público.

A dessalinização por membranas e por processos térmicos são as duas principais tecnologias de dessalinização aplicadas em grande escala, sendo a dessalinização por membranas um processo energeticamente mais vantajoso, quando comparado com os processos térmicos, devido ao fato do processo de separação ocorrer sem mudança de fase, apresentando um baixo custo energético e um produto final de alta qualidade (HABERT et al., 2006; CADT, 2008).

2.1.2 Processo de Separação por Membranas

Os processos de separação por membranas atingiram o status de processos comerciais devido a uma série de vantagens inerentes a esta tecnologia. Em operações industriais, em particular de processos químicos, com a finalidade de produzir compostos com determinadas especificações, é necessário separar, concentrar e purificar espécies presentes em diferentes correntes dos processos. Para estas operações, os processos de separação por membranas têm-se destacado como alternativas promissoras aos processos clássicos de separação, uma vez que estes oferecem vantagens no que se refere ao consumo de energia, especificidade e facilidades de escalonamento.

Algumas dessas vantagens são comentadas a seguir (HABERT et al., 2006):

- Economia de Energia: Os processos de separação por membranas, em sua maioria, promovem a separação sem que ocorra mudança de fase.
 Neste sentido são processos energeticamente favoráveis.
- Seletividade: A seletividade é outra característica importante dos processos com membranas. Podendo ser aplicado individualmente ou em processos combinados, envolvendo processos clássicos e processos com membranas, cada qual atuando onde é mais eficiente, se mostrando como a opção mais econômica e eficiente de separação.

- Separação de Termolábeis: Como os processos com membranas são operados a temperatura ambiente, podem ser aplicados no fracionamento de misturas envolvendo substancias termossensíveis. Sendo empregados na indústria farmacêutica e de alimentos e, mais recentemente, como uma alternativa na purificação de produtos ou recuperação de células em biotecnologia.
- Simplicidade na Operação e Escalonamento: Os processos com membranas são processos simples do ponto de vista operacional e em termos de escalonamento. Os sistemas são modulares e os dados para o dimensionamento de uma planta podem ser obtidos a partir de equipamentos pilotos operando com módulos de membrana de mesma dimensão daqueles utilizados na indústria.

Os processos que utilizam membrana têm tido aplicação nos mais diversos setores da indústria química, de alimentos, farmacêutica e de biotecnologia, medicina, tratamento de águas para industriais e de abastecimento. Em aplicações nas áreas da biotecnologia, são conhecidos com vista à recuperação de produtos de valor agregado como proteínas, antibióticos, vitaminas, aminoácidos, entre outros.

Segundo Habert et al. (2006) os processos que utilizam a tecnologia de membranas e a diferença de pressão com força motriz são conhecidos como: microfiltração (MF), ultrafiltração (UF), nanofiltração (NF) e osmose inversa (OI).

O processo de separação por membrana usa a pressão para retirar solutos dissolvidos e suspensos na água. Nesse processo têm-se dois importantes fatores para o bom funcionamento do sistema, um baixo índice de incrustação (*fouling*) na membrana e um alto desempenho do módulo, promovido pela redução da taxa de concentração de polarização (EL-DESSOUKY; ETTOUNEY, 2002).

2.1.2.1 Membranas

Uma membrana é um filme que separa duas fases atuando como uma barreira seletiva entre essas fases. A membrana tem, assim, a capacidade de transportar determinados componentes, quando aplicada algum tipo de força externa, retendo outros que fazem parte da mistura de alimentação. É, portanto, uma barreira permeável e seletiva ou uma interface entre duas fases. As espécies retidas pela membrana constituem o concentrado, enquanto aquelas que passam por ela são o permeado.

As membranas constituem, atualmente, a principal inovação tecnológica nos processos de tratamento de água, sendo a primeira grande inovação, desde o desenvolvimento das tecnologias convencionais de tratamento de água no início do século passado (SCHNEIDER; TSUTIYA, 2001).

Um sistema básico de separação por membranas inclui uma bomba de alta pressão para pressurizar a solução de alimentação, módulo de membrana, tubulações para coleta do permeado e do concentrado, e dispositivo para controle de pressão, conforme ilustra a Figura 2.1.

Figura 2.1: Representação esquemática de um sistema básico de filtração pressurizado.



Fonte: Adaptado de Mierzwa e Hespanhol (2005).

Nos sistemas de osmose inversa, a solução de alimentação é bombeada através do módulo em direção paralela à membrana. A solução de alimentação escoa tangencialmente a superfície da membrana (Figura 2.1), enquanto o permeado é transportado transversalmente a mesma (fluxo cruzado). Como existe um fluxo contínuo junto à superfície da membrana, as espécies rejeitadas não se acumulam, sendo levadas pela corrente que constitui o concentrado (HABERT et al., 2006).

Os elementos de membranas com acessórios são geralmente combinados em módulos. O módulo é o elemento básico de um sistema de membrana que congrega todas as estruturas necessárias para viabilizar a operação da membrana como unidade de separação. A escolha do módulo da membrana depende do tipo de aplicação e dos componentes que se deseja separar no processo.

Os módulos de membranas podem conter um ou mais elementos de membranas instalados no interior do vaso de pressão, e em função do projeto do sistema, os módulos podem ser configurados em série ou paralelo.

O sistema de osmose inversa poderá ainda dispor de um pré-tratamento como filtros multimeios e/ou dosagem de anti-incrustantes, quadro de comando, além de instrumentos como manômetros, rotâmetros e condutivímetro, para verificação de variáveis do processo (Figura 2.2).



Figura 2.2: Sistema de osmose inversa.

Fonte: Gauto e Rosa (2013).

2.1.3 Osmose Inversa (OI)

A osmose é um fenômeno natural, no qual o solvente passa através de uma membrana semipermeável (Figura 2.3a). Nesse caso, não há fluxo de soluto do lado com menor concentração para o de maior concentração, até que o equilíbrio do potencial químico do solvente seja reestabelecido. No equilíbrio, a diferença de pressão entre os dois lados da membrana é igual à diferença de pressão osmótica (Figura 2.3b) (HABERT et al., 2006).

Para reverter o fluxo de solvente, uma diferença de pressão maior que a diferença de pressão osmótica é aplicada (Figura 2.3c). Como resultado, a separação do solvente dos solutos se torna possível. Este fenômeno é chamado de Osmose Inversa (OI) ou hiperfiltração (HABERT et al., 2006).



Figura 2.3: Representação do processo de osmose e osmose inversa.

Fonte: Adaptado de Habert et al. (2006).

A OI é um processo de separação líquido-líquido, que emprega uma membrana densa semipermeável altamente permeável à água e altamente impermeável a microrganismos, colóides, sais dissolvidos e orgânicos. Com a aplicação de uma pressão maior que a pressão osmótica, o solvente passa pela membrana, a qual age como uma barreira de fluxos aos solutos, possibilitando a separação do solvente e dos solutos (ANADÃO, 2010).

A separação do soluto e a permeação do solvente dependem de diversas variáveis como: material da membrana que definirá a afinidade entre ela e o soluto, tipos de solutos, taxa do fluxo de alimentação, concentração dos solutos dissolvidos na fase de alimentação, pressão transmembranica, temperatura, pH e concentração dos sólidos suspensos, se eles existirem na solução (SCHNEIDER; TSUTIYA, 2001).

As linhas de pesquisa da OI se dividem em duas áreas: fundamental e campo de aplicação. A área fundamental inclui projeto dos materiais da membrana, formação da membrana e as suas características de permeação. A área de aplicação das membranas se destaca a configuração do módulo da membrana, a engenharia do processo e os problemas decorrentes da sua aplicação (ANADÃO, 2010).

O progresso técnico na área de OI resultou em uma maior eficiência de retenção a alta seletividade na separação. A principal aplicação da OI é a dessalinização de água e a concentração ou recuperação de produtos do processo na indústria química, de alimentos e bebidas, na produção de água ultra pura, na indústria farmacêutica e de biotecnologia, entre outras.

2.1.3.1 Membrana de Osmose Inversa

As membranas de osmose inversa do tipo espiral devem possuir algumas características essenciais para que o processo seja eficiente. São desejáveis propriedades como alta capacidade de separação do soluto e elevado fluxo de água, resistividade à compactação, resistência à oxidação, resistência ao pH, resistência a reagentes, resistência ao ataque bacteriano e resistência à formação de *fouling*, ou seja, o desempenho da membrana está condicionado às suas características estruturais e morfológicas (ANADÃO, 2010).

A membrana em espiral é o módulo mais utilizado em aplicações que demandam pressões altas e intermediárias, como na Nanofiltração (NF) e na OI. Cada elemento consiste de um pacote de membranas e espaçadores enrolados em volta de um tubo coletor de permeado central, ilustrado na Figura 2.4.

Os canais de alimentação são delimitados por espaçadores no formato de telas e membranas dos dois lados, denominado canal de concentrado. A superfície oposta das folhas de membrana onde fica localizada a estrutura porosa de suporte e por onde escorre o permeado é colocada em contato com um segundo espaçador formado por um tecido fino poroso, cuja função é manter aberto o canal de água filtrada. Este canal é vedado em três lados por linhas de cola. O lado aberto é inserido dentro do tubo coletor localizado no interior do elemento.



Figura 2.4: Membrana em forma de espiral.

Fonte: Gauto e Rosa (2013).
Os canais de água bruta permanecem abertos nas laterais do cilindro formado pelas membranas e permitem o livre acesso da água de alimentação, que percorre o módulo em direção paralela ao tubo coletor. O módulo completo é envolto por uma manta para estabilizar o rolo de membranas e delimitado nas duas extremidades por discos de proteção antitelescópica e a função deles é evitar que diferenciais de pressão nos diferentes canais de alimentação causem o deslocamento longitudinal de pacotes de membranas (SCHNEIDER; TSUTIYA, 2001).

2.1.4 Modelagem Matemática da Osmose Inversa

Modelos matemáticos foram desenvolvidos a fim de descrever os fluxos de soluto e solvente através da membrana sob certas condições de operação.

Os modelos para membranas não porosas consideram que tanto o soluto como o solvente se dissolvem nas camadas não porosas da superfície da membrana, como o modelo da difusão da solução apresentado na seção 2.1.4.1 (WIESNER; BUCKLEY, 1996; ANADÃO, 2010; KUCERA, 2015), e o modelo da imperfeição da difusão da solução, como uma extensão do modelo da difusão da solução que reconhece as imperfeições existentes na superfície de membranas industriais (ANADÃO, 2010; KUCERA, 2015).

Os modelos para membranas porosas assumem que o mecanismo de separação é determinado pelos fenômenos de superfície e transporte de fluidos através dos poros, como o do fluxo preferencial sorção-capilaridade baseado em um modelo de fluxo capilar generalizado onde o fluxo é determinado pela distribuição de tamanhos de poros e interações específicas entre o fluido e o poro (WIESNER; BUCKLEY, 1996; ANADÃO, 2010; KUCERA, 2015), e o modelo de fluxo de superfície forçado pelos poros onde o transporte do soluto e do solvente através do poro da membrana é governado pelas forças de interação, fricção e forças difusivas em razão dos gradientes no potencial químico do soluto e do solvente (ANADÃO, 2010; KUCERA, 2015). Maiores detalhes sobre os modelos podem ser encontrados no referencial bibliográfico reportado e bibliografias específicas.

A maioria dos modelos parte da premissa de que a difusão ou fluxo ocorre através do poro da membrana, enquanto as teorias de membrana carregada incluem efeitos eletrostáticos (ANADÃO, 2010).

2.1.4.1 Modelo da Difusão da Solução

O modelo da difusão da solução assume que a membrana não é porosa. O transporte do soluto como do solvente através da membrana ocorre quando a molécula de interesse se dissolve na membrana e depois se difunde através da membrana. A membrana atua como uma barreira à difusão de maneira independente, devido ao gradiente de potencial químico intrínseco. Este gradiente é resultado das diferenças de concentração e pressão através da membrana. Cada componente da solução se dissolve na membrana, de acordo com a lei da distribuição de equilíbrio, e se difunde através da membrana, em resposta à diferença de concentração e pressão. Dessa forma o gradiente de concentração e de pressão através da membrana age como uma força motriz para o fluxo de cada componente (WIESNER; BUCKLEY, 1996; ANADÃO, 2010; KUCERA, 2015).

O fluxo de solvente (J_w) é linearmente proporcional à diferença de pressão efetiva através da membrana e definido por (MULDER, 1992; BAKER, 2012; KUCERA, 2015):

$$J_{w} = \mathcal{A}(\Delta P - \Delta \pi) \tag{2.1}$$

onde: A é o coeficiente de permeabilidade do solvente (função da difusividade da água através da membrana), ΔP é a diferença de pressão através da membrana e $\Delta \pi$ é a diferença de pressão osmótica entre a alimentação e o permeado.

O fluxo do soluto (J_s) é proporcional à diferença efetiva de concentração de soluto através da membrana, é dado por (MULDER, 1992; BAKER, 2012; KUCERA, 2015):

$$J_s = B(C_a - C_p) \tag{2.2}$$

onde: *B* é o coeficiente de permeabilidade do soluto (função da difusividade do sal através da membrana), C_a é a concentração do soluto na fase de alimentação na superfície da membrana e C_p é a concentração do soluto na solução do permeado.

Estas equações predizem que o fluxo de soluto através da membrana é independente do fluxo de solvente. Quando a fase de alimentação possui pressão osmótica maior, nota-se um menor fluxo de água através da membrana, enquanto o fluxo de sais independe da pressão aplicada.

2.1.4.2 Concentração de Polarização

A concentração de polarização é o termo utilizado para descrever o acúmulo de soluto próximo á superfície da membrana onde a concentração do soluto é maior do que a encontrada na corrente da alimentação. Se a quantidade de sais na zona de concentração de polarização ultrapassar o limite de solubilidade os sais poderão precipitar na membrana. Apresenta como efeitos negativos o decréscimo do fluxo de permeado, aumento na pressão, aumento da passagem de soluto através da membrana, precipitação de soluto e favorecimento de incrustações por deposição. Consequentemente levando a um aumento nos custos de operação e manutenção, diminuição no rendimento do sistema e redução da qualidade do produto final (MULDER, 1992; BAKER, 2012; KUCERA, 2015).

Segundo Habert et al. (2006) e Baker (2012) a polarização de concentração é um fenômeno que ocorre a partir dos primeiros instantes de filtração, onde irá ser formado um perfil de concentração perpendicular à superfície da membrana, resultando no aumento da concentração das espécies retidas próximo à superfície da membrana.

A camada de sais dissolvidos junto à superfície da membrana pode atingir uma dada espessura em consequência de um balanço entre dois fatores opostos: o transporte convectivo dos sais para a membrana pelo movimento da água e a difusão dos sais para longe da membrana, provocada pelo gradiente de concentração estabelecido na vizinhança da fronteira das fases.

Devido à semipermeabilidade da membrana, o soluto presente na corrente de alimentação será retido na interface da membrana e consequentemente, a formação de um gradiente da concentração sobre a espessura da película estagnada (δ) (MALLEVIALLE et al., 1996). Assim, na superfície da membrana a concentração será mais elevada (C_w) e diminuirá a (C_b) na solução líquida. Isto causará uma difusão dos solutos [D(dC/dx)] no sentido oposto ao fluxo principal (*JC*), conforme ilustração apresentada na Figura 2.5.





Fonte: Adaptado de Mallevialle et al. (1996).

O fator concentração de polarização (CP) pode ser obtido aplicando um balanço na Figura 2.5, considerando o estado estacionário, o transporte convectivo do soluto para a membrana menos o transporte difusivo do soluto para o interior da solução será igual ao fluxo do permeado, definido pela a Equação (2.3) (MALLEVIALLE et al., 1996; SCHNEIDER; TSUTIYA, 2001).

$$JC - D\frac{dC}{dx} = JC_{\rho}$$
(2.3)

Integrando a Equação (2.3) e aplicando as seguintes condições de contorno:

$$\begin{cases} x = 0 \Longrightarrow C = C_w \\ x = \delta \Longrightarrow C = C_b \end{cases}$$
(2.4)

Obtém-se:

$$\ln \frac{C_w - C_p}{C_b - C_p} = \frac{J\delta}{D}$$
(2.5)

onde: C_w , C_b e C_p são as concentrações do soluto próximo à membrana, na solução e no permeado, respectivamente, J é o fluxo volumétrico, D é o coeficiente de difusão do soluto na solução e δ é a espessura da camada limite de polarização de concentração.

A Equação (2.5) pode ser escrita da seguinte forma:

$$CP = \frac{C_w - C_p}{C_b - C_p} = \exp\left(\frac{J}{k}\right)$$
(2.6)

O coeficiente de transferência de massa *k* do soluto na zona de concentração de polarização é a razão entre o coeficiente de difusão *D* e a espessura da camada limite δ (MALLEVIALLE et al., 1996; SCHNEIDER; TSUTIYA, 2001). Este coeficiente pode ser calculado a partir de correlações empíricas, como a seguinte expressão, para escoamento laminar completamente desenvolvido quando $L > 0,029 \text{Re} D_h$ (WILEY et al., 1985; COSTA, DA et al., 1991):

$$k = 1,62 \operatorname{Re}^{0,33} \operatorname{Sc}^{0,33} \left(\frac{D_h}{L} \right)^{0,33} \frac{D_{AB}}{D_h}$$
 (2.7)

onde: D_h é o diâmetro hidráulico, Re o número de Reynolds, Sc o número de Schmidt ($\mu/\rho D_{AB}$), D_{AB} o coeficiente de difusão e *L* o comprimento do canal.

A concentração de polarização, os altos índices de rejeição de sais e a remoção de água da solução de alimentação aumentam a tendência de precipitação de sais sobre a superfície da membrana. O controle dos processos de precipitação de sais é um dos principais condicionantes de projetos em sistemas de osmose inversa. A forma mais eficaz, para evitar a precipitação de sais, é a operação da membrana dentro de limites, que impedem que as concentrações de sais retidos atinjam valores próximos aos limites de solubilidade (SCHNEIDER; TSUTIYA, 2001).

Outros parâmetros importantes no processo de OI, são a recuperação e a rejeição de sais.

A recuperação (R_c) refere-se à percentagem do solvente de alimentação convertido em permeado. Depende de vários fatores, como a formação de incrustação na superfície das membranas, a pressão osmótica e a qualidade da água de alimentação do sistema (LIRA, 2004).

A recuperação de um sistema pode ser definida de acordo com a Equação (2.8).

$$R_{c}(\%) = \frac{Q_{p}}{Q_{a}} \times 100 = \frac{Q_{p}}{Q_{p} + Q_{c}} \times 100$$
 (2.8)

onde: R_c : recuperação do sistema (%); Q_p : vazão de permeado (m³/h); Q_a : vazão de alimentação (m³/h) e Q_c : vazão do concentrado (m³/h).

A recuperação máxima em qualquer instalação de OI, depende dos sais presentes na água de alimentação e de sua tendência a se precipitar na superfície da membrana. Com o aumento do nível de recuperação do sistema, mais água é convertida em produto, consequentemente, aumenta o valor da concentração de sais dissolvidos na corrente de concentrado, assim como a possibilidade de sua precipitação na superfície da membrana.

A rejeição de sais (R_s) fornece a capacidade da membrana de rejeitar os sais dissolvidos durante a permeação e pode ser definida como (LIRA, 2004):

$$R_{s}(\%) = \frac{C_{a} - C_{p}}{C_{a}} = 1 - \frac{C_{p}}{C_{a}}$$
(2.9)

onde: R_s : rejeição de sais, C_a : concentração de alimentação e C_p : concentração do permeado.

O percentual de rejeição de sais indica a efetividade de remoção de sais e outras espécies químicas pela membrana, possuindo valores que variam de 90 a 99,8 % para a maioria dos íons existentes na água.

Uma grande variedade de fatores influencia a rejeição de solutos por membranas: dimensões do soluto, morfologia dos componentes retidos pela membrana, tamanho dos poros da membrana, propriedades químicas da solução a ser filtrada e fatores hidrodinâmicos, que determinam a tensão de arraste e as forças de cisalhamento na superfície da membrana (SCHNEIDER; TSUTIYA, 2001).

2.1.5 Índice de Convergência de Malha (ICM)

Ao utilizar um pacote CFD comercialmente disponível, os resultados das simulações estão sujeitas a incertezas e erros, sendo necessário à aplicação de uma metodologia de validação e verificação para estabelecer confiabilidade dos resultados. Sendo assim, uma das mais importantes etapas do processo de simulação numérica.

As pesquisas em CFD buscam uma solução numérica independente da malha, ou seja, quando a malha é refinada, a solução não se altera, dentro de um critério de tolerância, conforme comenta Fortuna (2012).

A verificação dos erros de discretização, que ocorrem pela representação das equações governantes do escoamento como expressão algébrica em um domínio espacial e temporal discreto, pode ser realizada a partir do estudo de dependência de malha de acordo com a metodologia de verificação proposta por Roache (1994). Este método, denominado Índice de Convergência de Malha (ICM),

prevê um modelo objetivo para quantificação da incerteza quanto à convergência de malha.

A independência da malha está relacionada à verificação do Índice de Convergência de Malha, ou do inglês "*Grid Convergence Index (GCI)*" é um método que foi desenvolvido com base na extrapolação Richardson que consiste na comparação de soluções discretas em dois intervalos de malhas diferentes. Nunes (2019) comenta que o ICM é estabelecido como uma porcentagem de erro e fornece uma estimativa quando a solução numérica está convergindo para a solução exata. Este índice fornece uma faixa percentual da diferença entre o valor computado e o valor assintótico. Valores pequenos desse índice indicam que a solução está na região assintótica.

Celik e Karatekin (1997) estabelecem que se o valor do ICM não for superior a 10%, pode-se garantir que a solução se encontra no intervalo assintótico, ou seja, a dependência dos resultados com a malha foi reduzida e se aproxima de uma solução independente da malha.

A modelagem matemática do ICM é descrita de maneira detalhada na seção 3.4 do capítulo de metodologia.

2.1.6 Análise Estatística de Dados

Uma ferramenta importante na validação de dados em um determinado estudo é a análise estatística dos resultados, assim como para uma extrapolação adequada dos resultados obtidos para a população estudada. Outro aspecto importante é fazer previsões, a partir das quais podem ser tomadas decisões.

O teste de hipóteses é a ferramenta estatística que proporciona a verificação de hipóteses de pesquisa dentro do contexto de amostragem, onde se verifica um comportamento e a partir disso procura-se verificar sua validade ou não, ou seja, fornecem uma metodologia que permite verificar se os dados amostrais trazem evidência que apoiem ou não a hipótese formulada.

Os testes paramétricos utilizados para testar parâmetros da população, como a média, têm-se como mais utilizado o teste Z e teste T, sendo ambos os testes para verificar as evidências sobre a média em uma amostra frente à população.

Os resultados obtidos podem ser analisados por diversos parâmetros, relacionados a medidas de dispersão, coeficiente de correlação, teste t de Student, intervalo de confiança, entre outros.

2.1.6.1 Medidas de Dispersão

As medidas de dispersão são medidas calculadas em relação à média das observações, como por exemplo, a média, a variância e o desvio padrão.

De acordo com Neto et al. (2010), a média é uma medida de tendência central. A variância é uma medida da média dos quadrados dos desvios de cada valor individual. Já desvio padrão, que é calculado pela raiz quadrada da variância, é usado para definir intervalos em torno da média.

2.1.6.2 Coeficiente de Correlação

O coeficiente de correlação linear de Pearson (*r*) é uma media do grau de associação linear entre duas variáveis aleatórias e também da proximidade dos dados a uma reta (BUSSAB; MORETTIN, 2009), ou seja, é uma medida da relação linear entre as variáveis aleatórias.

Segundo Neto et al. (2010), o coeficiente de correlação de um par de variáveis aleatórias varia entre -1 e +1. O coeficiente de correlação para variáveis ligadas por uma relação linear perfeita tem valor igual a +1, se uma cresce a outra também cresce, ou igual a -1, se uma cresce a outra diminui, e valores intermediários representam uma relação parcialmente linear.

De acordo com Bussab e Morettin (2009), o coeficiente de correlação pode ser determinado pela seguinte expressão:

$$r = \frac{\sum x_i y_i - n\overline{x}\overline{y}}{\sqrt{\left(\sum x_i^2 - n\overline{x}^2\right)\left(\sum y_i^2 - n\overline{y}^2\right)}}$$
(2.10)

onde \overline{X} e \overline{y} são os valores médios, *n* é o números elementos de cada série, x_i e y_i são as variáveis usadas para análise.

2.1.6.3 Distribuição t de Student

A distribuição t de Student é utilizada para inferências estatísticas sobre médias populacionais, para pequenos tamanhos de amostras. A aparência da distribuição t é similar à distribuição normal padrão (ou Gaussiana), em que ambas as distribuições são simétricas e valor máximo da ordenada é alcançado quando a média é igual à zero. Como essa distribuição é bastante utilizada na prática, existem tabelas fornecendo probabilidades relativas a ela.

A distribuição t tem extremidades (caudas) mais largas que a distribuição normal, ou seja, ela tem mais probabilidade nas extremidades do que a distribuição normal. À medida que o número de graus de liberdade cresce, a forma da distribuição t fica mais próxima da distribuição normal (MONTGOMERY; RUNGER, 2009).

Um parâmetro importante ao se estudar distribuição de probabilidade é o intervalo de confiança.

De acordo com Santos (2019), o intervalo de confiança é importante para indicar a margem de incerteza acerca do cálculo efetuado. O cálculo do intervalo de confiança é uma estratégia que leva em conta o erro amostral. O tamanho do efeito e seu intervalo de confiança representam valores plausíveis para a população de origem, e quanto mais estreito é o intervalo de confiança, maior é a probabilidade de que a estimativa baseada na população de estudo representa o verdadeiro tamanho do efeito na população de origem.

O nível de confiança varia de acordo com o interesse e exigência do pesquisador. Tipicamente os intervalos de confiança são estabelecidos para os níveis de confiança de 95% (RODRIGUES; IEMMA, 2014).

Segundo Bussab e Morettin (2009), o intervalo de confiança (*IC*) para a distribuição t de Student é determinado pela seguinte expressão:

$$IC = \overline{X} \pm t_{\gamma} \frac{S}{\sqrt{n}}$$
(2.11)

onde \overline{X} é o valor correspondente aos pontos amostrais, t_Y é o valor tabelado da distribuição t de Student, obtido com (*n*-1) graus de liberdade, *S* representa o desvio padrão da amostra e *n* o tamanho da amostra.

2.2. Revisão Bibliográfica

A aplicação da fluidodinâmica computacional a processos de separação por membranas tem sido feita por diversos pesquisadores, onde grande parte destes trabalhos estão relacionados à micro e ultrafiltração, com estudos do efeito de diferentes geometrias do módulo, sobre o fluxo de permeado e a distribuição de pressões sobre a membrana. Alguns trabalhos contam com a realização de experimentos de forma a validar os resultados numéricos.

Na osmose inversa, Cao et al. (2001) usaram o simulador FLUENT 4 para estudar os efeitos do emprego de espaçadores empregados para aumentar o coeficiente de transferência de massa, diminuindo a camada limite polarizada, em um canal estreito. Eles usaram diferentes configurações de espaçadores alternando as localizações na parte superior e inferior do canal. Foi observado que a redução da distância entre os espaçadores acarreta a formação de atividades turbulentas, aumentando o coeficiente de transferência de massa. Entretanto, essa redução aumenta a perda de carga no canal, aumentando os custos de operação. Uma configuração ótima de espaçadores deve levar em conta estes efeitos.

Geraldes et al. (2001) propuseram um modelo numérico baseado em volumes finitos para prever a hidrodinâmica de fluxos laminares e transferência de massa de soluções aquosas na superfície de uma membrana de nanofiltração. A modelagem foi desenvolvida levando-se em conta o transporte de soluto no interior do canal e foi validada com dados experimentais de uma célula que simula o fluxo bidimensional desenvolvido no módulo da membrana, para soluções aquosas de cloreto de sódio, sulfato de sódio, sacarose e polietilenoglicol (PEG 1000). Também foi proposta uma correlação para o cálculo da espessura da camada limite de concentração com base nos valores dos perfis de concentração de soluto, demonstrando que o aumento do número de Reynolds levou a uma redução da espessura da camada limite de concentração.

Fletcher e Wiley (2004) estudaram os efeitos das forças de campo na separação de sais em um módulo plano. Como auxílio do CFX 4, eles observaram que estes efeitos são importante em baixas taxas de alimentação do módulo, onde a concentração de sais na superfície da membrana sofre influência da força gravidade. Os autores desenvolveram modelos a fim de compreender o comportamento dos

fluxos de alimentação e de permeado em processo de separação por membranas que usam a pressão como força motriz, onde esses fluxos são regidos pelas equações de conservação da massa, da quantidade de movimento.

As equações usadas por Fletcher e Wiley (2004) são semelhantes às utilizadas pelos mesmos autores em trabalho anterior (WILEY; FLETCHER, 2003). O processo de separação foi causado pela aplicação de uma diferença de pressão entre os canais de alimentação e de permeado. Essa diferença de pressão foi utilizada na determinação do fluxo de permeado através da membrana. O fluxo de permeado é calculado através de uma equação que faz analogia da Lei de Darcy para meios porosos e é aplicada a membranas através da medição experimental do fluxo de permeado pela aplicação de uma diferença de pressão conhecida.

Damak et al. (2004a) e Damak et al. (2004b), realizaram a modelagem do processo de separação em uma membrana tubular com fluxo cruzado, em regime laminar, onde estudaram o crescimento da camada limite de polarização de concentração ao longo do comprimento da membrana. Eles utilizaram modelos matemáticos para soluções das equações de Navier-Stokes acopladas à lei de Darcy, e descritas como um modelo de resistências em série, desenvolvido no programa MATLAB. No estudo foram determinados os efeitos de várias condições de operação, por exemplo, o número de Reynolds axial e do número Schmidt. Os resultados numéricos mostraram que um aumento do número Reynolds axial leva a uma diminuição da espessura da camada limite de concentração e que um maior número de Schmidt leva a uma diminuição da espessura da camada limite de concentração local.

Ghidossi et al. (2006) realizaram uma revisão sobre aplicação da simulação numérica em processos com membranas para a compreensão da hidrodinâmica e da transferência de massa. Na maioria dos casos, os estudos foram feitos em regime laminar e utilizando modelos de concentração de polarização. Os autores comentam que CFD é uma ferramenta importante para a compreensão e desenvolvimento dos processos com membranas. Indicam que o estudo hidrodinâmico do processo revela as melhores condições operacionais e as características geométricas mais satisfatórias dos espaçadores, juntamente com o entendimento dos fenômenos relacionados à transferência de massa.

Alexiadis et al. (2007) realizaram uma comparação entre os resultados numéricos obtidos a partir de um modelo CFD desenvolvido por Wiley e Fletcher (2003), com resultados experimentais em um módulo de membrana de osmose inversa operando com uma solução de NaCl sob diferentes velocidades de alimentação e pressões transmembranica. Os pesquisadores modelaram o fluxo local com base na Lei de Darcy onde obtiveram uma boa concordância entre os resultados numéricos e experimentais. Os resultados mostraram que o fluxo de permeado varia em função da pressão e da velocidade, e que a concentração de soluto na superfície da membrana calculado com o modelo CFD. Os autores comentam que correlações semi-empíricas com base na teoria do filme fornecem boas aproximações para o cálculo da concentração na superfície da membrana podendo ser associado com os dados experimentais para validação de modelos numéricos.

Wardeh e Morvan (2008) fizeram simulações CFD do escoamento e da concentração de polarização em canais para aplicação na dessalinização de água. Para modelagem da transferência seletiva dos componentes do canal de alimentação para o canal permeado através da superfície da membrana usaram o código de volumes finitos Ansys-CFX. As simulações realizadas foram feitas para o fluido percorrer canais retangulares preenchidos por espaçadores, com o objetivo de compreender o efeito dos espaçadores no canal de alimentação no aumento da tensão tangencial na superfície da membrana, estudar a precipitação de sais na superfície da membrana e acompanhar o desempenho da membrana no processo de separação. Os pesquisadores usaram as mesmas equações de conservação, assim como a mesma geometria do canal e condições de contorno que Fletcher e Wiley (2004). Eles demonstraram que um canal de alimentação com espaçadores reduz a concentração de polarização na superfície da membrana, portanto terá numa diminuição na obstrução da membrana.

Fernández-Sempere et al. (2010) estudaram a formação da camada de concentração de polarização no processo de osmose inversa de fluxo cruzado onde analisaram as variáveis de processo como velocidade, concentração inicial e pressão aplicada em experimentos com Na₂SO₄ e NaCI. Os resultados mostraram uma estreita relação entre o fluxo cruzado de permeado, camada de polarização e velocidade tangencial. A pressão aplicada também teve um efeito importante na

formação da camada polarizada e no fluxo de permeado. Os pesquisadores observaram que o desenvolvimento da camada de concentração de polarização é um fenômeno afetado não só pela fluidodinâmica, mas também por outros fatores como força motriz (pressão transmembranica), características da membrana (resistência ao fluxo), concentração da solução (transferência de massa, pressão osmótica), onde todos eles são influenciados um pelo outro em uma espécie de equilíbrio durante o processo de separação.

Gruber et al. (2011) desenvolveram um modelo computacional para investigar o fluxo de água e a concentração de polarização em sistemas de membranas. O modelo CFD foi desenvolvido dentro de uma estrutura de código aberto (OpenFOAM) e condições de contorno explícitas para a velocidade e a fração mássica do soluto na membrana. O modelo foi validado comparando os resultados com os fluxos de água e de soluto publicados para sistemas acionados por pressão. Foi analisado o efeito da dinâmica do fluido próximo à membrana, os resultados mostraram que o fluxo tangencial ao longo da membrana favorece a diminuição da camada de polarização, aumentando o fluxo de água. Os resultados mostraram a formação da camada de concentração de polarização mesmo em situações de alta velocidade e que a concentração de alimentação influencia aumentando a pressão osmótica. Os autores concluem que as simulações CFD podem ser usadas para analisar os efeitos de parâmetros como velocidade, concentração, propriedades físicas do fluido sobre o fluxo em um sistema de membrana.

Sundaramoorthy et al. (2011a) propuseram um modelo analítico para descrever alguns parâmetros que interferem no desempenho de membranas espirais, incorporando variações de pressão, fluxo de alimentação e de permeado, concentração de soluto na alimentação e condições uniformes de pressão no canal de permeado. Neste trabalho são apresentados estudos teóricos sobre o desenvolvimento de modelo matemático e métodos para estimativa de parâmetros do modelo, sendo assumido o modelo da difusão da solução para o transporte de solvente e soluto através da membrana. A validação do modelo matemático com dados experimentais foi apresentada por Sundaramoorthy et al. (2011b), tendo como soluto o clorofenol. Os experimentos foram realizados variando a vazão de alimentação, concentração de alimentação e pressão de alimentação. O modelo analítico foi capaz de prever o desempenho do módulo com 4% de erro para vazão

de concentrado, 10% de erro para a concentração de permeado e 5% de erro para o coeficiente de rejeição, em relação aos dados experimentais.

Srinivasan et al. (2011) verificaram a validade do modelo proposto por Sundaramoorthy et al. (2011a), com dados experimentais usando o dimetilfenol como soluto. Foram estimados parâmetros como coeficiente de transporte de soluto e solvente. Os resultados mostraram que o coeficiente de transferência de massa é influenciado não só pela velocidade do fluido, mas também pelo fluxo de solvente e concentração de soluto. A comparação do modelo com as observações experimentais demonstrou que o modelo foi capaz de prever a concentração de permeado com erro de 12%, vazão de concentrado com erro de 5% e coeficiente de rejeição com erro de 2%.

Lin et al. (2012) desenvolveram um modelo usado em membranas espirais para aplicações em separação de gases, obtido a partir das equações de Navier-Stokes e equações diferenciais de transferência de massa. Os resultados da permeação da mistura de nitrogênio e outros gases através de uma membrana enrolada em espiral indicaram como melhores condições de operação, para a mistura de N₂-CH₄, uma pequena curvatura do rolo, pequena velocidade inicial, alta pressão de alimentação e longo comprimento da folha da membrana, para a mistura N₂-C₃H₈, uma pequena curvatura do rolo, velocidade inicial media, pressão de alimentação media e comprimento curto da membrana.

Salcedo-Díaz et al. (2014) estudaram a formação da camada de polarização através da interferometria holográfica digital para visualização da camada polarizada, em um experimento com um módulo de membrana para uma dada pressão transmembranica, diferentes velocidades e concentrações de alimentação. Os resultados mostraram um aumento contínuo da camada de polarização ao longo do canal. Eles observaram que o aumento da velocidade do fluido no interior do canal leva a uma redução no acúmulo de sais na superfície da membrana devido à movimentação tangencial da solução no interior do canal. Também pode ser observado que a concentração de alimentação afeta substancialmente o fluxo de permeado, em função da pressão osmótica da solução. Os autores comentam que a espessura camada de polarização pode ser reduzida com uso de espaçadores para promover uma turbulência no canal, melhorando o

desempenho do processo com a redução da resistência a passagem de fluido através da membrana.

Al-Obaidi e Mujtaba (2016) desenvolveram modelo matemático dinâmico baseado no modelo solução-difusão junto com o mecanismo de concentraçãopolarização, para membranas de osmose inversa, validado no estado estacionário com dados da literatura para tratamento de água, sendo investigados efeitos no fluxo de permeado, recuperação, rejeição de sais e pressão. O modelo pode prever o comportamento dinâmico do fluxo de água, fluxo de soluto e concentração de soluto na superfície da membrana, sendo usado para simulação de vários parâmetros do processo.

Shirazi et al. (2016) mostram diversas pesquisas que utilizam simulações de CFD aplicadas a processos com membranas, para estudar fenômenos de transferência de movimento, calor e massa em módulos de membranas, através do aperfeiçoamento hidrodinâmico e da investigação do efeito de várias geometrias de espaçadores, procurando entender melhor os mecanismos de separação. Foi visto que muitos dos trabalhos estão concentrados na otimização hidrodinâmica e no efeito da geometria dos espaçadores, sendo poucos os que estudam os mecanismos de transferência de massa através da membrana. Os autores concluem que os programas de modelagem e simulação CFD, podem fornecer informações importantes para o desenvolvimento de novas membranas.

Gu et al. (2017) estudaram a influência de diferentes tipos de configurações de espaçadores de alimentação no desempenho de membranas por meio de simulação CFD tridimensional. Foi empregando o modelo da difusão de solução para o transporte de solvente e soluto através de membranas de osmose inversa. Condições de contorno para a membrana foram incorporadas ao modelo computacional, podendo ser usado para previsões do desempenho da membrana, como fluxo de água, concentração de polarização e queda de pressão, para um determinado tipo de geometria do espaçador. Desta forma, os resultados sobre a concentração de polarização podem auxiliar na avaliação de incrustações na membrana, visto que as áreas de aumento de concentração ficam mais vulneráveis à deposição de partículas de soluto, dificultando a passagem de fluido através da membrana.

A adoção da dinâmica dos fluidos computacional (CFD) por diversos pesquisadores tem se tornado comum no estudo dos processos de separação por membranas como uma ferramenta para simulação, visualização e análise dos fenômenos de transferência envolvidos nestes processos. Segundo Haidari et al. (2018), as principais vantagens dos modelos CFD sobre os experimentos em laboratório são os menores custos operacionais e a maior capacidade de controle dos parâmetros específicos do processo, além de auxiliar na obtenção de parâmetros de difícil determinação experimental.

CAPÍTULO 3 – METODOLOGIA

Neste capítulo é apresentado a descrição do modelo matemático implementado, das informações acerca do domínio computacional de estudo e das condições de contorno com o objetivo de analisar e validar a modelagem do problema físico do escoamento tanto em uma membrana plana 2D como em um módulo de membrana 3D: plana, curva e em espiral.

A pesquisa foi desenvolvida na Universidade Federal de Campina Grande / Centro de Ciências e Tecnologia / Unidade Acadêmica de Engenharia Química / Laboratório de Pesquisa em Fluidodinâmica e Imagem (LPFI).

3.1 Geometria e Malha Numérica

Com o objetivo de validar o modelo matemático apresentado neste Capítulo, optou-se inicialmente em trabalhar com um módulo de membrana mais simples, em duas dimensões, baseado nos trabalhos realizados por Wiley e Fletcher (2003), Fletcher e Wiley (2004) e Wardeh e Morvan (2008), de modo que a solução obtida possa ser comparada com os resultados disponíveis na literatura, como no trabalho de Alexiadis et al. (2007) e, posteriormente foi aplicada a uma membrana em forma de espiral.

O problema físico estudado consiste do escoamento de uma solução salina tangencial à membrana, aplicando-se uma pressão transmembranica para que o processo de separação ocorra.

A representação geométrica das membranas foi desenvolvida software Autodesk INVENTOR[®] 2016. A metodologia adotada para a criação da geometria deste sistema consistiu basicamente em confeccionar uma montagem entre a geometria correspondente ao domínio concentrado e ao domínio permeado criadas no software. Finalizada a geometria, a mesma é armazenada e exportada em um arquivo no formato *step* (*.stp), o qual é utilizado pelo software Ansys Mesh para importação da geometria e, em seguida ser gerada a malha computacional.

A geração da malha numérica foi feita no software Ansys Mesh[®] 15.0, onde foram geradas várias malhas a fim de se obter malhas de boa qualidade e

densidade de pontos nodais compatível com o limite computacional das máquinas (computadores) disponíveis para as simulações. No presente trabalho, optou-se por uma malha estruturada com elementos hexaédricos.

Para o estudo do comportamento fluidodinâmico do processo de separação de sais por uma membrana polimérica, buscou-se desenvolver um modelo matemático que se adequasse a situações mais próximas da realidade e que pudesse ser validado com dados experimentais reportados na literatura.

As simulações foram realizadas em máquinas com processador Intel Core 17-3770 3.40 Ghz e 16 GB de memória RAM disponibilizados no LPFI. As simulações foram feitas utilizado o pacote computacional Ansys CFX[®] 15.0 com um critério de convergência de 10⁻¹⁰ em relação ao erro residual RMS (*Root Mean Square*) para as variáveis do escoamento.

3.2 Modelo Matemático

Para o estudo do processo de separação de sais por membrana foi desenvolvido um modelo matemático baseado nos trabalhos realizados por Fletcher e Wiley (2004) e posteriormente por Wardeh e Morvan (2008). Para isto, foram definidas as seguintes considerações:

- O escoamento é considerado laminar, isotérmico, incompressível e em regime permanente;
- O coeficiente de rejeição da membrana, *R* e Permeabilidade hidráulica
 K, são constantes;
- O efeito gravitacional desprezível;
- A membrana sendo representada pela interface de separação dos canais.

Desta forma, o escoamento apresentado pelo problema proposto pode ser descrito pelas equações de conservação de massa e de quantidade de movimento, em conjunto com as equações de conservação das espécies químicas, que, juntas, constituem um conjunto de equações diferenciais parciais. Conservação da massa:

$$\nabla \cdot \left(\rho \vec{U} \right) = 0 \tag{3.1}$$

onde ρ é a massa específica da solução e \overline{U} é o vetor velocidade.

- Conservação de momento:

$$\nabla \cdot \left(\rho \vec{U} \times \vec{U} \right) = -\nabla P + \nabla \cdot \mu \left(\nabla \vec{U} \times \left(\nabla \vec{U} \right)^{T} - \frac{2}{3} \phi \nabla \cdot \vec{U} \right)$$
(3.2)

onde *P* é a pressão, μ é a viscosidade dinâmica e φ representa a matriz identidade.

- Conservação de espécies químicas:

$$U \cdot \nabla C_s = D_{AB} \nabla^2 C_s \tag{3.3}$$

onde C_s corresponde a concentração de soluto, D_{AB} é o coeficiente de difusão de massa.

A velocidade de permeação (v_w) é especificada por analogia a lei de Darcy para meios porosos (Equação 3.4). A permeação ocorre devido à diferença de pressão aplicada entre os canais de alimentação e permeado.

$$v_{w} = \mathcal{K}(\Delta \mathsf{P}_{\mathsf{TM}} - \Delta \pi) \tag{3.4}$$

onde *K* é um coeficiente baseado no fluxo de permeação do solvente puro, ΔP_{TM} é a pressão transmembranica e $\Delta \pi$ é o diferencial da pressão osmótica através da membrana.

Para a verificação e validação do modelo desenvolvido foram utilizados como coeficiente *K*, expressões denominadas K1 e K2 em função da pressão transmembranica, obtidas a partir de dados experimentais conforme é apresentado no Apêndice A. A escolha entre K1 e K2 ocorre em função da velocidade média e pressão de trabalho.

A pressão transmembranica (ΔP_{TM}) se refere à quantidade de pressão aplicada no lado de alimentação da membrana menos a pressão do permeado, calculada através da Equação (3.5) (WANG et al., 2011).

$$\Delta \mathsf{P}_{\mathsf{TM}} = \left(\frac{P_e - P_s}{2}\right) - P_p \tag{3.5}$$

onde: P_e , P_s e P_p são as pressões na entrada da membrana, saída do concentrado e saída do permeado, respectivamente.

O $\Delta\pi$ corresponde à diferença de pressão osmótica entre as soluções em ambos os lados da membrana (BAKER, 2012).

$$\Delta \pi = \pi_a - \pi_\rho \tag{3.6}$$

onde: π_a e π_p são as pressões osmóticas da solução de alimentação e permeado, respectivamente.

3.2.1 Condições de Contorno

Para a solução das equações diferenciais do modelo, foram definidas condições de contorno nas fronteiras dos domínios, conforme ilustrada na Figura 3.1.



Figura 3.1: Geometria usada na simulação 2D.

Fonte: Adaptado de Fletcher e Wiley (2004).

Na entrada, foi especificado um perfil de velocidade completamente desenvolvido (u) e uma fração de massa do soluto (m_{Ao}).

$$\begin{cases} u = 6\overline{u} \frac{y}{h_c} \left(1 - \frac{y}{h_c}\right) \\ v = 0 \\ m_A = m_{A_0} \end{cases}$$
(3.7)

Nas paredes sem membrana, foram aplicadas condições de não deslizamento e sem fluxo de soluto.

$$\begin{cases} u = 0 \\ v = 0 \\ \frac{\partial m_A}{\partial y} = 0 \end{cases}$$
(3.8)

No lado do canal de concentrado da membrana, a velocidade tangencial, ou seja, tangente a superfície da membrana (u) foi ajustada para 0 e a velocidade de permeação (v_w), é especificada.

Os fluxos, convectivo e difusivo, devem ser balanceados em ambos os lados da membrana, levando-se em conta que nem todo o soluto permeia através da membrana.

$$\begin{cases} u = 0 \\ v = v_w \\ \rho_w D_{AB} \frac{\partial m_A}{\partial y} + \rho_w m_{Aw} v_w R = 0 \end{cases}$$
(3.9)

No lado do canal permeado da membrana foram especificadas as seguintes condições:

$$\begin{cases}
 u = 0 \\
 v = v_{p} = v_{w} \frac{\rho_{w}}{\rho_{p}} \\
 \rho_{p} D_{AB} \frac{\partial m_{A}}{\partial y} + \rho_{p} m_{Ap} v_{p} = \rho_{w} m_{Aw} v_{w} (1 - R)
 \end{cases}$$
(3.10)

Nas seções de saída do concentrado e do permeado definiu-se pressões iguais a atmosférica.

$$P = P_{atm} \tag{3.11}$$

As propriedades físicas e de transporte da solução, variam de acordo com a concentração do soluto, foram obtidas com auxílio das Equações (3.12 a 3.15) (GERALDES et al., 2001).

$$\pi = 805.1 \times 10^5 \, m_A \tag{3.12}$$

$$\mu = 0.89 \times 10^{-3} (1 + 1.63 m_A) \tag{3.13}$$

$$D_{AB} = \max(1.61x10^{-9}(1-14m_A), 1.45x10^{-9})$$
(3.14)

$$\rho = 997.1 + 694 m_A \tag{3.15}$$

Onde m_A é a fração mássica do soluto, π é a pressão osmótica da solução aquosa (Pa), μ é a viscosidade (Pa s), D_{AB} é o coeficiente de difusão de sal na água (m²/s) e ρ é a densidade do fluido (kg/m³). Geraldes et al. (2001) comentam que essas expressões são válidas para fração mássica de sal de até 0,09. Para soluções mais concentradas devem ser usadas relações alternativas para essas propriedades conforme citam Wardeh e Morvan (2008).

Para as simulações, levou-se em consideração que a solução de alimentação é uma mistura multicomponente composta por água e cloreto de sódio. Na Tabela 3.1 são apresentadas as propriedades físico-químicas adotadas no modelo matemático.

Tabela 3.1: Propriedades físico-químicas dos componentes da mistura.

Componente	Massa Molar	Densidade
Água	18,05 kg/kmol	997 kg/m ³
NaCl	58,44 kg/kmol	2165 kg/m ³

Fonte: O autor (2020).

3.3. Módulo de Separação Usando Membranas

3.3.1 Módulo com Membranas Planas

Inicialmente tomou-se como ponto de partida o estudo do comportamento fluidodinâmico em um canal retangular 2D semelhante ao usado por Fletcher e Wiley (2004) e posteriormente por Wardeh e Morvan (2008).

O domínio de estudo foi dividido em dois domínios, um denominado Canal de Concentrado e outro Canal de Permeado. O domínio Canal de Concentrado apresenta uma entrada de efluente e uma saída de concentrado e o Canal de Permeado uma saída de permeado. As demais fronteiras superior e inferior correspondem à região de parede e a fronteiras laterais como simetria, conforme ilustra s Figura 3.2. O módulo de separação tem um comprimento total de 280 mm, os canais de concentrado e de permeado têm alturas de 2 mm e 1,2 mm, respectivamente. Nas simulações, foram adicionadas regiões de parede não porosa próxima da entrada e da saída, localizadas em $L_{ent} = -20$ mm e $L_{sai} = 260$ mm, para garantir que não haja nestas regiões interferência de borda nos escoamentos.

Figura 3.2: Detalhe das fronteiras e do domínio de estudo em vista isométrica para módulo de membrana 2D.



Fonte: Acervo do autor.

Em seguida, foi definida uma geometria tridimensional e gerada a malha com elementos hexaédricos baseados nas dimensões propostas por Alexiadis et al. (2007). Os domínios do concentrado e permeado apresentam as seguintes dimensões: comprimento total de 276 mm, altura dos canais de concentrado e de permeado de 2,5 mm e 2 mm, respectivamente. Também, foram adicionadas regiões de parede não permeável próxima da entrada e da saída do módulo, de comprimento L_{ent} = 8 mm e L_{sai} = 8 mm. A largura dos canais é de 50 mm, conforme ilustra a Figura 3.3.

Para realizar as simulações usando esta geometria tridimensional (Figura 3.3) foi utilizado o modelo matemático aplicado nas simulações do domínio computacional bidimensional apresentado no início desta seção.



Figura 3.3: Geometria da membrana plana tridimensional.

Vista Lateral Esquerda



Vista Frontal





3.3.1.1 Efeito do Sentido de Escoamento

Visando observar a influência do sentido de escoamento na dinâmica do processo de separação, foram definidos vários sentidos para o escoamento nas regiões de fronteira, entrada e saída do módulo de membrana, considerando os respectivos eixos de coordenadas.

Para esta análise tomou-se como referência os eixos de coordenadas do módulo da membrana x, y e z, para definição dos sentidos das correntes de alimentação, saída de permeado e saída de concentrado. Foi definida como condição de contorno a entrada do canal no sentido positivo do eixo x, para a corrente de alimentação. Para as correntes de permeado e concentrado, foram definidas como condição de contorno as saídas de permeado e concentrado nos sentidos positivo e negativo para os eixos x e z. Na direção do eixo y foi mantida a condição de parede, visto que conforme a configuração física do módulo de membrana não há escoamento de saída, de permeado ou de concentrado, nesta direção de coordenada.

3.3.2 Módulo com Membranas Curvas

Para a análise do efeito da curvatura do módulo de membrana sobre os resultados do processo de separação da membrana foi utilizado o mesmo modelo matemático da membrana plana em três dimensões, aplicado a módulos geométricos com curvaturas diferentes. Nestes casos, a geometria modelada teve como base as mesmas dimensões dos canais usadas para a membrana plana tridimensional (comprimento, altura, largura, parede não porosa nas regiões próxima da entrada e saída), descritas na seção 3.3.1.

Inicialmente foi aplicada ao módulo uma pequena curvatura. Para os demais casos foi feita uma redução gradual do raio de curvatura da membrana, criando seis geometrias com curvaturas diferentes, mantendo a mesma área de permeação.

Nas Figuras 3.4 a 3.9 estão representadas as geometrias das membranas curvas com as respectivas dimensões que foram utilizadas para avaliar o efeito da curvatura sobre o processo de separação.



Figura 3.4: Geometria da membrana Curva₁.



Figura 3.5: Geometria da membrana Curva₂.

> Vista Isométrica

Fonte: Acervo do autor.



Figura 3.6: Geometria da membrana Curva₃.

Fonte: Acervo do autor.





Fonte: Acervo do autor.



> Vista Isométrica



Fonte: Acervo do autor.





Fonte: Acervo do autor.

3.3.3 Módulo com Membrana em Forma de Espiral

Visando analisar a dinâmica do processo de separação em um módulo de membrana em forma de espiral, tomou-se como ponto de partida um módulo de membrana curvado em forma de espiral com as mesmas dimensões dos canais usadas para a membrana plana tridimensional (comprimento, altura, largura, parede não porosa nas regiões próxima da entrada e saída), descritas na seção 3.3.1, conforme ilustra a Figura 3.10.

Em seguida, foi modelada uma membrana com geometria tridimensional em espiral com dimensões semelhantes a um elemento de membrana espiral comercial de tamanho reduzido, com uma, duas, três e cinco voltas, conforme ilustram as Figuras 3.11, 3.12, 3.13 e 3.14, respectivamente.

A geometria da membrana foi modelada com dois domínios, concentrado e permeado, tendo um comprimento total de 250 mm correspondente a região de permeação e a altura dos canais de concentrado e de permeado, 0,85 mm e 0,35 mm, respectivamente. Estes dois domínios foram modelados na forma de uma espiral de passo 1,2 mm, com diâmetro interno de 19 mm, correspondente ao diâmetro do tubo coletor de uma membrana comercial.

O domínio de estudo para esta configuração do módulo de membrana corresponde a dois canais curvados em forma de espiral, um canal de concentrado por onde a solução de alimentação percorre e outro canal de permeado onde a solução permeada é coletada, conforme ilustrado na Figura 3.15.

O canal de concentrado é composto por duas folhas de membrana, uma folha na parte superior e outra na parte inferior, fornecendo duas regiões de área ativa para a permeação, o canal tem ainda duas regiões de parede nas laterais, uma região de entrada de efluente e outra de saída do concentrado, formando um canal por onde o fluido de alimentação entra tangencialmente a superfície da membrana e o fluido concentrado deixa o módulo.

O canal de permeado é formado por um espaço onde o fluido permeado através das folhas de membrana é coletado perpendicularmente ao sentido da corrente de alimentação. Apresenta uma região de parede nas laterais e sobre a superfície externa do módulo. O fluido permeado coletado segue então no canal até a região de saída.





Vista Frontal



Fonte: Acervo do autor.



> Vista Isométrica



> Vista Frontal



Fonte: Acervo do autor.



> Vista Isométrica



> Vista Frontal







> Vista Isométrica



Fonte: Acervo do autor.


> Vista Isométrica



Fonte: Acervo do autor.

A Figura 3.15 ilustra o domínio de estudo de um elemento composto por duas folhas de membrana enrolado em espiral com uma volta, em vista isométrica.



Figura 3.15: Domínio de estudo de uma membrana espiral com uma volta.

Fonte: Acervo do autor.

Nesta configuração tem-se o mesmo sentido para o escoamento das correntes de alimentação e da saída de concentrado, direção +z. Já a corrente de saída do permeado tem sentido perpendicular a corrente de alimentação, direção -y. A configuração foi tomada desta forma para que possa reproduzir com maior fidelidade a dinâmica que ocorre em um elemento de membrana espiral comercial.

3.4 Aplicação do Índice de Convergência de Malha

O estudo de dependência de malha visa determinar o ICM da malha e assim quantificar as incertezas em relação aos erros de discretização, e consequentemente determinar a melhor malha que não interfira nos resultados obtidos. O método utilizado é baseado na Extrapolação de Richardson, o qual se baseia no pressuposto que qualquer solução discreta possui uma representação em série. A ideia desta metodologia é estimar a solução exata a partir da extrapolação das soluções das malhas existentes e pelo cálculo do índice de convergência relativo às malhas produzidas. Celik et al. (2008) sugerem 5 passos para determinar o ICM, e assim quantificar as incertezas em relação aos erros de discretização e determinar a melhor malha a ser utilizada nas simulações.

Inicialmente determinou-se um tamanho representativo de malha *h*, de acordo com a Equação (3.16).

$$h = \left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\Delta V_i\right]^{1/3}$$
(3.16)

onde *N* é o número de elementos da malha utilizada para o cálculo computacional e ΔV_i é o volume ocupado pelo elemento *i*.

A partir deste valor, foram geradas três malhas, de modo que a razão de refino $r_{ij} = h_{grosseira}/h_{refinada}$ fosse maior do que 1,3 para cada malha. No presente trabalho adotou-se igual $r_{ij} = 2,0$. O refinamento das malhas deve ser feito sistematicamente em todas as direções, ou seja, devem ser utilizadas malhas com elementos de formatos similares.

Sejam h_1 a malha mais refinada, e h_3 a malha mais grosseira, foram definidos r_{21} e r_{32} pelas Equações (3.17) e (3.18).

$$r_{21} = \frac{h_2}{h_1}$$
(3.17)

$$r_{32} = \frac{h_3}{h_2} \tag{3.18}$$

Os resultados de uma dada variável foram definidos como sendo ϕ_1 , ϕ_2 e ϕ_3 para as respectivas malhas.

Em seguida, foi determinada a ordem de convergência ou ordem aparente *p* a partir das Equações (3.19), (3.20) e (3.21), que podem ser resolvidas utilizando um método numérico iterativo.

$$p = \frac{1}{\ln(r_{21})} \left| \ln \left| \frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \right| + q(p) \right|$$
(3.19)

$$q(p) = \ln\left(\frac{r_{21}^{p} - s}{r_{32}^{p} - s}\right)$$
(3.20)

$$s = sinal\left(\frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}}\right)$$
 (3.21)

onde $\varepsilon_{32} = \phi_3 - \phi_2$, e $\varepsilon_{21} = \phi_2 - \phi_1$.

Para verificar a convergência da solução, foi utilizada a Equação 3.22 determina-se o valor da constante *C*. Assim, se 0 < C < 1 indica que a convergência é monotônica, *C* < 0 indica convergência oscilatória e *C* > 1 divergência da solução (PAUDEL; SAENGER, 2017).

$$C = \frac{\phi_2 - \phi_1}{\phi_3 - \phi_2} \tag{3.22}$$

As soluções extrapoladas foram determinadas de acordo com as Equações (3.23) e (3.24).

$$\phi_{ext}^{21} = \frac{(r_{21}^{\rho}\phi_1 - \phi_2)}{(r_{21}^{\rho} - 1)}$$
(3.23)

$$\phi_{ext}^{32} = \frac{(r_{32}^{\rho}\phi_2 - \phi_3)}{(r_{32}^{\rho} - 1)}$$
(3.24)

Os erros relativos aproximados entre as malhas foram então determinados de acordo com as Equações (3.25) e (3.26).

$$e_a^{21} = \left| \frac{\phi_1 - \phi_2}{\phi_1} \right|$$
(3.25)

$$e_a^{32} = \left| \frac{\phi_2 - \phi_3}{\phi_2} \right|$$
 (3.26)

Os erros relativos extrapolados entre as malhas foram determinados de acordo a Equações (3.27) e (3.28).

$$e_{ext}^{21} = \left| \frac{\phi_{ext}^{21} - \phi_1}{\phi_{ext}^{21}} \right|$$
(3.27)

$$\boldsymbol{e}_{ext}^{32} = \left| \frac{\phi_{ext}^{32} - \phi_2}{\phi_{ext}^{32}} \right|$$
(3.28)

Dessa forma, os Índices de Convergência de Malha (ICM) foram determinados utilizando as Equações (3.29) e (3.30).

$$ICM_{21} = \frac{1,25e_a^{21}}{r_{21}^p - 1}$$
(3.29)

$$ICM_{32} = \frac{1,25e_a^{32}}{r_{32}^p - 1}$$
(3.30)

Para aplicação dessa metodologia de verificação, é necessário garantir que as malhas estejam dentro do intervalo assintótico. Desta forma, Roache (1994) afirma que em casos onde a solução exata não é conhecida, a fórmula dada pela Equação (3.31) indica que o intervalo assintótico foi atingido.

$$ICM_{32} \approx r^{\rho} ICM_{21} \tag{3.31}$$

3.5 Casos Estudados

3.5.1 Membrana Plana em Duas Dimensões

Para o desenvolvimento de um modelo matemático que represente o processo de separação em uma membrana de OI, inicialmente foram simulados casos para uma geometria em 2D e comparado os resultados com o referencial reportado na bibliografia.

Os casos foram simulados para uma solução de NaCl na alimentação com concentração de 2 kg/m³, fração mássica igual a 0,002, em diferentes situações de pressão transmembranica (ΔP_{TM}) e número de Reynolds (Re) da corrente de alimentação, com base nas condições usadas por Fletcher e Wiley (2004) e Wardeh e Morvan (2008). Os casos simulados estão mostrados nas Tabelas 3.2 e 3.3.

Tabela 3.2: Casos simulados para diferentes números de Reynolds (2D).

ΔP _{TM} (kPa)	Re ₁	Re ₂	Re ₃	Re₄	Re₅	
500	8	20	40	100	200	

Fonte: O autor (2020).

Re	ΔP _{TM1} (kPa)	ΔP _{TM2} (kPa)	ΔP _{TM3} (kPa)	ΔP _{TM4} (kPa)
40	500	600	700	800

Tabela 3.3: Casos simulados	para diferentes	pressões transmem	branica (2l	D).
			`	

Fonte: O autor (2020).

3.5.2 Membrana Plana em Três Dimensões

Visando definir a malha a ser utilizada foi realizado o estudo de dependência de malha sobre os resultados. Para tanto adotou-se o método do Índice de Convergência de Malha (ICM), descrito na seção anterior.

As simulações foram realizadas considerando, em todos os casos, a mesma concentração da solução de alimentação da membrana e mesma velocidade média na corrente de alimentação para cada pressão transmembranica. O procedimento foi aplicado em três malhas diferentes mantendo a mesma razão de refino entre as malhas, conforme pede a metodologia para determinação do índice. A Tabela 3.4 mostra os casos simulados para análise do ICM.

Malhas	ΔP _{TM} = 998,7 kPa Vel. Média	ΔP _{TM} = 1198,7 kPa Vel. Média	ΔP _{TM} = 1398,7 kPa Vel. Média
Malha1 – M1	0,16 m/s	0,16 m/s	0,12 m/s
Malha1 – M2	0,16 m/s	0,16 m/s	0,12 m/s
Malha1 – M3	0,16 m/s	0,16 m/s	0,12 m/s

Tabela 3.4: Casos simulados para análise do ICM.

Fonte: O autor (2020).

Os resultados das simulações foram comparados com os dados experimentais disponibilizados em Alexiadis et al. (2007).

3.5.2.1 Avaliação do Modelo

O estudo do modelo desenvolvido foi realizado através da simulação de diferentes casos. As simulações foram realizadas, mantendo-se as mesmas características da solução de alimentação, para diferentes pressões

transmembranica e diferentes velocidade média da corrente de alimentação do módulo da membrana, com coeficiente K1 e K2, conforme é mostrado respectivamente nas Tabelas 3.5 e 3.6, objetivando comparar os resultados numéricos com dados experimentais reportados na literatura.

Vale ressaltar que a escolha dos valores de velocidade média e pressão transmembranica se deram em função dos valores atribuídos a estas variáveis disponibilizados em Alexiadis et al. (2007), tomados para fins de comparação com os resultados deste trabalho.

ΔP _™ (kPa)	898,7	998,7	1098,7	1198,7
<i>ū</i> ₁ (m/s)	0,05	0,05	0,04	0,03
ū₂ (m/s)	0,08	0,06	0,05	0,04
ū₃ (m/s)	0,10	0,08	0,07	0,05
<i>ū</i> ₄ (m/s)	0,12	0,09	0,08	0,06
<i>ū</i> ₅ (m/s)	0,13	0,10	0,09	0,07

Tabela 3.5: Casos simulados para diferentes pressões transmembranica e velocidade média da corrente de alimentação, para coeficiente K1.

Fonte: O autor (2020).

Tabela 3.6: Casos simulados para diferentes pressões transmembranica e velocidade média da corrente de alimentação, para coeficiente K2.

ΔP _{TM} (kPa)	898,7	998,7	1098,7	1198,7	1298,7	1398,7
ū₁ (m/s)	0,14	0,14	0,11	0,10	0,10	0,08
<i>ū</i> ₂ (m/s)	0,16	0,16	0,12	0,12	0,12	0,10
ū₃ (m/s)	0,18	0,18	0,14	0,14	0,14	0,12
ū₄ (m/s)	0,20	0,20	0,16	0,16	0,16	0,14
ū₅ (m/s)	0,22	0,22	0,18	0,18	0,18	0,16
<i>ū</i> ₀ (m/s)	0,24	0,24	0,20	0,20	0,19	0,18

Fonte: O autor (2020).

De posse dos dados, foi realizada uma análise estatística dos resultados obtidos a partir das medidas de dispersão, correlação e um teste estatístico disponível na literatura, com o objetivo de assegurar um bom ajuste da curva numérica com os dados experimentais.

3.5.2.2 Orientação do Escoamento

Para analisar a influência do sentido de escoamento das correntes de saída de concentrado e permeado no módulo da membrana em relação aos eixos de referência (Figura 3.16), foram realizadas simulações definindo como sentido da corrente de alimentação do módulo na direção do eixo x positivo (+x) e variando os sentidos das correntes de saída do concentrado e do permeado entre as direções dos eixos x e z, positivo e negativo, respectivamente (+x), (-x), (+z) e (-z).

Figura 3.16: Detalhe do domínio de estudo para o módulo de membrana plana 3D.



Fonte: Acervo do autor.

Em todos os casos foi considerado, a mesma concentração da solução de alimentação da membrana (2 kg/m³), mesma velocidade média na corrente de alimentação igual a 0,16 m/s e pressão transmembranica de 1198,7 kPa.

A Tabela 3.7 apresenta os casos simulados com sentidos dos escoamentos nas correntes de saída de concentrado e permeado do módulo de membrana.

Casos	Sentido do escoamento							
04303	Alimentação	Concentrado	Permeado					
Caso 01	+X	+X	+X					
Caso 02	+X	+X	-X					
Caso 03	+X	+X	+Z					
Caso 04	+X	+X	-Z					
Caso 05	+X	+Z	+X					
Caso 06	+X	+Z	-X					
Caso 07	+X	+Z	+Z					
Caso 08	+X	+Z	-Z					
Caso 09	+X	-Z	+X					
Caso 10	+X	-Z	-X					
Caso 11	+X	-Z	+Z					
Caso 12	+X	-Z	-Z					

Tabela 3.7: Casos simulados para diferentes sentidos de escoamento das correntes de saída do módulo de membrana.

Fonte: O autor (2020).

3.5.2.3 Efeito da Concentração Inicial e da Velocidade de Alimentação

A análise da resposta do modelo matemático a variação da concentração inicial e velocidade média da solução de alimentação da membrana foi realizada considerando a membrana plana em três dimensões com pressão transmembranica de 1198,7 kPa, variando a velocidade média da corrente de alimentação e as concentrações da solução de NaCl na alimentação do módulo de membrana.

Os casos simulados foram para as concentrações de alimentação no valor de 1, 2, 3 e 5 kg/m³, para as seguintes velocidades médias: 0,10; 0,12; 0,14; 0,16; 0,18; 0,20; 0,22 e 0,24 m/s.

3.5.3 Efeito da Curvatura da Membrana

Nos casos simulados para a membrana curva foram mantidas as mesmas condições de concentração, velocidade e pressão transmembranica. O modelo matemático foi o mesmo, e em todas as curvaturas foi gerada uma malha com a mesma densidade e distribuição de elementos usada na membrana plana 3D.

Esta análise foi realizada considerando a solução de alimentação com concentração de NaCl no valor de 2 kg/m³, velocidade média igual a 0,16 m/s e pressão transmembranica de 1198,7 kPa. A membrana foi curvada para diferentes raios de curvatura mantendo-se as mesmas dimensões da membrana plana 3D, conforme mostrado na Tabela 3.8.

Tabela 3.8: Casos	simulados	para diferentes	raios de	curvatura.

Vel. Média / ΔP _{TM}	Curva ₁	Curva ₂	Curva ₃	Curva ₄	Curva₅	Curva ₆
	<i>R_{cv}</i> (mm)	R _{cv} (mm)	<i>R_{cv}</i> (mm)	<i>R_{cv}</i> (mm)	<i>R_{cv}</i> (mm)	R _{cv} (mm)
0,16 m/s / 1198,7 kPa	55	38	25	15,9155	10,6103	7,9578

Fonte: O autor (2020).

3.5.4 Membrana Espiral

Neste estudo, o modelo matemático desenvolvido foi aplicado a um caso com o módulo da membrana curvada em forma de espiral considerando a solução de alimentação com concentração de NaCl no valor de 2 kg/m³, velocidade média igual a 0,16 m/s e pressão transmembranica de 1198,7 kPa.

Em seguida, o modelo foi aplicado em casos de membrana enrolada em espiral, com uma, duas, três e cinco voltas, conforme uma membrana comercial de tamanho reduzido. Para esta análise foram consideradas as seguintes condições:

- Concentração inicial da solução de NaCl de 1, 2, 3 e 5 kg/m³;
- Velocidade média da alimentação de (\overline{w}) 0,16; 0,20; 0,25 e 0,35 m/s;
- Pressão transmembranica (ΔP_{TM}) de 1000, 1100, 1200, 1300 e 1400 kPa.

CAPÍTULO 4 – RESULTADOS E DISCUSSÕES

Este capítulo apresenta os resultados e discussões obtidos a partir das simulações do processo de separação por membrana para um módulo de membrana plana 2D como em um módulo de membrana plana 3D. É apresentado o estudo da dependência de malha e validando a modelagem matemática pela comparação dos resultados numéricos com dados experimentais encontrados na literatura compatíveis com o problema físico. Ainda nesta seção são apresentados os resultados referentes à simulação do módulo de membrana 3D com diferentes curvaturas e em espiral.

4.1 Modelo Bidimensional

O estudo do processo de separação de sais por membrana foi iniciado para uma geometria em 2D, conforme descrito na seção 3.3.1.

A malha representativa do domínio foi gerada no software Ansys Mesh, conforme detalhe da região de entrada ilustrado na Figura 4.1, possuindo 96.582 elementos e 200.498 nós, com concentração de elementos próxima à superfície da membrana.



Figura 4.1: Detalhe da malha gerada para o domínio bidimensional.

Para o estudo do processo de separação por membrana foram considerados os seguintes valores baseados nos trabalhos de Fletcher e Wiley (2004) e Wardeh e Morvan (2008):

- Alimentação com solução de NaCl com concentração de 2 kg/m³;
- A velocidade de alimentação igual a 0,002 m/s (Re = 8);

Fonte: O autor (2019).

- Pressão transmembranica (ΔP_{TM}) igual a 500 kPa.
- O coeficiente de rejeição (95%), R igual a 0,95;
- O coeficiente, K igual a 2x10⁻¹⁰ m/sPa.

Para análise dos resultados foi traçada uma linha vertical a 240 mm a partir do início da membrana.

Na Figura 4.2 está representado o perfil de velocidade axial na direção *u* nos canais de concentrado e permeado, plotado em função da altura dos canais, em comparação com os resultados das simulações apresentados nos trabalhos de Fletcher e Wiley (2004) e Wardeh e Morvan (2008). Pode-se observar que as velocidades nos canais apresentam um perfil parabólico completamente desenvolvido observados em canais ao assumir escoamento laminar e regime permanente, além de desprezar os efeitos do campo gravitacional.





Fonte: O autor (2019).

Na Figura 4.3 está representado o perfil da fração mássica de NaCl nos canais de concentrado e permeado, plotado em função da altura dos canais.



Figura 4.3: Perfil da fração mássica de NaCl próximo da membrana.

Analisando a Figura 4.3 verifica-se no lado do canal de permeado, a fração mássica de NaCl se manteve baixa, com valores médios de 0,0003125, e com valores constantes, conforme esperado no processo de separação que ocorre através de uma membrana semipermeável, quando assumido o índice de rejeição de sais de 95%. Pode ser observado também, no lado do canal de concentrado, que próximo da superfície da membrana ocorre um aumento da fração mássica dos sais presentes na solução de alimentação, que diminui à medida que se afasta da membrana até atingir o valor da fração mássica da corrente de alimentação. Esta camada de concentração formada próximo a superfície da membrana é denominada concentração de polarização e de acordo com Habert et al. (2006), esse fenômeno é inerente a qualquer processo de transporte seletivo.

Os resultados apresentados nas Figuras 4.2 e 4.3 além de ratificarem os resultados dos perfis de velocidade e de fração mássica obtidos por Fletcher e Wiley (2004) e Wardeh e Morvan (2008), indicam que o modelo matemático adotado possibilita a previsão do comportamento de separação via membranas.

Este perfil para a fração mássica apresentado na Figura 4.3 é semelhante a perfis reportados na literatura, como no trabalho de Changwei et al. (2015) que realizaram um estudo numérico e experimental analisando o efeito da gravidade no desempenho de um módulo de membrana de OI. Eles obtiveram o mesmo perfil de concentração de soluto próximo da membrana, representado esquematicamente pela Figura 4.4.



Figura 4.4: Representação do fenômeno da concentração de polarização.

Fonte: Adaptado de Changwei et al. (2015).

Após a análise dos resultados da simulação para número de Reynolds igual a 8, foram realizadas simulações para números de Reynolds iguais a 20, 40, 100 e 200. Para estes casos, as simulações foram realizadas sob as mesmas condições e propriedades da simulação anterior, variado apenas número de Reynolds.

A Figura 4.5 ilustra o comportamento do perfil da fração mássica de NaCl nos canais de permeado e de concentrado em função da altura para os diferentes números de Reynolds. É possível observar em todos os casos o mesmo comportamento para o perfil da fração mássica, próximo à superfície da membrana um aumento fração mássica de NaCl e no canal de permeado uma baixa concentração, resultado do processo de separação promovido pela membrana. Observa-se também que o aumento da velocidade na corrente de alimentação, provoca um achatamento da altura da camada de concentração próximo da membrana. Gruber et al. (2011) obtiveram perfis de concentração semelhantes a estes, eles implementaram um modelo de CFD para simular sistemas de filtração direta onde foi observado que a formação da camada de concentração de polarização na superfície porosa da membrana.

Figura 4.5: Perfil da fração mássica de NaCl nos canais de permeado e concentrado para deferentes números de Reynolds.



Fonte: O autor (2019).

Para análise da variação da concentração de sais sobre a superfície da membrana foi traçada uma linha horizontal imediatamente acima da superfície da membrana ao longo do seu comprimento passando pelos pontos (0; 0; 0) e (0,25; 0; 0), no domínio do concentrado, conforme ilustra a Figura 4.6.

Figura 4.6: Posição onde foi traçada a linha sobre a superfície da membrana (2D).





Na Figura 4.7 está representada a variação da fração mássica de NaCl na superfície da membrana ao longo do canal de concentrado para diferentes números de Reynolds.

Figura 4.7: Fração mássica de NaCl na superfície da membrana ao longo do canal de alimentação para diferentes números de Reynolds.



Fonte: O autor (2019).

Analisando a Figura 4.7, pode-se observar que com o aumento do número de Reynolds, de 8 a 200, houve uma diminuição da fração mássica de NaCl junto a superfície da membrana. Esta redução é provocada pelo aumento da velocidade do fluido no canal, que promove um deslocamento dos sais retidos pela membrana, reduzindo a camada de concentração próximo da membrana, corroborando com os resultados obtidos por Gruber et al. (2011).

Verifica-se também um aumento significativo da fração mássica, a partir do início da região de permeação da membrana. Este comportamento ocorre devido ao início da permeação de água através da membrana, dessa forma a concentração de sais presentes na região próxima da membrana vai aumentando ao longo do comprimento do módulo. Comportamento semelhante foi observado por Wiley e Fletcher (2003), que desenvolveram um modelo de dinâmica dos fluidos para estudar os efeitos da concentração de polarização e descrever o fluxo através de uma membrana. Para números de Reynolds menores, por apresentarem menores velocidades, o aumento da fração mássica de NaCl foi mais suave, indicado pelo cruzamento das curvas próximo do início da região de permeação da membrana, este fato pode ser explicado pela redução da força de arraste na corrente da solução no canal do concentrado que altera o comportamento da camada limite.

Tomando para análise o número de Reynolds igual a 40, a Figura 4.8 apresenta o comportamento do perfil da fração mássica de NaCl nos canais de permeado e concentrado em função da altura do canal para diferentes pressões transmembranicas (500, 600, 700 e 800 kPa). É possível observar que os perfis de fração mássica apresentam comportamentos semelhantes, no canal de permeado têm-se uma baixa concentração de sais e no canal do concentrado, um aumento da concentração de sais próximo da membrana, como havia sido observado para diferentes números de Reynolds.

Figura 4.8: Perfil da fração mássica de NaCl nos canais de permeado e concentrado para diferentes pressões transmembranica (Re = 40).



Fonte: O autor (2019).

A Figura 4.9 ilustra a variação da fração mássica de NaCl na superfície da membrana ao longo do seu comprimento, para diferentes pressões transmembranica. Pode-se observar um comportamento semelhante, houve um aumento da fração mássica no início da região de permeação da membrana até atingir um valor praticamente constante ao longo do comprimento da membrana, apresentando uma diferença nos valores das frações mássicas em função da pressão aplicada. Esta diferença ocorre pelo fato de que com o aumento da pressão

transmembranica provoca-se um aumento da permeação de água, diminuindo o volume de água na solução de alimentação e forçando a migração de íons de sais para a superfície da membrana proporcionando um aumento da concentração de soluto. Esta variação da fração mássica ao longo do comprimento da membrana foi observada nos trabalhos de Wiley e Fletcher (2003) e Gruber et al. (2011).



Figura 4.9: Fração mássica de NaCl ao longo da superfície da membrana para diferentes pressões transmembranica (Re = 40).

Fonte: O autor (2019).

Nos processos de separação por membranas, esse comportamento deve ser analisado devido ao fato de que o aumento da concentração junto à superfície da membrana pode provocar o surgimento de incrustações levando ao aumento da pressão transmembranica, provocando uma redução do fluxo de permeado e aumento da passagem de sais, comprometendo dessa forma o rendimento do sistema de dessalinização.

A concentração de polarização tem um efeito negativo no desempenho da membrana de OI, pois atua como uma resistência hidráulica ao fluxo de água que passa através da membrana. Acumula solutos e consequentemente aumenta a pressão osmótica no interior da camada limite. Além de proporcionar a passagem de sais devido a uma maior concentração de solutos na superfície da membrana (KUCERA, 2015). Na Figura 4.10 está representado sobre um plano longitudinal xy a distribuição da fração mássica de NaCl do módulo de separação por membrana para o caso com número de Reynolds igual a 8 e pressão transmembranica igual a 500 kPa. É igualmente representado nesta figura três regiões em destaque: região de entrada, intermediária e de saída do módulo.

Figura 4.10: Contornos da fração mássica de NaCl ao longo dos canais do módulo de membrana (Re = 8; ΔP_{TM} = 500 kPa).





Os resultados apresentados na Figura 4.10 indicam a formação de uma camada limite de concentração junto à superfície da membrana, a partir do início da região de permeação da membrana e aumentando gradualmente ao longo de todo o canal. Essa camada se prolonga por toda a extensão da membrana passando na pela região intermediária até o final da membrana, próximo da saída do módulo. Nota-se que, devido à permeação da água, a camada de concentração de sais aumenta suavemente na direção de saída do módulo, ficando a região mais concentrada na superfície da membrana.

De acordo com os resultados apresentados, o modelo proposto se mostrou satisfatório a partir da comparação dos resultados da simulação com os resultados obtidos em outros trabalhos com geometria similar, quando submetido a variações de velocidade e pressão, como os trabalhos de Fletcher e Wiley (2004) e Wardeh e Morvan (2008), sendo importante como ponto de partida para a modelagem de sistemas de separação por membrana em 3D e/ou com outras configurações. Os resultados obtidos corroboram com a observação feita por Wardeh e Morvan (2008), o modelo matemático utilizado pode ser estendido a outras configurações podendo incluir canal de membrana com permeação de dois lados, semelhante ao canal de alimentação da maior parte dos módulos comerciais que apresentam várias camadas de membrana.

4.2 Modelo Tridimensional

Com o intuito de avaliar a aplicabilidade e robustez do modelo matemático proposto na análise bidimensional, nos casos estudados no domínio tridimensional foi inicialmente avaliado a não dependência dos resultados com relação a malha utilizada, usando o método do Índice de Convergência de Malha (ICM), e em seguida, comparou-se os resultados obtidos com a malha escolhida com dados experimentais reportados na literatura.

4.2.1 Análise da Dependência de Malha

A análise da dependência de malha sobre os resultados das simulações foram feitas adotando-se o método do Índice de Convergência de Malha (ICM), mencionado na seção 3.4. Para isso, foram geradas três malhas denominadas M1, M2 e M3, com diferentes refinamentos, sendo M1 a malha mais refinada, M2 uma malha intermediária e M3 a malha que apresenta o menor número de elementos (Tabela 4.1).

Foram analisadas as malhas para uma membrana plana em 3D sob três situações, variando as pressões transmembranica e velocidade média. Para resolver as equações de conservação da massa, momento e de transferência de massa, além das condições de contorno descritas no capítulo anterior, foram consideradas as seguintes condições:

- Alimentação com solução de NaCl com concentração de 2 kg/m³;
- A velocidade de alimentação, *ū* igual a 0,12 e 0,16 m/s;
- O coeficiente de rejeição (99,5%), *R* igual a 0,995;
- O coeficiente, K igual a 9,72x10⁻¹² m² s/kg;
- Pressão transmembranica, ΔP_{TM} igual a 998,7; 1198,7 e 1398,7 kPa.

A Tabela 4.1 mostra os casos analisados, descrevendo o tempo de simulação, para as malhas de diferentes números de elementos, velocidade média e pressão transmembranica.

Malhas	Número de ElementosTempo de Simulação $\bar{u} = 0,16 \text{ m/s e}$ $\Delta P_{TM} = 998,7 \text{ kPa}$		Tempo de Simulação \bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa	Tempo de Simulação $\bar{u} = 0,12 \text{ m/s e}$ $\Delta P_{TM} = 1398,7 \text{ kPa}$	
M1	2.950.800	9h53'20"	11h56'48"	9h27'03"	
M2	378.240	1h14'19"	1h17'15"	1h04'51"	
М3	49.650	5'49"	6'21"	6'49"	

Tabela 4.1: Informações das malhas criadas para análise o ICM.

Fonte: O autor (2020).

A razão de refino (r_{ij}) utilizada entre as malhas foi de 2,0, valores esses que estão dentro do proposto por Roache (1994). Detalhes das malhas confeccionadas são apresentados na Figura 4.11.



Figura 4.11: Representação da malha do módulo de separação plana com membranas e detalhes das malhas (a) M1, (b) M2; (c) M3.

(a) M1

(b) M2



(c) M3

Fonte: O autor (2020).

Para a avaliação da independência dos resultados com a malha no processo de separação de sais por membranas, foi utilizado o modelo matemático usado no domínio bidimensional no domínio tridimensional.

As Tabelas 4.2 a 4.4 apresentam os resultados do estudo de convergência de malha do fluxo volumétrico de permeado para velocidade média na corrente de alimentação do módulo e diferença de pressão transmembranica iguais a (0,16 m/s e 998,7 kPa), (0,16 m/s e 1198,7 kPa) e (0,12 m/s e 1398,7 kPa), respectivamente.

Tabela 4.2: Avaliação do ICM para o fluxo volumétrico de permeado (\bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 998,7 kPa).

M1 (L/m²h)	M2 (L/m ² h)	M3 (L/m²h)	р	${{oldsymbol{\phi}_{ext}}^{21}}$ (L/m ² h)	ICM ₂₁	ICM ₃₂	С	r [₽] ICM ₂₁
29,2464	29,2477	29,2957	2,6359	29,2464	0,0002%	0,0060%	0,027	0,0057%

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.3: Avaliação do ICM para o fluxo volumétrico de permeado (\bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa).

M1 (L/m²h)	M2 (L/m ² h)	M3 (L/m²h)	р	φ _{ext} ²¹ (L/m ² h)	ICM ₂₁	ICM ₃₂	С	r [₽] ICM ₂₁
36,2283	36,2290	36,2843	3,1909	36,2283	0,00003%	0,0026%	0,013	0,0024%

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.4: Avaliação do ICM para o fluxo volumétrico de permeado (\bar{u} = 0,12 m/s e ΔP_{TM} = 1398,7 kPa).

M1 (L/m²h)	M2 (L/m²h)	M3 (L/m²h)	р	${{oldsymbol{\phi}_{ext}}^{21}}$ (L/m ² h)	<i>ICM</i> ₂₁	<i>ICM</i> 32	С	r [₽] ICM ₂₁
43,1735	43,1781	43,2363	1,8549	43,1731	0,0011%	0,0149%	0,079	0,0145%

Fonte: O autor (2020).

De acordo como os resultados apresentados, é possível observar uma redução na condição de convergência, visto que os valores do índice $ICM_{21} < ICM_{32}$, indicando que a dependência dos resultados da variável escolhida com o tamanho dos elementos da malha foi reduzido e se aproxima de uma solução independente da malha.

Os índices ICM_{21} e ICM_{32} estão dentro do intervalo assintótico de 10% conforme limite estabelecido em estudo realizado por Celik e Karatekin (1997). Os resultados mostram que a solução extrapolada está próxima da solução exata para esta variável devido a proximidade dos valores de $r^{\rho}ICM_{21}$ e ICM_{32} .

Pelos critérios estabelecidos por Paudel e Saenger (2017), em todos os casos o valor da constante *C* encontra-se entre 0 e 1, indicando uma convergência monotônica da solução.

As Figuras 4.12 a 4.14 apresentam os resultados obtidos para o fluxo volumétrico de permeado para velocidade média na corrente de alimentação do módulo e diferença de pressão transmembranica (0,16 m/s e 998,7 kPa; 0,16 m/s e 1198,7 kPa; e 0,12 m/s e 1398,7 kPa), para diferentes tamanho de malhas M1, M2 e M3, respectivamente, bem como os valores extrapolados para a malha, em comparação com a solução extrapolada M_{Ext}. Nestes casos, os resultados indicam que quanto mais refinada a malha, mais a solução se aproxima do valor assintótico da solução da malha extrapolada M_{Ext}, sendo a solução da malha M1 a que mais se aproximou. Para os casos analisados, a solução extrapolada representa uma estimativa da solução exata da variável estudada.



Figura 4.12: Fluxo de permeado para diferentes malhas (\bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 998,7 kPa).





Figura 4.13: Fluxo de permeado para diferentes malhas (\bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa).

Figura 4.14: Fluxo de permeado para diferentes malhas (\bar{u} = 0,12 m/s e ΔP_{TM} = 1398,7 kPa).



Ainda no estudo da dependência de malha foram traçadas linhas verticais distribuídas ao longo do canal de concentrado em quatro posições diferentes (L1 = 0.04 m; L2 = 0.11 m; L3 = 0.18 m e L4 = 0.25 m) a partir do início da membrana, conforme ilustrado na Figura 4.15.





Fonte: O autor (2020).

A Tabela 4.5 apresentam os resultados do estudo do índice de convergência de malha para a concentração média para as linhas posicionadas ao longo do canal de concentrado para velocidade média de 0,16 m/s e pressão transmembranica de 998,7 kPa.

Tabela 4.5: Re	sultados do	ICM para	concentração	(<i>ū</i> = 0,16 r	n/s, ΔΡ _{τΜ} =	998,7 kPa)
----------------	-------------	----------	--------------	---------------------	-------------------------	------------

Linha	M1 (kg/m³)	M2 (kg/m ³)	M3 (kg/m³)	${{oldsymbol{\phi}_{ext}}^{21}}$ (kg/m ³)	${{oldsymbol{\phi}_{ext}}^{32}}$ (kg/m ³)	ICM ₂₁	ICM ₃₂	<i>r[₽]ICM</i> 21
L1	2,0053	2,0028	2,0005	2,0143	2,0095	0,106%	0,160%	0,207%
L2	2,0189	2,0162	2,0091	2,0226	2,0229	0,091%	0,238%	0,256%
L3	2,0298	2,0269	2,0172	2,0331	2,0307	0,123%	0,270%	0,340%
L4	2,0393	2,0360	2,0248	2,0419	2,0432	0,164%	0,311%	0,385%

Fonte: O autor (2020).

De acordo com os resultados apresentados na Tabela 4.5, pode-se observar uma diminuição do valor ICM_{32} para o ICM_{21} o que indica que a solução se aproxima da independência de malha para esta variável, assim como foi observado para a variável fluxo de permeado na Tabela 4.2.

Comparando-se os valores de $r^{p}ICM_{21}$ e ICM_{32} é possível observar que a solução extrapolada está próxima da solução exata para esta variável, devido à proximidade dos valores de ICM_{32} e $r^{p}ICM_{21}$.

A Figura 4.16 ilustra os valores dos perfis de concentração ao longo das linhas L1, L2, L3 e L4, para as malhas M1, M2 e M3, em comparação com a solução da malha extrapolada, para (\bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 998,7 kPa).



Figura 4.16: Perfil de concentração no canal de concentrado ao longo das linhas (a) L1, (b) L2, (c) L3 e (d) L4, para diferentes malhas (\bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 998,7 kPa).

Fonte: O autor (2020).

É possível observar na Figura 4.16 que para a variável concentração a solução obtida da malha M1 foi a que mais se aproximou da solução extrapolada para as quatro linhas. Pode-se observar que na região próxima da membrana, a malha M3 apresentou uma discrepância em relação às malhas M1 e M2. Essa discrepância é causada devido à qualidade do refinamento da malha na região próxima da fronteira de separação, onde há a formação da camada limite de concentração. Assim, melhores resultados são obtidos com um refinamento maior nesta região onde o gradiente de concentração é maior dentro da camada limite, comportamento semelhante foi observado por Cunha (2014).

As Tabelas 4.6 e 4.7 apresentam os resultados deste estudo do ICM para a concentração média para as linhas posicionadas ao longo do canal de concentrado para (\bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa) e (\bar{u} = 0,12 m/s e ΔP_{TM} = 1398,7 kPa), respectivamente.

Linha	M1 (kg/m³)	M2 (kg/m³)	M3 (kg/m³)	${{oldsymbol{\phi}_{ext}}^{21}}$ (kg/m ³)	${{oldsymbol{\phi}_{ext}}^{32}}$ (kg/m ³)	<i>ICM</i> ₂₁	<i>ICM</i> ₃₂	<i>r[₽]ICM</i> 21
L1	2,0075	2,0048	2,0016	2,0194	2,0152	0,120%	0,191%	0,232%
L2	2,0241	2,0212	2,0122	2,0283	2,0294	0,107%	0,230%	0,305%
L3	2,0372	2,0341	2,0221	2,0394	2,0423	0,133%	0,273%	0,377%
L4	2,0489	2,0446	2,0314	2,0526	2,0548	0,185%	0,300%	0,559%

Tabela 4.6: Resultados do ICM para concentração ($\bar{u} = 0,16$ m/s, $\Delta P_{TM} = 1198,7$ kPa).

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.7: Resultados do ICM para concentração ($\bar{u} = 0,12 \text{ m/s}, \Delta P_{TM} = 1398,7 \text{ kPa}$).

Linha	M1 (kg/m³)	M2 (kg/m³)	M3 (kg/m³)	${{oldsymbol{\phi}_{ext}}^{21}}$ (kg/m ³)	${{oldsymbol{\phi}_{ext}}^{32}}$ (kg/m ³)	<i>ICM</i> ₂₁	<i>ICM</i> 32	<i>r[₽]ICM</i> 21
L1	2,0133	2,0121	2,0049	2,0140	2,0161	0,069%	0,255%	0,248%
L2	2,0373	2,0333	2,0215	2,0409	2,0410	0,141%	0,282%	0,360%
L3	2,0564	2,0515	2,0366	2,0631	2,0665	0,169%	0,251%	0,775%
L4	2,0728	2,0667	2,0505	2,0886	2,0915	0,222%	0,325%	0,591%

Fonte: O autor (2020).

Analisando os resultados apresentados nas Tabelas 4.6 e 4.7, em ambos os casos, é possível observar uma redução na condição de convergência, visto que os valores do índice $ICM_{21} < ICM_{32}$, o que indica que dependência dos resultados da variável escolhida com o tamanho dos elementos da malha foi reduzido e se aproxima de uma solução independente da malha. Além disso, os valores de ICM_{21} e ICM_{32} estão dentro do limite de 10% de acordo com Celik e Karatekin (1997). Devido a proximidade dos valores ICM_{32} e $r^{p}ICM_{21}$, indicam que a solução extrapolada está próxima da solução exata para esta variável.

Os valores dos perfis de concentração ao longo das linhas L1, L2, L3 e L4, para as malhas M1, M2 e M3, em comparação com a solução da malha extrapolada, para (\bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa) e (\bar{u} = 0,12 m/s e ΔP_{TM} = 1398,7 kPa), estão ilustrados nas Figuras 4.17 e 4.18, respectivamente.



Figura 4.17: Perfil de concentração no canal de concentrado ao longo das linhas (a) L1, (b) L2, (c) L3 e (d) L4, para diferentes malhas (\bar{u} = 0,16 m/s, ΔP_{TM} = 1198,7 kPa).

Analisando as Figuras 4.17 e 4.18, é possível observar nestes casos um comportamento do perfil de concentração, semelhante ao que foi observado para $\Delta P_{TM} = 998,7$ kPa onde a malha que mais se aproxima do valor assintótico é a malha M1, que é a mais refinada. Da mesma forma para as quatro posições, na região próxima da fronteira de separação a malha M3, que é a menos refinada, foi a que mais se distanciou da solução extrapolada.

De acordo com os resultados apresentados nas Figuras 4.16 a 4.18, observa-se um aumento na camada de concentração de sais com o distanciamento das linhas L1, L2, L3 e L4 a medida que estas se afastam da entrada da membrana, explicado em virtude do processo de separação que ocorre ao longo do canal, ficando a solução mais concentrada na região de saída.



Figura 4.18: Perfil de concentração no canal de concentrado ao longo das linhas (a) L1, (b) L2, (c) L3 e (d) L4, para diferentes malhas (\bar{u} = 0,12 m/s, ΔP_{TM} = 1398,7 kPa).

Considerando a linha L4 para análise, na Tabela 4.8 estão explicitados os resultados da velocidade média no canal de concentrado para as três pressões analisadas e outros parâmetros médios de convergência das malhas. Vale ressaltar que, a escolha desta linha se dá devido seu posicionamento ser mais distante da entrada do modulo de membrana onde o comportamento dinâmico está completamente desenvolvido.

Verifica-se que o valor de *C* na Tabela 4.8 indica que a convergência da solução foi monotônica, visto que seu valor está entre 0 e 1, de acordo com os critérios estabelecidos por Paudel e Saenger (2017). Observa-se uma redução na condição de convergência, visto que o índice $ICM_{21} < ICM_{32}$, e que os valores do ICM_{21} e ICM_{32} estão dentro do limite de 10% de acordo com Celik e Karatekin

(1997). Também é possível afirmar que a solução extrapolada está próxima da solução exata para esta variável, devido a proximidade dos valores ICM_{32} e $r^{\rho}ICM_{21}$.

ΔΡ _{τм} (kPa)	M1 (m/s)	M2 (m/s)	M3 (m/s)	φ _{ext} ²¹ (m/s)	φ _{ext} ³² (m/s)	<i>ICM</i> ₂₁	<i>ICM</i> ₃₂	С	r [₽] ICM ₂₁
998,7	0,1651	0,1639	0,1607	0,1669	0,1673	0,730%	1,927%	0,58	1,983%
1198,7	0,1653	0,1641	0,1608	0,1671	0,1675	0,728%	1,923%	0,61	1,982%
1398,7	0,1245	0,1236	0,1211	0,1259	0,1263	0,726%	1,902%	0,76	1,980%

Tabela 4.8: Resultados do ICM para velocidade média no canal de concentrado na posição da linha L4.

Fonte: O autor (2020).

As Figuras 4.19 e 4.20 apresentam os resultados dos perfis de velocidade no canal de concentrado na posição da linha L4 das malhas M1 e M2, com ICM_{21} e ICM_{32} , respectivamente, plotados em forma de barras de erros, para pressão transmembranica de 998,7 kPa. O valor da ordem aparente (*p*) calculado para cada ponto variou entre 0,1088 e 1,8181, com uma média global de 0,7794 para a posição analisada.





Figura 4.20: Perfil de velocidade no canal de concentrado para malha M2 com ICM_{32} em forma de barra de erro (L4, \bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 998,7 kPa).



Analisando a Figura 4.19 verifica-se que o valor médio do ICM_{21} variou entre 0,054% e 2,575%, enquanto na Figura 4.20 o valor médio do ICM_{32} variou entre 0,025% e 4,835%. Fazendo uma comparação entre os gráficos presentes nas Figuras 4.19 e 4.20 observa-se uma redução nos valores do ICM_{21} em comparação ao ICM_{32} indicando uma independência dos resultados em relação a malha para a variável velocidade média, ou seja, a malha M1 apresenta uma solução totalmente independente da malha.

Os resultados dos perfis de velocidade no canal de concentrado na mesma posição L4 das malhas M1 com ICM_{21} e M2 com ICM_{32} plotados em forma de barras de erros, estão apresentados nas Figuras 4.21 e 4.22, respectivamente, para pressão transmembranica de 1198,7 kPa. Observa-se que a malha M2 apresentou um valor do ICM_{32} médio de 1,923% com valor máximo de 4,829% enquanto que a malha M1 apresentou valor de ICM_{21} médio de 0,728% com valor máximo de 2,570%. O valor de p calculado para cada ponto variou entre 0,0870 e 1,8322 com uma média global de 0,7803 para a posição analisada.

Figura 4.21: Perfil de velocidade no canal de concentrado para malha M1 com ICM_{21} em forma de barra de erro (L4, \bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa).



Figura 4.22: Perfil de velocidade no canal de concentrado para malha M2 com ICM_{32} em forma de barra de erro (L4, \bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa).





As Figuras 4.23 e 4.24 apresentam os resultados dos perfis de velocidade no canal de concentrado na posição L4 das malhas M1 com ICM_{21} e M2 com ICM_{32} , respectivamente, plotados em forma de barras de erros para pressão transmembranica de 1398,7 kPa.

Figura 4.23: Perfil de velocidade no canal de concentrado para malha M1 com ICM_{21} em forma de barra de erro (L4, $\bar{u} = 0,12$ m/s e $\Delta P_{TM} = 1398,7$ kPa).



Figura 4.24: Perfil de velocidade no canal de concentrado para malha M2 com ICM_{32} em forma de barra de erro (L4, $\bar{u} = 0,12$ m/s e $\Delta P_{TM} = 1398,7$ kPa).



Analisando os resultados da Figura 4.23 verifica-se que o valor médio do ICM_{21} variou entre 0,042% e 2,555%, com média global de 0,726%, enquanto na Figura 4.24 o valor médio do ICM_{32} variou entre 0,013% e 4,790%, com média global de 1,902%. Para a posição analisada, o valor de *p* calculado para cada ponto variou entre 0,0542 e 1,9754, com uma média global de 0,7841.

Uma comparação entre os gráficos presentes nas Figuras 4.23 e 4.24 possibilita observar uma redução nos valores do ICM_{32} para ICM_{21} em 85,5% dos pontos. Por sua vez o ICM_{21} foi maior que o ICM_{32} em apenas 14,5% dos pontos apresentados no gráfico, o que indica maior independência dos resultados em relação a malha. Portanto pode-se afirmar que as malha M1 e M2 apresentam soluções totalmente independentes da malha, visto que as duas malhas apresentaram valores do ICM dentro do intervalo assintótico determinado pelo estudo realizado por Celik e Karatekin (1997), que é de 10%.

Os parâmetros de convergência de malha confirmam que, com o refinamento da malha, a solução tende a se aproximar do valor assintótico da solução extrapolada. De acordo com os resultados obtidos, pode-se afirmar que a solução extrapolada está próxima da solução exata. Assim, pode-se concluir que a malha M1 (2.950.800 elementos) apresentou solução totalmente independente para as variáveis estudadas, ou seja, as malhas não interferem nos resultados obtidos.

Entretanto, a malha escolhida para a realização das simulações do presente trabalho foi a M2 (378.240 elementos). A escolha foi devido à pequena discrepância nos valores da concentração, fluxo de permeado e velocidade média, e por apresentar um menor esforço computacional ou tempo de simulação (ver Tabela 4.1), quando comparado com os resultados das simulações com a malha M1.

4.2.2 Validação do Modelo Matemático

Com a malha M2 foram realizadas simulações para diferentes pressões transmembranica e diferentes velocidades médias da corrente de alimentação do modulo de membrana com a malha escolhida (M2), que apresenta 378.240 elementos e 419.436 pontos nodais. Os resultados destas simulações para o fluxo de permeado são apresentados nas Tabelas 4.9 e 4.10.

A Tabela 4.9 apresenta os resultados das simulações para pressões transmembranica variando entre 898,7 e 1198,7 kPa e velocidades média variando entre 0,3 e 0,13 m/s, utilizando o coeficiente K1, coeficiente este obtido a partir do ajuste de curvas (Apêndice A).

ΔP _{TM} = 898,7(kPa)		ΔР _{тм} = 9	998,7(kPa)	ΔР _{тм} = 1	098,7(kPa)	ΔP _™ = 1198,7(kPa)		
<i>ū</i> (m/s)	J (L/m²h)	ū (m/s)	J (L/m²h)	ū (m/s)	J (L/m²h)	ū (m/s)	J (L/m²h)	
0,05	18,3076	0,05	20,3772	0,04	22,3786	0,03	24,3254	
0,08	18,3417	0,06	20,3924	0,05	22,4007	0,04	24,3604	
0,10	18,3555	0,08	20,4137	0,07	22,4293	0,05	24,3837	
0,12	18,3658	0,09	20,4217	0,08	22,4394	0,06	24,4006	
0,13	18,3701	0,10	20,4285	0,09	22,4478	0,08	24,4243	

Tabela 4.9: Fluxo de permeado simulado para diferentes pressões transmembranica e velocidade média da corrente de alimentação, para K1.

Fonte: O autor (2020).

A Tabela 4.10 apresenta os resultados das simulações para pressões transmembranica variando entre 898,7 e 1398,7 kPa e velocidades média variando entre 0,10 e 0,23 m/s, utilizando o coeficiente K2, coeficiente este obtido a partir do ajuste de curvas (Apêndice A).

ΔP _{TM} = 898,7(kPa)		ΔΡ _{τм} = 998,7(kPa)		ΔΡ _™ = 1098,7(kPa)		ΔP _™ = 1198,7(kPa)		ΔP _{TM} = 1298,7(kPa)		ΔP _{TM} = 1398,7(kPa)		
	<i>ū</i> (m∕s)	J (L/m²h)	ū (m/s)	J (L/m²h)	ū (m/s)	J (L/m²h)	ū (m/s)	J (L/m²h)	ū (m/s)	J (L/m²h)	ū (m/s)	J (L/m²h)
	0,14	24,4853	0,14	26,5107	0,11	28,4017	0,10	30,2101	0,10	31,9461	0,08	33,5869
	0,16	24,4962	0,16	26,5218	0,12	28,4100	0,12	30,2278	0,12	31,9639	0,10	33,6108
	0,18	24,5053	0,18	26,5310	0,14	28,4238	0,14	30,2417	0,14	31,9778	0,12	33,6286
	0,20	24,5130	0,20	26,5388	0,16	28,4349	0,16	30,2530	0,16	31,9891	0,14	33,6426
	0,22	24,5196	0,22	26,5455	0,18	28,4442	0,18	30,2623	0,18	31,9985	0,16	33,6539
	0,24	24,5254	0,24	26,5514	0,20	28,4521	0,20	30,2703	0,19	32,0027	0,18	33,6634

Tabela 4.10: Fluxo de permeado simulado para diferentes pressões transmembranica e velocidade média da corrente de alimentação, para K2.

Fonte: O autor (2020).

Analisado os resultados das Tabelas 4.9 e 4.10, observa-se um aumento do fluxo de permeado em função do aumento da pressão transmembranica. Este aumento do fluxo em função do aumento da pressão transmembranica é esperado para os processos de separação que utilizam a pressão como força motriz, como no caso da OI, onde fluxo de permeado é proporcional ao gradiente de pressão. Também é possível observar que houve uma pequena variação no fluxo de
permeado com o aumento da velocidade média, para cada uma das pressões trabalhadas.

Para análise do modelo, foi realizado um estudo estatístico onde foi determinada as medidas de dispersão, correlação e aplicado a distribuição t de Student, em que se obteve um intervalo de confiança a partir dos dados experimentais ao nível de confiança de 95%.

As Figuras 4.25 a 4.28 apresentam os resultados numéricos para o fluxo de permeado utilizando o coeficiente K1, em função da velocidade média, plotados com os resultados experimentais obtidos por Alexiadis et al. (2007) e seus intervalos de confiança em forma de barras, para várias pressões.

Os resultados apresentados nas Figuras 4.25 e 4.26 forneceram para o parâmetro fluxo de permeado um desvio padrão igual a 1,12 e 0,99, variância igual a 1,26 e 0,97 e coeficiente de correlação de Pearson igual a 0,9970 e 0,9974, respectivamente.

Figura 4.25: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K1 e ΔP_{TM} = 898,7 kPa.



Fonte: O autor (2020).

Figura 4.26: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K1 e ΔP_{TM} = 998,7 kPa.



Fonte: O autor (2020).

Nas Figuras 4.27 e 4.28, os resultados forneceram um desvio padrão igual a 0,79 e 0,86, variância igual a 0,63 e 0,75 e coeficiente de correlação de Pearson igual a 0,9989 e 0,9992, respectivamente.

Figura 4.27: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K1 e ΔP_{TM} = 1098,7 kPa.



Figura 4.28: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K1 e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa.



Após a análise estatística dos resultados apresentados nas Figuras 4.25 a 4.28, o coeficiente de correlação de Pearson, indicou uma forte correlação entre os mesmos. Analisando os resultados para a variável fluxo de permeado, percebeu-se que os resultados numéricos obtidos indicam um comportamento plausível para o parâmetro fluxo de permeado baseado nos dados experimentais, ao nível de confiança de 95% da distribuição t de Student, ficando a maioria dos casos simulados dentro do intervalo de confiança para os resultados experimentais, o que significa que os mesmos estão dentro da faixa de confiança.

As Figuras 4.29 a 4.34 apresentam os resultados numéricos para o fluxo de permeado, utilizando o coeficiente K2, em função da velocidade média, plotados com os resultados experimentais obtidos por Alexiadis et al. (2007) e seus intervalos de confiança em forma de barras, para várias pressões transmembranica.

Para a análise destes casos, também foi feito um estudo estatístico onde foi determinada medidas de dispersão, correlação e aplicado a distribuição t de Student, em que se obteve um intervalo de confiança a partir dos dados experimentais ao nível de confiança de 95%. Figura 4.29: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K2 e $\Delta P_{TM} = 898,7$ kPa.



Fonte: O autor (2020).

Figura 4.30: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K2 e $\Delta P_{TM} = 998,7$ kPa.



Os resultados apresentados nas Figuras 4.29 e 4.30 forneceram um desvio padrão igual a 1,70 e 2,06, variância igual a 2,88 e 4,25 e coeficiente de correlação de Pearson igual a 0,9970 e 0,9966, respectivamente, para o parâmetro fluxo de permeado.

Figura 4.31: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K2 e $\Delta P_{TM} = 1098,7$ kPa.



Figura 4.32: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K2 e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa.



Nas Figuras 4.31 e 4.32 os resultados apresentaram um desvio padrão igual a 2,4 e 2,04, variância igual a 5,76 e 4,15 e coeficiente de correlação de Pearson igual a 0,9939 e 0,9954, respectivamente.

Figura 4.33: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K2 e ΔP_{TM} = 1298,7 kPa.



Figura 4.34: Intervalo de confiança da t de Student com 95% de confiança para o fluxo de permeado em função da velocidade média com K2 e ΔP_{TM} = 1398,7 kPa.



Os resultados das Figuras 4.33 e 4.34 forneceram para o parâmetro fluxo de permeado um desvio padrão igual a 1,54 e 1,64, variância igual a 2,37 e 2,70 e coeficiente de correlação de Pearson igual a 0,9983 e 0,9977, respectivamente.

Após a análise estatística dos resultados, o coeficiente de correlação de Pearson entre os resultados numéricos e os dados experimentais, apresentou valores entre 0,9939 e 0,9992, que de acordo com Neto et al. (2010), indica uma forte correlação entre os mesmos, por se tratar de uma medida da associação linear entre duas variáveis.

Analisando os resultados para a variável fluxo de permeado, percebeu-se que os resultados numéricos obtidos indicam um comportamento plausível para o parâmetro fluxo de permeado baseado nos dados experimentais, ficando a maioria dos casos simulados dentro do intervalo de confiança para os resultados experimentais, ao nível de confiança de 95% da distribuição t de Student, o que significa que os mesmos estão dentro da faixa de confiança.

Fazendo uma análise das Figuras 4.25 a 4.34, percebe-se que o fluxo de permeado sofre pequena variação com o aumento da velocidade média da corrente de alimentação. Comportamento relado por Schneider e Tsutiya (2001), onde o fluxo através de uma membrana depende da pressão, das características da solução de alimentação e das propriedades intrínsecas da membrana, dessa forma a velocidade média proporciona uma pequena influencia no fluxo de permeado, conforme observado nos resultados apresentados anteriormente nas Tabelas 4.9 e 4.10.

Os resultados das simulações realizadas mostraram uma excelente concordância para o fluxo de permeado com os resultados encontrados por Alexiadis et al. (2007), apresentado apenas algumas pequenas discrepâncias, fato esperado em virtude da diferença entre o modelo matemático desenvolvido e aplicado, assim como possíveis erros experimentais ocorridos durante a realização dos experimentos, coleta e análise de dados, não relatados por Alexiadis et al. (2007).

A Figura 4.35 ilustra de forma comparativa os resultados numéricos para o fluxo de permeado, em relação aos resultados experimentais e numéricos obtidos por Alexiadis et al. (2007), para diferentes pressões transmembranica, diferentes velocidades média na corrente de alimentação e diferentes permeabilidades hidráulica. Desta forma, os resultados demonstram uma boa concordância entre os resultados numéricos obtidos nesta pesquisa e os resultados experimentais reportados na literatura.



Figura 4.35: Fluxos de permeado numéricos e experimentais para diferentes velocidades média e pressões transmembranica.

Fonte: O autor (2020).

As Tabelas 4.11 a 4.14 apresentam os resultados das simulações utilizando o coeficiente K1 para cada uma das pressões transmembranica simuladas, em função variação da velocidade média da corrente de alimentação. Neste caso têm-se os resultados para o número de Reynolds, fluxo de permeado (J) e as concentrações médias de permeado (C_p), concentrado (C_c) e sobre a superfície da membrana (C_w).

<i>ū</i> (m/s)	Re	<i>J</i> (L/m²h)	C_p (kg/m ³)	C_c (kg/m ³)	C_w (kg/m ³)
0,05	246,938	18,3076	0,01031	2,0709	2,7424
0,08	394,427	18,3417	0,01022	2,0504	2,6006
0,10	492,792	18,3555	0,01019	2,0427	2,5353
0,12	591,189	18,3658	0,01017	2,0370	2,4833
0,13	640,400	18,3701	0,01015	2,0347	2,4610

Tabela 4.11: Resultados das simulações com K1 e $\Delta P_{TM} = 898,7$ kPa.

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.12: Resultados das simulações com K1 e ΔP_{TM} = 998,7 kPa.

<i>ū</i> (m/s)	Re	<i>J</i> (L/m²h)	<i>C_p</i> (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C</i> _w (kg/m ³)
0,05	247,083	20,3772	0,01034	2,0785	2,8067
0,06	296,238	20,3924	0,01034 2,0688		2,7472
0,08	394,572	20,4137	0,01025	2,0559	2,6562
0,09	443,751	20,4217	0,01023	2,0513	2,6181
0,10	492,938	20,4285	0,01021	2,0474	2,5852

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.13: Resultados das simulações com K1 e ΔP_{TM} = 1098,7 kPa.

<i>ū</i> (m/s)	Re	<i>J</i> (L/m²h)	C_p (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	C_w (kg/m ³)
0,04	198,077	22,3786	0,01043	2,1010	2,9454
0,05	247,225	7,225 22,4007 0,01037 2,0858		2,0858	2,8665
0,07	345,543	22,4293	0,01030	2,0673	2,7513
0,08	394,714	22,4394	0,01027	2,0611	2,7064
0,09	443,893	22,4478	0,01025	2,0561	2,6671

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.14: Resultados das simulações com K1 e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa.

<i>ū</i> (m/s)	Re	<i>J</i> (L/m²h)	$C_{ ho}$ (kg/m ³)	C_c (kg/m ³)	<i>C</i> _w (kg/m ³)
0,03	149,076	24,3254	0,01056	2,1348	3,1168
0,04	198,216	24,3604	0,01047	2,1093	3,0051
0,05	247,364	24,3837	0,01040	2,0929	2,9225
0,06	296,519	24,4006	0,01036	2,0815	2,8566
0,07	345,683	24,4137	0,01032	2,0729	2,8017
0,08	394,854	24,4243	0,01030	2,0662	2,7546

Fonte: O autor (2020).

Analisando os resultados apresentados nas Tabelas 4.11 a 4.14, observase para cada uma das pressões, que na corrente de permeado a concentração média de NaCl ficou bem abaixo da concentração inicial que era igual a 2 kg/m³. Na corrente de concentrado, a concentração média ficou maior que a concentração de alimentação, devido a passagem de água pela membrana e retenção dos sais, indicando uma rejeição de sais média de 99,48%. Pode-se observar também que na superfície da membrana tem-se uma concentração de sais mais elevada, isso pode ser explicado devido ao processo de separação ocorrer neste local, demonstrando que o modelo matemático aplicado representa bem esse processo de separação. Esta mesma análise pode ser observada nos resultados para o coeficiente K2 apresentados nas tabelas seguintes.

As Tabelas 4.15 a 4.20 apresentam os resultados das simulações utilizando o coeficiente K2 para cada uma das pressões transmembranica simuladas, em função da velocidade média da corrente de alimentação. Neste caso têm-se os resultados para o número de Reynolds, fluxo de permeado e as concentrações médias de permeado, concentrado e sobre a superfície da membrana.

<i>ū</i> (m/s)	Re	<i>J</i> (L/m ² h)	<i>C_p</i> (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C</i> _w (kg/m ³)
0,14	690,047	24,4853	0,01020	2,0436	2,5629
0,16	788,507	24,4962	0,01018	2,0392	2,5193
0,18	886,998	24,5053	0,01016	2,0356	2,4819
0,20	985,521	24,5130	0,01015	2,0326	2,4495
0,22	1084,07	24,5196	0,01013	2,0301	2,4210
0,24	1182,66	24,5254	0,01012	2,0279	2,3959

Tabela 4.15: Resultados das simulações com K2 e ΔP_{TM} = 898,7 kPa.

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.16: Resultados das simulações com K2 e ΔP_{TM} = 998,7 kPa.

<i>ū</i> (m/s)	Re	<i>J</i> (L/m²h)	<i>C_p</i> (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C</i> _w (kg/m ³)
0,14	690,189	26,5107	0,01021	2,0471	2,6011
0,16	788,649	26,5218 0,01019 2,		2,0423	2,5552
0,18	887,141	26,5310	0,01017	2,0369	2,0385
0,20	985,663	26,5388	0,01016	2,0353	2,4814
0,22	1084,22	26,5455	0,01015	2,0326	2,4514
0,24	1182,80	26,5514	0,01013	2,0302	2,4247

Fonte: O autor (2020).

<i>ū</i> (m/s)	Re	<i>J</i> (L/m²h)	C_p (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	C_w (kg/m ³)
0,11	542,692	28,4017	0,01027	2,0604	2,7250
0,12	591,894	28,4100	0,01026	2,0567	2,6927
0,14	690,323	28,4238	0,01023	2,0503	2,6361
0,16	788,784	28,4349	0,01020	2,0453	2,5882
0,18	887,275	28,4442	0,01019	2,0412	2,5469
0,20	985,798	28,4521	0,01017	2,0378	2,5110

Tabela 4.17: Resultados das simulações com K2 e ΔP_{TM} = 1098,7 kPa.

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.18: Resultados das simulações com K2 e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa.

<i>ū</i> (m/s)	Re	<i>J</i> (L/m²h)	<i>C_p</i> (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C</i> _w (kg/m ³)
0,10	493,625	30,2101	0,01031	2,0685	2,7974
0,12	592,022	30,2278	0,01027	2,0601	2,7271
0,14	690,451	30,2417	0,01024	2,0534	2,6685
0,16	788,911	30,2530	0,01022	2,0481	2,6188
0,18	887,403	30,2623	0,01020	2,0438	2,5759
0,20	985,926	30,2703	0,01018	2,0402	2,5385

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.19: Resultados das simulações com K2 e ΔP_{TM} = 1298,7 kPa.

<i>ū</i> (m/s)	Re	<i>J</i> (L/m²h)	$C_{ ho}$ (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C</i> _w (kg/m ³)
0,10	493,746	31,9461	0,01033	2,0721	2,8315
0,12	592,144	31,9639	31,9639 0,01029 2,0632		2,7591
0,14	690,573	31,9778	0,01026	2,0563	2,6987
0,16	789,033	31,9891	31,9891 0,01023 2,05		2,6473
0,18	887,525	31,9985	0,01021	2,0462	2,6029
0,19	936,783	32,0027	0,01020	2,0443	2,5829

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.20: Resultados das simulações com K2 e ΔP_{TM} = 1398,7 kPa.

<i>ū</i> (m/s)	Re	<i>J</i> (L/m²h)	<i>C_p</i> (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C</i> _w (kg/m ³)
0,08	395,497	33,5869	0,01039	2,0886	2,9547
0,10	493,863	33,6108 0,01034 2,0755		2,0755	2,8632
0,12	592,261	33,6286	0,01030	2,0662	2,7890
0,14	690,690	33,6426	0,01027	2,0590	2,7269
0,16	789,150	33,6539	0,01024	2,0532	2,6741
0,18	887,642	33,6634	0,01022	2,0485	2,6284

Fonte: O autor (2020).

Analisando os resultados apresentados nas Tabelas 4.15 a 4.20, observase que na corrente de permeado a concentração média de NaCl ficou bem abaixo da concentração de alimentação que é igual a 2 kg/m³. Na corrente de concentrado, a concentração média ficou maior que a concentração de alimentação, indicando uma rejeição de sais média de 99,49%. Pode-se observar ainda que na superfície da membrana, local onde o processo de separação de sais ocorre, a concentração é mais elevada, demonstrando mais uma vez que o modelo está ajustado e representa bem o processo de separação por membranas.

É possível observar em todos os casos simulados, uma redução da concentração de NaCl na superfície da membrana em função do aumento da velocidade no interior do canal. Essa redução no valor da concentração ocorre devido a movimentação tangencial da solução sobre a superfície da membrana, com o aumento da velocidade diminui o acúmulo de soluto na superfície da membrana, que está de acordo com Salcedo-Díaz et al. (2014).

Os resultados mostraram que para uma mesma velocidade, o número de Reynolds, sofreu uma pequena discrepância em relação à variação da pressão transmembranica, pelo fato de que a variação da pressão não altera significativamente as propriedades do fluido no canal do concentrado, como a massa específica e viscosidade, utilizadas para determinação do número Reynolds. Com relação à variação da velocidade média, observou-se uma mudança mais significativa nos valores do número de Reynolds, visto que este número varia proporcionalmente com a velocidade. Em todos os casos o diâmetro hidráulico foi constante, visto que não houve alteração nas dimensões do modulo de membrana. Estes resultados corroboram com as considerações iniciais de um escoamento laminar, isotérmico e em regime permanente.

É possível observar ainda, um aumento do fluxo de permeado em função do aumento da pressão transmembranica, visto que neste processo de separação estudado, a pressão é a força motriz que impulsiona a separação, ratificando assim os comentários feitos por Habert et al. (2006) e Schneider e Tsutiya (2001).

Considerando para análise a velocidade média igual a 0,14 m/s, foi traçada uma linha passando pelo centro da membrana, com altura na origem correspondente a superfície da membrana e comprimento da origem até o final da membrana, tomando dois pontos cujas coordenadas são: (0; 0; 0) e (0,276; 0; 0).

A Figura 4.36 ilustra a variação da concentração na superfície da membrana ao longo do comprimento do módulo para diferentes pressões transmembranica.





De acordo com a figura observa-se, no início do módulo da membrana tem-se uma região de parede onde não há permeação, ficando a concentração de NaCl constante e igual a concentração de alimentação até o começo da região de permeação da membrana. A partir deste ponto a permeação ocorre ao longo do comprimento da membrana até o final, mostrado pelo aumento da concentração de NaCl na superfície da membrana. Curvas semelhantes a estas também foram obtidas por Alexiads et al. (2007), onde é possível observar no final das curvas de concentração um pequeno caimento. Este comportamento ocorre na região de parede no final do módulo de membrana, onde não há permeação, logo a camada de concentração começa a ser diluída com a solução presente no canal.

Na Tabela 4.21 estão apresentados os resultados para o fluxo de permeado e as concentrações médias de permeado, concentrado e na região sobre a superfície da membrana, para uma velocidade média igual a 0,14 m/s na corrente de alimentação em função da diferença de pressão transmembranica.

ΔP _{TM} (kPa)	<i>J</i> (L/m²h)	<i>C_p</i> (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C</i> _w (kg/m ³)
998,7	24,4853	0,010196	2,0436	2,5629
998,7	26,5107	0,010213	2,0471	2,6011
1098,7	28,4238	0,010227	2,0503	2,6361
1198,7	30,2417	0,010242	2,0534	2,6685
1298,7	31,9778	0,010255	2,0563	2,6987
1398,7	33,6426	0,010268	2,0590	2,7269

Tabela 4.21: Resultados das simulações para $\bar{u} = 0,14$ m/s.

Fonte: O autor (2020).

Os resultados apresentados na Tabela 4.21 mostram um aumento do fluxo de permeado em função do aumento da pressão transmembranica, que de acordo com Habert et al. (2006) e Silveira et al. (2015), ocorre devido ao fluxo ser proporcional à pressão aplicada. Pode ser observado também, pequenas variações em relação à concentração de NaCl nas correntes de permeado. Na corrente de concentrado observa-se um pequeno aumento da concentração. Em relação a concentração na superfície da membrana, é observado um pequeno aumento da concentração com o aumento da pressão, que ocorre devido ao aumento do fluxo de permeado, ou seja, um volume maior de água passa através da membrana aumentando a vazão de permeado, dessa forma diminui o volume de água no lado do concentrado, deixando esse lado da membrana com uma maior concentração de sais dissolvidos.

Nas Figuras 4.37 e 4.38 encontram-se ilustrados os campos de concentração no interior do módulo de membrana, sobre planos transversais yz e longitudinal xy, respectivamente, para pressão transmembranica igual a 1398,7 kPa. A Figura 4.38 ilustra os contornos de concentração em todo o comprimento do módulo, com destaque em regiões de entrada, intermediária e de saído do módulo da membrana.

Figura 4.37: Campo de concentração no interior do módulo de membrana para os planos yz (\bar{u} = 0,14 m/s e ΔP_{TM} = 1398,7 kPa).





Figura 4.38: Campo de concentração no interior do módulo de membrana para o plano xy (\bar{u} = 0,14 m/s e ΔP_{TM} = 1398,7 kPa).





É possível verificar que as maiores concentrações de sais encontra-se próximo a superfície da membrana. Percebe-se também a formação da camada

limite de concentração sobre a membrana, que se desenvolve por todo o comprimento da membrana aumentando suavemente na direção de saída do módulo.

As Figuras 4.39 e 4.40 ilustram sobre o plano horizontal xz, construído na altura correspondente a superfície da membrana (y = 0) em todo o módulo, os campos de concentração e de velocidade ao longo da superfície da membrana, respectivamente, para pressão transmembranica igual a 1398,7 kPa.

Figura 4.39: Campo de concentração ao longo da superfície da membrana para $\bar{u} = 0,14$ m/s e $\Delta P_{TM} = 1398,7$ kPa.



Fonte: O autor (2020).

Analisando a imagem da Figura 4.39, observa-se no início do módulo a região de parede onde a concentração fica constante, com o mesmo valor da concentração de alimentação. A partir do início da região de permeação observa-se o aumento de concentração ao longo do comprimento da membrana até o final da região de permeação. A distribuição da concentração ratifica o que foi observado nas Figuras 4.36 a 4.38, que a concentração de sais na superfície da membrana aumenta em relação ao comprimento do módulo em função da pressão aplica para promover a separação dos sais da solução de alimentação.

Pode ser observado também um aumento de concentração, nas regiões próximas das paredes laterais da membrana. Esses locais são regiões onde a

velocidade é menor, como pode ser visto na imagem ilustrada na Figura 4.40. Nestas regiões de menor velocidade, é menor a intensidade de mistura entre os sais retidos pela membrana e a solução que está em movimento no canal, tornando estas regiões com concentração mais elevada.





Fonte: O autor (2020).

Considerando ainda o caso para velocidade média igual a 0,14 m/s a pressão transmembranica igual a 1398,7 kPa, a Figura 4.41 ilustra, sobre o plano longitudinal xy passando pelo centro da membrana, as linhas de fluxo nos canais de concentrado e permeado, com destaque na região de entrada.

No destaque da Figura 4.41, nota-se a presença de duas correntes fluidas e distintas, uma que começa na região de entrada do módulo seguindo até o final do módulo (lado do concentrado) e outra corrente correspondente ao fluido permeado através da membrana, que se forma a partir da região de permeação seguindo até o final do módulo (lado do permeado), indicando o comportamento fluidodinâmico das duas correntes de fluido no interior do modulo da membrana. Percebe-se ainda a diferença de velocidade entre os canais, sendo que o canal de permeado, o fluido apresenta uma baixa velocidade que se mantém ao longo do canal, já no canal do concentrado, observa-se uma maior velocidade no centro do canal, indicando o perfil de velocidade parabólico conforme definido como condição de contorno.



Figura 4.41: Linhas de fluxo nos canais de concentrado e permeado para $\bar{u} = 0,14$ m/s e $\Delta P_{TM} = 1398,7$ kPa.

Fonte: O autor (2020).

Os resultados encontrados para os casos estudados quando comparados com dados experimentais e relatados na literatura, demonstram que o modelo matemático desenvolvido no presente trabalho apresenta uma boa representatividade dos fenômenos físicos que ocorrem no processo de separação por membranas, como na osmose inversa, se mostrando adequado para o estudo do processo.

4.2.3 Análise do Sentido de Escoamento

Na Tabela 4.22 estão apresentados os resultados para o fluxo de permeado (*J*) e as concentrações médias de permeado (C_p), concentrado (C_c) e sobre a superfície da membrana (C_w), em função da variação dos sentidos nas correntes de saída do módulo de membrana, tomada para análise uma velocidade média igual a 0,16 m/s na corrente de alimentação, concentração inicial de 2 kg/m³ e pressão transmembranica de 1198,7 kPa.

Casas	Sentido	o do Esco	amento	$I(l/m^2h)$	$C (ka/m^3)$	$C (ka/m^3)$	$C (ka/m^3)$
Casus	Alim.	Conc.	Perm.	J (L/III II)	$C_p(\mathbf{kg}/\mathbf{ll})$	C_c (kg/m)	$C_w(kg/m)$
Caso 01	+X	+X	+X	30,2530	0,01022	2,0481	2,61877
Caso 02	+X	+X	-X	30,2528	0,01016	2,0481	2,61877
Caso 03	+X	+X	+Z	30,2530	0,01022	2,0481	2,61877
Caso 04	+X	+X	-Z	30,2530	0,01022	2,0481	2,61877
Caso 05	+X	+Z	+X	30,1106	0,01052	2,07072	2,98353
Caso 06	+X	+Z	-x	30,1104	0,01046	2,07072	2,98352
Caso 07	+X	+Z	+Z	30,1106	0,01052	2,07072	2,98353
Caso 08	+X	+Z	-Z	30,1106	0,01052	2,07072	2,98353
Caso 09	+X	-Z	+X	30,1106	0,01052	2,07072	2,98353
Caso 10	+X	-Z	-X	30,1104	0,01046	2,07072	2,98352
Caso 11	+X	-Z	+Z	30,1106	0,01052	2,07072	2,98353
Caso 12	+X	-Z	-Z	30,1106	0,01052	2,07072	2,98353

Tabela 4.22: Resultados das simulações para vários sentidos de escoamento nas correntes de saída do módulo (\bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa).

Fonte: O autor (2020).

Analisando os resultados apresentados na Tabela 4.22, pode-se observar que, em todo o caso independente do sentido das correntes de saída, a rejeição de sais foi em média de 99,47%, ficando a corrente de saída do concentrado com uma concentração de sais mais elevada que a concentração da corrente de alimentação e, sobre a superfície da membrana uma maior concentração de sais.

Observa-se que nos casos 05 a 12, onde foi alterado o sentido do escoamento de saída do concentrado de +x para +z e -z, houve um aumento médio de 2,94% na concentração de permeado, 1,10% na concentração do concentrado e 13,93% na concentração sobre a superfície da membrana. Pode-se observar também para estes casos uma redução de 0,47% no fluxo de permeado, ou seja, a mudança no sentido da saída da corrente de concentrado provocou um aumento nas concentrações de sais no permeado, sobre a membrana, e ainda uma redução do fluxo de permeado. Estes efeitos, provocados em função da mudança no sentido dos escoamentos, estão relacionados à fluidodinâmica no interior do módulo, que por sua vez modifica a formação da camada de concentração de polarização, que segundo Kucera, (2015), o acumulo de sais na membrana provoca um aumento da pressão osmótica, tem-se então uma maior passagem de sais através da membrana e um aumento da resistência hidráulica, provocando uma diminuição do fluxo através da membrana. Observa-se ainda que a alteração no sentido do escoamento

de saída da corrente de permeado, não provocou mudança significativa em relação às concentrações nem em relação aos fluxos de permeado, tendo apenas a função de direcionar a saída do fluido coletado no canal de permeado.

A Figura 4.42 ilustra os campos de concentração de NaCl sobre o plano horizontal xz, construído na altura correspondente a superfície da membrana (y = 0), para os seguintes casos: (a) Caso 01(Conc. +x), (b) Caso 05 (Conc. +z) e (c) Caso 09 (Conc. -z), respectivamente.

Figura 4.42: Campo de concentração de NaCl ao longo da superfície da membrana para os casos: (a) 01 (Conc. +x), (b) 05 (Conc. +z) e (c) 09 (Conc. -z), respectivamente (\bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa).



Fonte: O autor (2020).

Na Figura 4.42 (a) pode-se observar na ilustração do campo de concentração de sais sobre a membrana, que ocorre o aumento gradual da concentração de sais sobre a superfície da membrana ao longo da sua extensão, indicando a efetividade do processo de separação. Na Figura 4.42 (b) e (c) observase que, na região próxima do final do módulo, a concentração de sais na superfície da membrana é maior do que a concentração na mesma região apresentada na Figura 4.42 (a). Os campos de concentração ilustrados na Figura 4.42 (b) e (c) são simétricos, visto que a diferença significativa se dá apenas em relação ao sentido da saída de concentrado, Figura 4.42 (b) +z e Figura 4.42 (c) -z, diferente da Figura 4.42 (a) +x.

Analisando as ilustrações da Figura 4.42 (b) e (c), percebe-se que com a mudança no sentido da saída de concentrado do módulo, houve a formação de regiões no interior canal de concentrado onde a concentração de sais é mais elevada. Isto ocorreu nas regiões onde o fluido sofreu alteração no sentido do escoamento com a diminuição a sua velocidade no interior do canal, como pode ser visto através dos campos de velocidade ilustrados na figura seguinte.

A Figura 4.43 ilustra o campo vetorial de velocidade no canal de concentrado do módulo de membrana para os seguintes casos: (a) Caso 01(Conc. +x), (b) Caso 05 (Conc. +z) e (c) Caso 09 (Conc. -z), respectivamente. Observa-se na Figura 4.43 (a) os vetores de velocidade distribuídos uniformemente, característico de um escoamento laminar, em função da baixa velocidade de alimentação, apresentando os menores valores de velocidade próximos as paredes laterais do módulo. Já as ilustrações da Figura 4.43 (b) e (c) indicam a mudança no sentido dos escoamentos e uma variação mais significativa na velocidade do escoamento no interior dos canais, com regiões apresentando menores velocidades que outras. Observa-se que estas regiões de menor velocidade são as regiões onde a formação da camada de polarização foi mais intensa (Figura 4.43 (b) e (c)), demonstrando que a redução da velocidade favorece o acúmulo de sais na superfície da membrana. Observação como esta foi feita por Salcedo-Díaz et al. (2014), os pesquisadores relatam em seu trabalho que o aumento da movimentação do fluido no interior no canal diminui o acúmulo de soluto na superfície da membrana.

Figura 4.43: Vetor velocidade no canal de concentrado do módulo de membrana para os casos: (a) 01 (Conc. +x), (b) 05 (Conc. +z) e (c) 09 (Conc. -z), respectivamente (\bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa).



Fonte: O autor (2020).

Os Casos 02, 03 e 04 apresentaram resultados semelhantes ao Caso 01 (Conc. +x), para os Casos 06, 07 e 08 os resultados obtidos foram semelhantes ao Caso 05 (Conc. +z) e os resultados obtidos para os Casos 10, 11 e 12 foram semelhantes ao Caso 09 (Conc. -z), não apresentando mudança significativa em relação ao sentido de saída da corrente de permeado. Foi observado que a saída de concentrado no mesmo sentido da alimentação leva a uma melhor estabilidade na

dinâmica do fluido no interior do canal, reduzindo a espessura da camada polarizada e melhorando o fluxo de permeado.

Portanto, pôde-se perceber que uma diminuição na quantidade de movimento no interior do canal favorece a formação da camada de polarização, provocada pela mudança no sentido do escoamento de uma das correntes de saída do módulo de membrana (concentrado). Desta forma, as simulações deste trabalho seguiram tomando como sentido de saída, para a corrente do concentrado, o mesmo sentido da alimentação do módulo de membrana, independente do sentido da saída de permeado.

4.2.4 Influência da Concentração Inicial de NaCI e da Velocidade Média da Corrente de Alimentação

A Figura 4.44 apresenta os resultados numéricos do fluxo de permeado em função da variação da velocidade média na alimentação do módulo de membrana, para as concentrações iniciais de 1, 2, 3 e 5 kg/m³ da solução de NaCl na alimentação, sob uma pressão transmembranica de 1198,7 kPa.



Figura 4.44: Fluxo de permeado em função da velocidade média para diferentes concentrações de alimentação ($\Delta P_{TM} = 1198,7 \text{ kPa}$).

Os resultados apresentados na Figura 4.44 mostram uma influência notável da concentração inicial sobre o fluxo de permeado, mantidas as mesmas condições de velocidade e pressão, observa-se que o aumento da concentração provocou uma redução do fluxo de permeado. Isto é explicado em decorrência do aumento da pressão osmótica, que ocorre devido ao aumento da concentração de sais na solução de alimentação, aumentando a resistência à passagem de fluido, afetando desta forma o fluxo de permeado através da membrana, comportamentos semelhantes foram observados por Fernández-Sempere et al. (2010) e Salcedo-Díaz et al. (2014).

A Figura 4.45 ilustra a variação do fluxo permeado em função da variação da velocidade média na alimentação, para diferentes concentrações iniciais da solução de NaCI: (a) 1 kg/m³, (b) 2 kg/m³, (c) 3 kg/m³ e (d) 5 kg/m³, respectivamente, para pressão transmembranica de 1198,7 kPa.





Percebe-se uma pequena variação no fluxo de permeado em função do aumento da velocidade média no canal, para cada uma das concentrações iniciais da solução de NaCl na corrente de alimentação, indicando uma redução da camada de concentração de polarização em função do aumento da velocidade média, reduzindo a resistência de passagem do fluido através da membrana, que conduz a um aumento do fluxo de permeado.

Tomando para análise a concentração inicial de 3 kg/m³, a Figura 4.46 ilustra o perfil de concentração sobre a superfície da membrana em função da posição x para diferentes velocidades médias na corrente de alimentação.





Na Figura 4.46 observa-se que no início do módulo da membrana correspondente a região de parede, a concentração permanece constante e igual a concentração inicial da solução de alimentação. Após o início da região de permeação há um aumento nos valores da concentração sobre a superfície da membrana até o final do seu comprimento, onde ocorre um caimento nos valores da concentração, que corresponde a região de parede no final do módulo.

Analisando os resultados apresentados na Figura 4.46, pode ser observado um achatamento nas curvas de concentração na superfície da membrana em função do aumento da velocidade média da solução no canal, ratificando assim, as observações realizadas por Fernández-Sempere et al. (2010) e Salcedo-Díaz et al. (2014).

Vale ressaltar que, para as simulações com as concentrações iniciais de 1, 2 e 5 kg/m³, o comportamento das curvas que representam o perfil de concentração sobre a membrana foram semelhantes a estes ilustrados na Figura 4.46, com a concentração se mantendo constante igual a concentração inicial da solução na região de parede não permeável, crescendo ao longo do comprimento da região permeável (membrana) e apresentando um caimento na região de parede não permeável no final do módulo.

A Figura 4.47 ilustra os campos de concentração sobre um plano horizontal xz construído na altura correspondente a superfície da membrana (y = 0), para as seguintes velocidades médias: (a) 0,10 m/s, (b) 0,12 m/s, (c) 0,14 m/s, (d) 0,16 m/s, (e) 0,18 m/s, (f) 0,20 m/s, (g) 0,22 m/s, e (h) 0,24 m/s, respectivamente, com concentração inicial de 3 kg/m³ da solução de NaCl na alimentação e pressão transmembranica de 1198,7 kPa.

As imagens ilustradas na Figura 4.47 demonstram bem o comportamento da camada de concentração formada durante o processo de separação, que inicia a partir da região de entrada, aumentando até a região de saída do módulo. De acordo com as imagens ilustradas, pode ser observado o deslocamento do campo de concentração formado sobre a superfície da membrana, no sentido do escoamento da corrente de concentrado, provocado pelo aumento da velocidade média no interior do canal. Figura 4.47: Campo de concentração de NaCl ao longo da superfície da membrana para diferentes velocidades médias: (a) 0,10 m/s, (b) 0,12 m/s, (c) 0,14 m/s, (d) 0,16 m/s, (e) 0,18 m/s, (f) 0,20 m/s, (g) 0,22 m/s e (h) 0,24 m/s, respectivamente $(C_a = 3 \text{ kg/m}^3, \Delta P_{\text{TM}} = 1198,7 \text{ kPa}).$



Continuação da Figura 4.47.



Fonte: O autor (2020).

4.3 Efeito da Curvatura do Módulo da Membrana

Nesta seção, é apresentada a análise de desempenho da membrana em função da curvatura aplicada no módulo da membrana, comparando os resultados com o módulo de membrana plana.

A malha numérica utilizada nestes casos adotou a mesma densidade de elementos escolhida a partir do ICM para a membrana plana, sendo considerado para análise uma velocidade média igual a 0,16 m/s na corrente de alimentação com concentração inicial de NaCl no valor de 2 kg/m³ e pressão transmembranica de 1198,7 kPa.

Em todas as situações avaliadas assegurou-se que a área de permeação da membrana fossem as mesmas para não influenciar no fluxo de permeado, independente do raio de curvatura R_{cv} , adotado.

A Tabela 4.23 apresenta os resultados das simulações das diferentes curvaturas do módulo de membrana para o número de Reynolds, fluxo de permeado, concentrações médias de permeado, concentrado e sobre a superfície da membrana.

<i>R_{cv}</i> (mm)	Re	<i>J</i> (L/m²h)	$C_{ ho}$ (kg/m ³)	C_c (kg/m ³)	C_w (kg/m ³)
∞	788,9	30,2530	0,0102179	2,0481	2,61877
55,00	790,0	30,2565	0,0102105	2,04616	2,59775
38,00	790,5	30,2570	0,0102095	2,0454	2,59592
25,00	791,1	30,2578	0,0102077	2,04418	2,59288
15,92	792,1	30,2594	0,0102044	2,04226	2,58784
10,61	793,3	30,2608	0,0102013	2,03985	2,58127
7,96	794,5	30,2624	0,0101979	2,03768	2,57475

Tabela 4.23: Resultados das simulações para diferentes raios de curvatura da membrana ($C_a = 2 \text{ kg/m}^3$, $\bar{u} = 0,16 \text{ m/s}$ e $\Delta P_{TM} = 1198,7 \text{ kPa}$).

Fonte: O autor (2020).

De acordo com os resultados apresentados na Tabela 4.23, pode-se perceber uma melhora nos valores dos parâmetros analisados em função da redução do raio de curvatura do módulo de membrana.

Tomando a Curva₆ (R_{cv} = 7,96 mm) para análise, observa-se que houve aumento de 0,03% no fluxo de permeado em comparação com a membrana totalmente plana ($R_{cv} = \infty$). É possível observar também que houve uma redução nos valores das concentrações, de 0,20% para o permeado, 0,51% para o concentrado e 1,68% na concentração sobre a superfície da membrana.

O comportamento do fluxo de permeado em função da variação do raio de curvatura da membrana é ilustrado na Figura 4.48. As Figuras 4.49 a 4.51 ilustram o comportamento da concentração de NaCl no permeado, concentrado e na superfície da membrana em função do raio de curvatura, respectivamente.

Figura 4.48: Comportamento do fluxo de permeado em função do raio de curvatura para \bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa.



Figura 4.49: Comportamento da concentração de NaCl no permeado em função do raio de curvatura para $\bar{u} = 0,16$ m/s e $\Delta P_{TM} = 1198,7$ kPa.



Figura 4.50: Comportamento da concentração de NaCl no concentrado em função do raio de curvatura para \bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa.



Figura 4.51: Comportamento da concentração de NaCl na superfície da membrana em função do raio de curvatura para \bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa.



Fonte: O autor (2020).

A Figura 4.52 ilustra o campo vetorial de velocidade no canal de concentrado do módulo de membrana para diferentes raios de curvatura. Os campos de velocidade foram plotados sobre uma superfície construída na altura correspondente ao centro do canal de concentrado ($h_c = 1,25$ mm) seguindo a geometria curvada do módulo da membrana.

Figura 4.52: Campo vetorial de velocidade no canal de concentrado para diferentes raios de curvatura: (a) 55 mm, (b) 38 mm, (c) 25 mm, (d) 15,92 mm, (e) 10,61 mm e (f) 7,96 mm, respectivamente, para \bar{u} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1198,7 kPa.



(C)

Continuação da Figura 4.52.



Fonte: O autor (2020).

Podem ser observados nas ilustrações da Figura 4.52 os vetores que representam o campo de velocidade tangencial no sentido da saída do módulo. Analisando as ilustrações, com a redução do raio de curvatura do módulo da membrana, percebe-se um deslocamento dos vetores de velocidade, indicando uma tendência de movimentação angular do fluido no interior do canal.

Pôde-se perceber que em função da alteração na curvatura do módulo da membrana, a camada polarizada sofreu interferência devido aos efeitos relacionados à fluidodinâmica no interior do canal de concentrado alterando a velocidade média do fluido e suas propriedades, verificado pelo do aumento do número de Reynolds (Tabela 4.23). Além de alterar a velocidade longitudinal do fluido no canal, a redução do raio de curvatura do módulo provoca um descolamento angular do fluido, contribuindo na redução do acumulo de sais sobre a membrana, reduzindo por sua vez a pressão osmótica da solução, diminuindo a resistência hidráulica à passagem do fluido através da membrana, aumentando dessa forma o fluxo de permeado, corroborando com as observações feitas por Fernádez-Sempere et al. (2010), Salcedo-Díaz et al. (2014) e Kucera, (2015).

Estes resultados indicam que com a modificação geométrica do módulo de membrana, com a intensificação da sua curvatura em função da redução do raio de curvatura do módulo, favoreceu o desempenho do sistema como um todo, proporcionando um aumento de rendimento, com o aumento do fluxo de permeado, e melhora na qualidade do produto final, com a redução das concentrações de sais nas correntes de permeado e concentrado.

4.4 Módulo de Membrana em Espiral

A análise do desempenho da membrana em forma de espiral foi inicialmente realizada comparando os resultados com o módulo de membrana plana 3D. Foi assegurado, para esta configuração, que a área de permeação da membrana fosse a mesma da membrana plana e para a malha gerada adotou-se a mesma densidade de elementos escolhida a partir do ICM para a membrana plana 3D. Também foi considerado os mesmos valores para velocidade média da corrente de alimentação, concentração inicial de NaCl e pressão transmembranica.

A Tabela 4.24 apresenta os resultados da simulação do módulo de membrana em forma de espiral para o número de Reynolds, fluxo de permeado, concentrações médias de permeado, concentrado e sobre a superfície da membrana para velocidade média igual a 0,16 m/s na corrente de alimentação, concentração inicial de NaCl no valor de 2 kg/m³ e pressão transmembranica de 1198,7 kPa.

Tabela 4.24: Resultados das simulações para a membrana em forma de espiral $(C_a = 2 \text{ kg/m}^3, \bar{u} = 0.16 \text{ m/s e } \Delta P_{TM} = 1198.7 \text{ kPa}).$

Re	<i>J</i> (L/m²h)	C_{p} (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C</i> _w (kg/m ³)
791,5	30,2619	0,0101989	2,0377	2,57637

Fonte: O autor (2020).

Os resultados mostram para esta configuração, que houve aumento de 0,03% no fluxo de permeado em comparação com a membrana totalmente plana. É possível observar também que houve uma redução nos valores das concentrações, de 0,19% para o permeado, 0,51% para o concentrado e 1,62% na concentração sobre a superfície da membrana.

Comparando os resultados da membrana em espiral o fluxo de permeado foi de 30,2619 L/m²h é um pouco maior que o fluxo de 30,2530 L/m²h para membrana plana e um pouco menor que o fluxo de 30,2624 L/m²h para membrana com raio de curvatura de 7,96 mm. Para esta velocidade, a configuração em espiral forneceu uma vazão mássica de 1,0892x10⁻⁰⁴ kg/s, superior à vazão mássica obtida para a membrana com raio de curvatura $R_{cv} = 7,96$ mm que foi de 1,0889x10⁻⁰⁴ kg/s e um pouco menor que a vazão mássica para e membrana plana que foi 1,0893x10⁻⁰⁴ kg/s, mantendo-se dentro da mesma ordem de grandeza.

Os resultados apresentados indicam que o módulo de membrana em espiral, influencia o comportamento fluidodinâmico do fluido no interior do canal do concentrado, contribuindo para redução da concentração de NaCl na superfície da membrana, reduzindo a pressão osmótica da solução, aumentando desta forma o fluxo de permeado, que corrobora com as observações de Fernádez-Sempere et al. (2010), Salcedo-Díaz et al. (2014) e Kucera, (2015).

Na Figura 4.53 está representado o campo vetorial de velocidade no canal de concentrado do módulo curvado em forma de espiral, plotado sobre uma superfície construída no centro do canal seguindo a geometria espiral do módulo.

Figura 4.53: Campo vetorial de velocidade no canal de concentrado para membrana curvada em forma de espiral ($C_a = 2 \text{ kg/m}^3$, $\bar{u} = 0,16 \text{ m/s} e \Delta P_{TM} = 1198,7 \text{ kPa}$).

Fonte: O autor (2020).

Observa-se na Figura 4.53 que o campo vetorial de velocidade, indicam um deslocamento angular dos vetores velocidade no interior do canal de concentrado, assim como foi observado nos resultados para diferentes curvaturas do módulo de membrana apresentados na seção 4.3. Esta movimentação angular pode contribuir junto com a velocidade axial para redução da camada de polarização, diminuindo a resistência hidráulica à passagem de fluido, proporcionando um aumento do fluxo de permeado através da membrana, como citam Fernández-Sempere et al. (2010), Salcedo-Díaz et al. (2014).

A Figura 4.54 ilustra o campo de concentração sobre uma superfície construída na altura correspondente a superfície da membrana em todo o módulo seguindo a geometria em espiral do módulo de membrana.

É possível observar na região de parede no início do módulo que a concentração se mantem constante com valor igual ao da concentração inicial. A partir do início da região de permeação da membrana, é possível observar um aumento da concentração de NaCl ao longo do comprimento do módulo até o final da região de permeação. Estes resultados ratificam o que foi observado com módulo de membrana plana, que a concentração de sais sobre a superfície da membrana aumenta ao longo do comprimento do módulo promovendo a formação e
desenvolvimento da camada de concentração de polarização durante o processo de separação.



Figura 4.54: Campo de concentração de NaCl ao longo da superfície da membrana em forma de espiral ($C_a = 2 \text{ kg/m}^3$, $\bar{u} = 0,16 \text{ m/s}$ e $\Delta P_{TM} = 1198,7 \text{ kPa}$).

Fonte: O autor (2020).

A seguir, é apresentada a análise do desempenho de uma membrana enrolada em espiral com uma, duas, três e cinco voltas, conforme uma membrana comercial de tamanho reduzido.

O módulo de membrana em forma espiral utilizada nas simulações foi modelado conforme uma membrana comercial, que consiste em camadas de membrana enroladas uma sobre as outras em formato de espiral.

A malha gerada foi baseada na densidade de elementos resultantes do método do índice de convergência de malha escolhida para os estudos do módulo com membrana plana.

A Figura 4.55 ilustra a malha numérica gerada no software Ansys Mesh 15.0 para o módulo de membrana em espiral com uma volta, gerada com elementos hexaédricos no interior dos domínios, apresentando um total de 900.000 elementos e 1.058.216 pontos nodais.

Figura 4.55: Malha tridimensional para o módulo de membrana espiral com uma volta.





A Tabela 4.25 apresenta o número de elementos e pontos nodais para os módulos de membrana espiral com duas, três e cinco voltas. As malhas geradas nestes casos tiveram a mesma densidade de elementos da malha gerada para o módulo com uma volta.

Tabela 4.25: Número de elementos e pontos nodas para os módulos de membrana espiral com duas, três e cinco voltas.

N° de Voltas	N° de Elementos	Pontos nodais
2	1.600.00	1.861.416
3	2.300.000	2.664.616
5	3.700.000	4.271.016

Fonte: O autor (2020).

A análise desta configuração foi iniciada considerando a membrana com uma volta em formato de espiral, através do seu desempenho.

A Tabela 4.26 apresenta os resultados do fluxo (*J*) e vazão mássica de permeado (Q_{mp}), concentrações médias de permeado (C_p), concentrado (C_c) e sobre a superfície da membrana (C_w), para diferentes velocidades médias (\overline{w}) da corrente de alimentação, com concentração inicial de NaCl igual a 2 kg/m³ e pressão transmembranica de 1200 kPa.

₩ (m/s)	Re	<i>J</i> (L/m ² h)	<i>Q_{mp}</i> (kg/s)	C_p (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C</i> _w (kg/m ³)
0,16	278,4	30,0324	3,012x10 ⁻⁴	0,0107573	2,1771	2,66237
0,20	347,0	30,0853	3,017x10 ⁻⁴	0,0106482	2,14943	2,5929
0,25	432,8	30,1326	3,022x10 ⁻⁴	0,0105525	2,12619	2,52704
0,35	604,3	30,1956	3,028x10 ⁻⁴	0,0104288	2,09715	2,43376

Tabela 4.26: Resultados das simulações para diferentes velocidades médias $(C_a = 2 \text{ kg/m}^3, \Delta P_{TM} = 1200 \text{ kPa}).$

Fonte: O autor (2020).

Estes resultados indicam um comportamento semelhante ao observado para o módulo de membrana plana e curvada. Pode ser observado um aumento no fluxo de permeado de 0,54% em função do aumento da velocidade média na alimentação de 0,16 para 0,35 m/s. Também é possível observar que houve uma redução nos valores das concentrações, de 3,05% para o permeado, 3,67% para o concentrado e 8,59% na concentração sobre a superfície da membrana, em função da variação da velocidade, indicando que o modelo desenvolvido aplicado a esta configuração de membrana fornece resposta conforme esperado para o processo de separação.

O desenvolvimento da camada limite de concentração ao longo da superfície da membrana pode ser observado a partir do campo de concentração sobre o plano longitudinal yz passando pelo centro do módulo (x = 0).

A Figura 4.56 ilustra a formação desta camada limite de concentração de sais ao longo do comprimento da membrana, onde é possível observar que a formação da camada de concentração ocorre nas duas interfaces correspondentes às áreas ativas da membrana.



Figura 4.56: Campo de concentração no interior do módulo de membrana espiral para o plano yz (\overline{w} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1200 kPa).

Fonte: O autor (2020).

A Figura 4.57 ilustra os campos de concentração no interior do módulo de membrana espiral, sobre planos com seções transversais xy, para velocidade média de 0,16 m/s. Observa-se uma maior concentração de sais na região próxima a superfície da membrana, onde é possível perceber a formação da camada de concentração sobre a membrana que se desenvolve ao longo do seu comprimento.



Figura 4.57: Campo de concentração no interior do módulo de membrana espiral (\overline{w} = 0,16 m/s e ΔP_{TM} = 1200 kPa).

Fonte: O autor (2020).

A Figura 4.58 ilustra a variação de concentração mássica de NaCl na superfície da membrana em função do comprimento para diferentes velocidades médias na corrente de alimentação.

Figura 4.58: Variação da concentração de NaCl sobre a membrana para diferentes velocidades médias ($C_a = 2 \text{ kg/m}^3$, $\Delta P_{TM} = 1200 \text{ kPa}$).



Pode-se observar um deslocamento deste campo de concentração em função do aumento da velocidade média, semelhante à observação feita para a membrana plana.

Na Figura 4.59 estão ilustrados os campos de concentração sobre a superfície da membrana, para as velocidades médias: (a) 0,16 m/s, (b) 0,20 m/s, (c) 0,25 m/s e (d) 0,35 m/s, respectivamente, com concentração inicial de 2 kg/m³. Percebe-se uma variação do campo de concentração formado na superfície da membrana ao longo do seu comprimento.

Figura 4.59: Campo de concentração ao longo da superfície da membrana para: (a) 0,16 m/s, (b) 0,20 m/s, (c) 0,25 m/s e (d) 0,35 m/s, respectivamente $(C_a = 2 \text{ kg/m}^3, \Delta P_{TM} = 1200 \text{ kPa}).$



Estes resultados indicam que a velocidade tangencial influencia na formação e desenvolvimento da camada de concentração, em função dos efeitos relacionados à fluidodinâmica no interior do canal. O aumento da velocidade proporciona uma força de cisalhamento maior causada pelo aumento do fluxo de fluido no canal, que reduz a altura da camada polarizada, reduzindo a concentração sobre a membrana e, consequentemente aumentando o fluxo do permeado, comportamento semelhante foi observado por Fernández-Sempere et al. (2010).

A Figura 4.60 apresenta os perfis de concentração em função da altura dos canais de permeado e concentrado para as velocidades médias de 16, 20, 25 e 35 m/s na corrente de alimentação, plotados sobre uma linha construída no centro da membrana na direção da coordenada x, próxima da saída do módulo, distante 0,24 m do início da membrana, cujo comprimento corresponde à altura dos canais.





É possível observar no gráfico que as concentrações no canal de permeado, correspondentes aos intervalos com alturas de 0,0 a 0,00035 m e de 0,0012 a 0,00155 m, apresentam valores bem menores que a concentração inicial, com uma média de 0,010597 kg/m³, indicando uma rejeição de sais média de 99,47%.

Para o canal de concentrado, correspondente ao intervalo com altura de 0,00035 a 0,0012 m, verifica-se que nas regiões próximas das paredes da membrana a concentração de sais é mais elevada do que no centro do canal, apresentando o mesmo perfil na região próxima da membrana superior e inferior. Observa-se ainda que, com o aumento da velocidade média houve uma redução da altura do perfil de concentração nestas regiões próximas as membranas, evidenciando a influência da velocidade na formação da camada de concentração de polarização.

O fluxo cruzado de permeado, em relação à direção do fluxo de concentrado, direciona o soluto para a superfície da membrana fazendo com que a camada de concentração aumente de espessura. O fluxo de fluido, tangencial a superfície da membrana, no canal de concentrado exerce um efeito de cisalhamento que reduz a camada de polarização de concentração. Reduzindo a concentração na superfície da membrana. menor é а pressão osmótica da solução. consequentemente aumentando o fluxo de permeado, observações semelhantes foram feitas por Fernández-Sempere et al. (2010) e Salcedo-Díaz et al. (2014).

4.4.1. Análise do Número de Voltas

As Tabelas 4.27 a 4.30 apresentam os resultados do fluxo de permeado (J) e vazão mássica de permeado (Q_{mp}) , concentrações médias de permeado (C_p) , concentrado (C_c) e sobre a superfície da membrana (C_w) , para diferentes concentrações de NaCl na corrente de alimentação (C_a) e número de voltas iguais a: uma, duas, três e cinco voltas, respectivamente, com velocidades média igual a 0,2 m/s e pressão transmembranica de 1000 kPa.

Tabela 4.27: Resultados	das simulações da membr	rana espiral	com uma volta para
diferentes concentrações	de NaCl na alimentação ($\overline{w} = 0,2 \text{ m/s}$	s, $\Delta P_{TM} = 1000 \text{ kPa}$)

<i>C_a</i> (kg/m ³)	<i>J</i> (L/m²h)	<i>Q_{mp}</i> (kg/s)	C_p (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C_w</i> (kg/m ³)
1	29,0275	2,911x10 ⁻⁴	0,0053111	1,07116	1,28416
2	26,3675	2,644x10 ⁻⁴	0,0105666	2,13069	2,52507
3	23,732	2,380x10 ⁻⁴	0,0157663	3,17859	3,72122
5	18,5353	1,859x10 ⁻⁴	0,0259969	5,23938	5,97306

Fonte: O autor (2020).

<i>C_a</i> (kg/m ³)	<i>J</i> (L/m ² h)	<i>Q_{mp}</i> (kg/s)	<i>C_p</i> (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	C_w (kg/m ³)
1	29,0276	6,126x10 ⁻⁴	0,0053108	1,07112	1,28413
2	26,3678	5,564x10 ⁻⁴	0,0105661	2,13062	2,52501
3	23,7323	5,008x10 ⁻⁴	0,0157657	3,17849	3,72116
5	18,5357	3,912x10 ⁻⁴	0,0259960	5,23927	5,97302

Tabela 4.28: Resultados das simulações da membrana espiral com duas voltas para diferentes concentrações de NaCl na alimentação ($\overline{w} = 0.2 \text{ m/s}, \Delta P_{TM} = 1000 \text{ kPa}$).

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.29: Resultados das simulações da membrana espiral com três voltas para diferentes concentrações de NaCl na alimentação ($\overline{w} = 0.2 \text{ m/s}, \Delta P_{TM} = 1000 \text{ kPa}$).

C_a (kg/m ³)	<i>J</i> (L/m²h)	<i>Q_{mp}</i> (kg/s)	<i>C_p</i> (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C</i> _w (kg/m ³)
1	29,0277	9,643x10 ⁻⁴	0,0053107	1,07111	1,28411
2	26,3678	8,759x10 ⁻⁴	0,0105660	2,1306	2,52498
3	23,7324	7,884x10 ⁻⁴	0,0157654	3,17847	3,72112
5	18,5359	6,158x10 ⁻⁴	0,0259957	5,23924	5,97298

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.30: Resultados das simulações da membrana espiral com cinco voltas para diferentes concentrações de NaCl na alimentação ($\overline{w} = 0.2 \text{ m/s}, \Delta P_{TM} = 1000 \text{ kPa}$).

C_a (kg/m ³)	<i>J</i> (L/m ² h)	<i>Q_{mp}</i> (kg/s)	<i>C_p</i> (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C</i> _w (kg/m ³)
1	29,0277	1,759x10 ⁻⁴	0,0053110	1,0711	1,28408
2	26,3679	1,598x10 ⁻⁴	0,0105658	2,13059	2,52493
3	23,7325	1,438x10 ⁻⁴	0,0157665	3,17845	3,72106
5	18,536	1,123x10 ⁻³	0,0259979	5,23923	5,97292

Fonte: O autor (2020).

Nos resultados apresentados nas Tabelas 4.27 a 4.30, independente do número de voltas da membrana analisadas, observa-se que na corrente do permeado a concentração média de NaCl ficou abaixo da concentração inicial. Na corrente de concentrado, a concentração média ficou maior que a concentração de alimentação, em função da permeação de água através da membrana, indicando uma rejeição média de sais de 99,47%. Pode-se observar ainda uma concentração de sais mais elevada na superfície da membrana onde o processo de separação ocorre. Comportamento semelhante foi observado nos casos com o módulo de membrana plana.

É possível observar também, tomando um número de voltas da membrana, que o aumento da concentração de alimentação provocou uma redução do fluxo de permeado e da vazão mássica de permeado. Esta redução do fluxo e da vazão de permeado ocorre em função do aumento da resistência a passagem de fluido através da membrana, provocado pelo aumento da pressão osmótica em função do aumento da concentração de sais na solução de alimentação, corroborando com os resultados obtidos por Fernández-Sempere et al. (2010), Gruber et al. (2011) e Salcedo-Días et al. (2014).

A Figura 4.61 ilustra em forma de superfície de resposta o comportamento do fluxo de permeado em função da variação da concentração de alimentação e do número de voltas da membrana espiral.

Figura 4.61: Superfície de resposta do fluxo de permeado em relação a concentração de alimentação e número de voltas da membrana espiral $(\overline{w} = 0.2 \text{ m/s}, \Delta P_{TM} = 1000 \text{ kPa}).$



Fonte: O autor (2020).

Na Figura 4.61 observar-se o comportamento decrescente do fluxo de permeado em função do aumento da concentração de alimentação, não sendo influenciado pelo número de voltas da membrana. Tomando um valor para a

concentração de alimentação, é possível observar que o fluxo de permeado se mantem constante em função do número de voltas da membrana.

A Figura 4.62 ilustra em forma de superfície de resposta o comportamento da vazão mássica de permeado em função da variação da concentração de alimentação e do número de voltas da membrana espiral. É possível observar um aumento da vazão mássica em função da redução da concentração de alimentação e aumento do número de voltas da membrana.

Figura 4.62: Superfície de resposta da vazão mássica de permeado em relação a concentração de alimentação e número de voltas da membrana espiral $(\overline{w} = 0.2 \text{ m/s}, \Delta P_{TM} = 1000 \text{ kPa}).$



Fonte: O autor (2020).

Analisando as Figuras 4.61 e 4.62, verifica-se que o aumento do número de voltas da membrana, não provoca mudança significativa no fluxo de permeado. Entretanto, para a vazão mássica de permeado, o aumento é bastante significativo, visto que o aumento do número de voltas da membrana implica no aumento da área ativa de permeação, sendo também influenciado pela variação da concentração de sais presentes na corrente de alimentação do módulo de membrana.

As Tabelas 4.31 a 3.34 apresentam os resultados do fluxo (J) e vazão mássica de permeado (Q_{mp}), concentrações médias de permeado (C_p), concentrado (C_c) e sobre a superfície da membrana (C_w), para diferentes pressões transmembranica e número de voltas iguais a uma, duas, três e cinco voltas, respectivamente, com concentração inicial de NaCl igual a 2 kg/m³ e velocidades média igual a 0,2 m/s.

ΔP _{TM} (kPa)	<i>J</i> (L/m ² h)	<i>Q_{mp}</i> (kg/s)	<i>C_p</i> (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C_w</i> (kg/m ³)
1000	26,3675	2,644x10 ⁻⁴	0,0105666	2,13069	2,52507
1100	28,2735	2,836x10 ⁻⁴	0,0106085	2,1403	2,56003
1200	30,0853	3,017x10 ⁻⁴	0,0106482	2,14943	2,5929
1300	31,816	3,191x10 ⁻⁴	0,0106860	2,15815	2,62398
1400	33,4759	3,357x10 ⁻⁴	0,0107221	2,1665	2,6535

Tabela 4.31: Resultados das simulações da membrana espiral com uma volta para diferentes pressões transmembranica ($C_a = 2 \text{ kg/m}^3$, $\overline{w} = 0.2 \text{ m/s}$).

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.32: Resultados das simulações da membrana espiral com duas voltas para diferentes pressões transmembranica ($C_a = 2 \text{ kg/m}^3$, $\overline{w} = 0.2 \text{ m/s}$).

ΔP _{TM} (kPa)	<i>J</i> (L/m ² h)	<i>Q_{mp}</i> (kg/s)	<i>C_p</i> (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C_w</i> (kg/m ³)
1000	26,3678	5,564x10 ⁻⁴	0,0105661	2,13062	2,52501
1100	28,2738	5,966x10 ⁻⁴	0,0106080	2,14022	2,55996
1200	30,0856	6,349x10 ⁻⁴	0,0106476	2,14935	2,59282
1300	31,8162	6,714x10 ⁻⁴	0,0106854	2,15805	2,62389
1400	33,4761	7,064x10 ⁻⁴	0,0107215	2,1664	2,6534

Fonte: O autor (2020).

Tabela 4.33: Resultados das simulações da membrana espiral com três voltas para diferentes pressões transmembranica ($C_a = 2 \text{ kg/m}^3$, $\overline{w} = 0.2 \text{ m/s}$).

ΔP _™ (kPa)	<i>J</i> (L/m²h)	<i>Q_{mp}</i> (kg/s)	<i>C_p</i> (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	C_w (kg/m ³)
1000	26,3678	8,759x10 ⁻⁴	0,0105660	2,1306	2,52498
1100	28,2739	9,393x10 ⁻⁴	0,0106078	2,1402	2,55992
1200	30,0857	9,994x10 ⁻⁴	0,0106474	2,14932	2,59278
1300	31,8163	1,057x10 ⁻³	0,0106852	2,15803	2,62384
1400	33,4762	1,112x10 ⁻³	0,0107213	2,16637	2,65334

Fonte: O autor (2020).

ΔP _™ (kPa)	<i>J</i> (L/m²h)	<i>Q_{mp}</i> (kg/s)	<i>C_p</i> (kg/m ³)	<i>C_c</i> (kg/m ³)	<i>C_w</i> (kg/m ³)
1000	26,3679	1,598x10 ⁻³	0,0105658	2,13059	2,52493
1100	28,2739	1,713x10 ⁻³	0,0106069	2,14019	2,55987
1200	30,0857	1,823x10 ⁻³	0,0106466	2,14931	2,59272
1300	31,8164	1,928x10 ⁻³	0,0106843	2,15801	2,62378
1400	33,4763	2,028x10 ⁻³	0,0107204	2,16635	2,65328

Tabela 4.34: Resultados das simulações da membrana espiral com cinco voltas para diferentes pressões transmembranica ($C_a = 2 \text{ kg/m}^3$, $\overline{w} = 0.2 \text{ m/s}$).

Fonte: O autor (2020).

Os resultados apresentados nas Tabelas 4.31 a 4.34, em todos os casos com os números de voltas da membrana analisados, mostram um aumento do fluxo e da vazão mássica de permeado em função do aumento da pressão transmembranica, devido ao fato de que em processos de separação com membranas, o fluxo ser proporcional à pressão aplicada, aumentando a pressão de trabalho aumenta-se a vazão do fluido permeado pela membrana, corroborando com Schneider e Tsutiya (2001), Habert et al. (2006) e Silveira et al. (2015).

Pode-se observar na corrente de permeado que a concentração média de NaCl ficou abaixo da concentração inicial, indicando uma rejeição média de sais pela membrana de 99,47%. Observa-se também, com o aumento da pressão transmembranica, um pequeno aumento da concentração média de NaCl na corrente de concentrado e sobre a superfície da membrana, que ocorre em função do aumento da vazão de permeado, que diminui o volume de água na corrente de concentrado, ficando com a concentração de sais mais elevada.

A Figura 4.63 ilustra em forma de superfície de resposta o comportamento do fluxo de permeado em função do número de voltas da membrana espiral e da pressão transmembranica. É possível observar um aumento significativo do fluxo de permeado em função do aumento da pressão transmembranica, promovendo um aumento da permeação de água através da membrana.

Figura 4.63: Superfície de resposta do fluxo de permeado em relação ao número de voltas da membrana espiral e da pressão transmembranica ($C_a = 2 \text{ kg/m}^3$, $\overline{W} = 0.2 \text{ m/s}$).



Fonte: O autor (2020).

Analisando a Figura 4.63, verifica-se que a variação do número de voltas da membrana não afeta o fluxo de permeado, assim como foi observado na Figura 4.61. Tomando uma pressão transmembranica, é possível observar que o fluxo de permeado se mantem constante em função do número de voltas da membrana.

A Figura 4.64 ilustra em forma de superfície de resposta o comportamento da vazão mássica de permeado em função do número de voltas da membrana espiral e da pressão transmembranica.

É possível observar na Figura 4.64 um aumento da vazão mássica com o aumento da pressão transmembranica e do número de voltas da membrana, sendo o número de voltas o que provoca o efeito mais significativo, por promover um aumento da área superficial da membrana.





Fonte: O autor (2020).

Portanto, pôde-se observar nos casos estudados com a membrana em espiral, que o fluxo de permeado sofreu influência da concentração de alimentação e da pressão transmembranica, não sendo afetado pelo número de voltas da membrana. A vazão mássica de permeado tem dependência com a concentração da solução de alimentação, pressão transmembranica, e do número de voltas da membrana.

CAPÍTULO 5 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS

Este capítulo apresenta as principais conclusões obtidas nesse trabalho, bem como sugestões a serem executadas em trabalhos futuros.

5.1 Conclusões

As simulações dos diferentes casos oriundas de um estudo do índice de convergência de malha e da distribuição t de Student ao nível de confiança de 95% conduziram a resultados quem indicam uma boa concordância com os dados experimentais e/ou teóricos reportados na literatura.

A dinâmica do fluido no interior do canal de concentrado favoreceu a redução da camada polarizada mantendo-se sentido no escoamento das correntes de alimentação e de concentrado.

O aumento da curvatura do módulo da membrana proporcionou um aumento de 0,03% no fluxo de permeado e redução de 1,68% na concentração de NaCl sobre a superfície da membrana.

Variações em grandezas envolvidas no processo de separação, como velocidade, concentração e pressão, influenciam no desenvolvimento da camada limite de concentração de polarização, assim como no fluxo de permeado.

Os resultados indicam que o aumento da pressão transmembranica eleva o fluxo de permeado e a concentração de sais sobre a membrana.

As simulações mostraram que aumento na velocidade do fluido no interior do módulo reduz a altura da camada de concentração de polarização, influenciando no fluxo de permeado.

As variações da concentração inicial resultam em alterações no fluxo de permeado e na formação da camada polarizada, de forma que maiores concentrações reduzem o fluxo de permeado.

A configuração da membrana em espiral apresentou um aumento relevante na capacidade de produção do módulo de membrana. O fluxo de permeado sofreu influência da concentração inicial e da pressão transmembranica.

A vazão mássica de permeado teve dependência com a concentração inicial da solução, pressão transmembranica e com o número de voltas da membrana.

Foi possível avaliar a formação da camada de concentração de sais na superfície de membranas para dessalinização por OI e o seu desempenho empregando a fluidodinâmica computacional.

5.2 Sugestões de Trabalhos Futuros

Como sugestões para trabalhos futuros e enriquecer a discussão neste tema, tomando como base a estrutura já desenvolvida, pode-se citar:

- Analisar o modelo com outros sais presentes na solução de alimentação;
- Construir um módulo experimental com uma membrana em espiral para validar o modelo apresentado;
- Desenvolver uma correlação para estudar a espessura da camada limite de concentração de polarização;
- Desenvolver um modelo considerando a membrana como um meio poroso;
- ✓ Desenvolver um modelo adicionando ao módulo da membrana os espaçadores de separação dos canais;
- ✓ Analisar o comportamento do sistema em regime transiente;
- Analisar o módulo de membrana operando sob regime turbulento a influência dos diferentes modelos de turbulência sobre o processo de separação.

AL-OBAIDI, M. A.; MUJTABA, I. M. Steady state and dynamic modeling of spiral wound wastewater reverse osmosis process. **Computers and Chemical Engineering**, v. 90, p. 278–299, 2016.

ALEXIADIS, A.; WILEY, D. E.; VISHNOI, A.; et al. CFD modelling of reverse osmosis membrane flow and validation with experimental results. **Desalination**, v. 217, n. 1–3, p. 242–250, 2007.

ANADÃO, P. **Ciência e Tecnologia de Membranas**. São Paulo: Editora Artliber Ltda, 2010.

ANSYS15.0. ANSYS CFX Tutorials. 2013a.

ANSYS15.0. ANSYS CFX Reference Guide. 2013b.

BAKER, R. W. Membrane Technology and Applications. 3rd ed. Wiley, 2012.

BUSSAB, W. DE O.; MORETTIN, P. A. **Estatística Básica**. 6th ed. São Paulo - SP: Editora Saraiva, 2009.

CADT. COMMITTEE ON ADVANCING DESALINATION TECHNOLOGY, Desalination: a national perspective. EUA, 2008.

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, n. 2, p. 157–176, 2001.

CELIK, I. B.; GHIA, U.; ROACHE, P. J.; et al. Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications. **Journal of Fluids Engineering, Transactions of the ASME**, v. 130, n. 7, p. 0780011–0780014, 2008.

CELIK, I.; KARATEKIN, O. Numerical experiments on application of richardson extrapolation with nonuniform grids. **Journal of Fluids Engineering, Transactions of the ASME**, v. 119, n. 3, p. 584–590, 1997.

CHANGWEI, H. U.; PENG, K. E.; SHUGUANG, Z. Experiment and CFD investigation on gravity effects in reverse osmosis. **45th International Conference on Environmental Systems**, n. July, p. 1–10, 2015.

COSTA, A. R. DA; FANE, A. G.; FELL, C. J. D.; FRANKEN, A. C. M. Optimal channel spacer design for ultrafiltration. **Journal of Membrane Science**, v. 62, n. 3, p. 275–291, 1991.

CUNHA, A. DE L. Tratamento de Efluentes da Indústria de Petróleo Via Membranas Cerâmicas – Modelagem e Simulação. 2014. Tese (Doutorado em Engenharia de Processos), Universidade Federal de Campina Grande. 2014.

DAMAK, K.; AYADI, A.; SCHMITZ, P.; ZEGHMATI, B. Modeling of crossflow membrane separation processes under laminar flow conditions in tubular membrane. **Desalination**, v. 168, n. 1–3, p. 231–239, 2004.

DAMAK, K.; AYADI, A.; ZEGHMATI, B.; SCHMITZ, P. Concentration polarisation in tubular membranes - A numerical approach. **Desalination**, v. 171, n. 2, p. 139–153,

2004.

EL-DESSOUKY, H. T.; ETTOUNEY, H. M. Fundamentals of Salt Water **Desalination**. Amsterdam: Elsevier B.V., 2002.

FERNÁNDEZ-SEMPERE, J.; RUIZ-BEVIÁ, F.; GARCÍA-ALGADO, P.; SALCEDO-DÍAZ, R. Experimental study of concentration polarization in a crossflow reverse osmosis system using Digital Holographic Interferometry. **Desalination**, v. 257, n. 1– 3, p. 36–45, 2010.

FLETCHER, D. F.; WILEY, D. E. A computational fluids dynamics study of buoyancy effects in reverse osmosis. **Journal of Membrane Science**, v. 245, n. 1–2, p. 175–181, 2004.

FORTUNA, A. DE O. Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações. 2nd ed. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2012.

GAUTO, M.; ROSA, G. **Química Industrial**. Porto Alegre - RS: Editora Bookman, 2013.

GERALDES, V.; SEMIÃO, V.; PINHO, M. N. DE. Flow and mass transfer modelling of nanofiltration. **Journal of Membrane Science**, v. 191, n. 1–2, p. 109–128, 2001.

GHIDOSSI, R.; VEYRET, D.; MOULIN, P. Computational fluid dynamics applied to membranes: State of the art and opportunities. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 45, n. 6, p. 437–454, 2006.

GRUBER, M. F.; JOHNSON, C. J.; TANG, C. Y.; et al. Computational fluid dynamics simulations of flow and concentration polarization in forward osmosis membrane systems. **Journal of Membrane Science**, v. 379, n. 1–2, p. 488–495, 2011.

GU, B.; ADJIMAN, C. S.; XU, X. Y. The effect of feed spacer geometry on membrane performance and concentration polarisation based on 3D CFD simulations. **Journal of Membrane Science**, v. 527, p. 78–91, 2017.

HABERT, A. C.; BORGES, C. P.; NOBREGA, R. **Processos de separação com membranas**. Rio de Janeiro: Série Escola Piloto em Engenharia Química, COPPE/UFRJ, 2006.

HAIDARI, A. H.; HEIJMAN, S. G. J.; MEER, W. G. J. VAN DER. Optimal design of spacers in reverse osmosis. **Separation and Purification Technology**, v. 192, n. July 2017, p. 441–456, 2018.

INVENTOR2016. Autodesk INVENTOR® 2016 - Tutorials. 2016.

KUCERA, J. Reverse Osmosis – Design, Processes and Applications for Engineers. 2nd ed. Scrivener Publishing LLC, 2015.

LIN, D.; DING, Z.; LIU, L.; MA, R. Modeling spiral-wound membrane modules with applications for gas/vapor permeation. **Computers and Chemical Engineering**, v. 44, p. 20–33, 2012.

LIRA, R. H. P. Avaliação do pré-tratamento de um sistema de dessalinização piloto via osmose inversa. 2004. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Universidade Federal de Campina Grande. 2004.

MALLEVIALLE, J.; ODENDAAL, P. E.; WIESNER, M. R. Water Treatment Membrane Processes. New York: McGraw Hill, 1996.

MIERZWA, J. C.; HESPANHOL, I. Água na Indústria: Uso Racional e Reúso. 1st ed. São Paulo - SP: Editora Oficina de Textos, 2005.

MONTGOMERY, D. C.; RUNGER, G. C. Estatística Aplicada e Probabilidade para Engenheiros. 4th ed. Rio de Janeiro - RJ: Editora LTC, 2009.

MULDER, M. **Basic Principles of Membrane Technology**. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1992.

NETO, B. DE B.; SCARMINIO, I. S.; BRUNS, R. E. **Como fazer Experimentos: Pesquisa e Desenvolvimento na Ciência e na Indústria**. 4th ed. Porto Alegre -RS: Editora Bookman, 2010.

NUNES, S. A. **Modelagem e Simulação do Tratamento de Água Produzida Usando um Separador Ciclônico Filtrante**. 2019. Tese (Doutorado em Engenharia de Processos), Universidade Federal de Campina Grande. 2019.

OSADA, Y.; NAKAGAWA, T. **Membrane Science and Technology**. New York: Marcel Deker, Inc., 1992.

PAD. Documento Base - Programa Água Doce. Brasília – DF, 2012.

PAUDEL, S.; SAENGER, N. Grid refinement study for three dimensional CFD model involving incompressible free surface flow and rotating object. **Computers and Fluids**, v. 143, p. 134–140, 2017.

ROACHE, P. J. Perspective: A method for uniform reporting of grid refinement studies. **Journal of Fluids Engineering, Transactions of the ASME**, v. 116, n. 3, p. 405–413, 1994.

RODRIGUES, M. I.; IEMMA, A. F. **Planejamento de Experimentos e Otimização de Processos**. Campinas - SP: Cárita Editora, 2014.

SALCEDO-DÍAZ, R.; GARCÍA-ALGADO, P.; GARCÍA-RODRÍGUEZ, M.; FERNÁNDEZ-SEMPERE, J.; RUIZ-BEVIÁ, F. Visualization and modeling of the polarization layer in crossflow reverse osmosis in a slit-type channel. **Journal of Membrane Science**, v. 456, p. 21–30, 2014.

SANTOS, R. S. Estudo do Processo de Secagem de Blocos Cerâmicos Estruturais: Modelagem e Simulação. 2019. Tese (Doutorado em Engenharia de Processos), Universidade Federal de Campina Grande. 2019.

SCHNEIDER, R. P.; TSUTIYA, M. T. **Membranas filtrantes para o tratamento de água, esgoto e água de reuso**. São Paulo: ABES, 2001.

SHIRAZI, M. M. A.; KARGARI, A.; ISMAIL, A. F.; MATSUURA, T. Computational Fluid Dynamic (CFD) opportunities applied to the membrane distillation process: State-of-the-art and perspectives. **Desalination**, v. 377, p. 73–90, 2016.

SILVEIRA, A. P. P.; NUVOLARI, A.; DEGASPERI, F. T.; FIRSOFF, W. **Dessalinização de Águas**. São Paulo: Editora Oficina de Textos, 2015.

SRINIVASAN, G.; SUNDARAMOORTHY, S.; MURTHY, D. V. R. Validation of an analytical model for spiral wound reverse osmosis membrane module using experimental data on the removal of dimethylphenol. **Desalination**, v. 281, p. 199–208, 2011.

SUNDARAMOORTHY, S.; SRINIVASAN, G.; MURTHY, D. V. R. An analytical model for spiral wound reverse osmosis membrane modules: Part I - Model development

and parameter estimation. Desalination, v. 280, n. 1–3, p. 403–411, 2011a.

SUNDARAMOORTHY, S.; SRINIVASAN, G.; MURTHY, D. V. R. Reprint of : " An analytical model for spiral wound reverse osmosis membrane modules: Part II - Experimental validation ." **Desalination**, v. 280, n. 1–3, p. 432–439, 2011b.

WANG, L. K.; CHEN, J. P.; HUNG, Y.-T.; SHAMMAS, N. K. Membrane and Desalination Technologies. NY, USA: Humana Press, 2011.

WARDEH, S.; MORVAN, H. P. CFD simulations of flow and concentration polarization in spacer-filled channels for application to water desalination. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 6, n. January, p. 1107–1116, 2008.

WIESNER, M. R.; APTEL, P. Mass Transport and Permeate Flux and Fouling in **Pressure-driven Processes**. in Water Treatment Membrane Processes, Joel Mallevialle, Peter E. Odendaal and Mark R. Wiesner, (Eds), New York: McGraw-Hill Publishers, 1996.

WIESNER, M. R.; BUCKLEY, C. A. **Principles of Rejection in Pressure-driven Membrane Processes**. in Water Treatment Membrane Processes, Joel Mallevialle, Peter E. Odendaal and Mark R. Wiesner, (Eds), New York: McGraw-Hill Publishers, 1996.

WILEY, D. E.; FELL, C. J. D.; FANE, A. G. Optimisation of membrane module design for brackish water desalination. **Desalination**, v. 52, p. 249–265, 1985.

WILEY, D. E.; FLETCHER, D. F. Techniques for computational fluid dynamics modelling of flow in membrane channels. **Journal of Membrane Science**, v. 211, n. 1, p. 127–137, 2003.

O fluxo de permeado através de membranas pode ser estimado por meio da equação de Hagen-Poiseuiller (MULDER, 1992; WIESNER; APTEL, 1996; HABERT et al., 2006; BAKER, 2012):

$$J = \frac{\varepsilon r_{\rho}^2}{8\mu\tau} \frac{\Delta P}{\Delta x}$$
(1.A)

onde *J* é o fluxo permeado, ε é a porosidade da membrana, μ é a viscosidade do penetrante, τ é a tortuosidade do poro, r_{ρ} é o raio do poro, ΔP é a diferença de pressão entre os dois lados da membrana e Δx a espessura da membrana.

De acordo com a Equação (1.A) há um coeficiente de proporcionalidade (permeabilidade) entre o fluxo de permeado e a pressão aplicada, dado por (HABERT et al., 2006):

$$L_{p} = \frac{\varepsilon r_{p}^{2}}{8\mu\tau\Delta x}$$
(2.A)

A permeabilidade L_p está relacionada com as propriedades do fluido (viscosidade e densidade) e as características físicas do meio poroso (porosidade, tortuosidade, diâmetro dos poros, espessura), pode ser entendida como uma medida de maior ou menor facilidade que a membrana oferece a passagem de um dado solvente, usada principalmente na determinação do fluxo de permeado (HABERT et al., 2006).

O inverso da permeabilidade é uma medida de resistência ($R_m = 1/\mu L_p$) que o meio oferece ao transporte de fluido através da membrana, desta forma a Equação (1.A) pode ser expressa por (MULDER, 1992; WIESNER; APTEL, 1996; HABERT et al., 2006):

$$J = \frac{1}{\mu R_m} \Delta P \tag{3.A}$$

O modelo osmótico admite que a queda de fluxo observada quando se trabalha com uma solução em relação ao solvente puro, ocorre em função da pressão osmótica do soluto presente na solução (HABERT et al., 2006). Por

analogia a equação de Darcy, com base no modelo osmótico, o fluxo de permeado pode ser escrito conforme a Equação (4.A) (MULDER, 1992; OSADA; NAKAGAWA, 1992; WIESNER; APTEL, 1996; HABERT et al., 2006).

$$J = \frac{1}{\mu R_m} (\Delta P - \Delta \pi)$$
(4.A)

ou

$$J = L_{\rho} (\Delta \mathsf{P} - \Delta \pi) \tag{5.A}$$

onde L_p é um parâmetro de permeabilidade para água pura que corresponde ao coeficiente *K* (permeabilidade hidráulica) na equação 3.4 (OSADA; NAKAGAWA, 1992), ΔP é a queda de pressão através da membrana (pressão transmembranica) e $\Delta \pi$ é a diferença de pressão osmótica entre a solução em contato com a membrana e a solução permeada (HABERT et al., 2006).

Desta forma, o coeficiente *K* definido na equação 3.4, é um coeficiente baseado no fluxo de permeação do solvente puro. Entretanto, o valor de *K* varia sob diferentes condições de operação podendo ser ajustado para o problema analisado (FLETCHER; WILEY, 2004; CHANGWEI et al., 2015).

A determinação dos coeficientes K1 e K2 foi realizada tomando como base os dados experimentais reportados por Alexiads et al. (2007).

Foram plotados gráficos do coeficiente versos pressão transmembranica, conforme ilustrado nas Figuras A-1 e A-2, para K1 e K2, respectivamente.

Os coeficientes K1 e K2 (m/s.Pa) foram determinados a partir de ajustes aos dados plotados, conforme as seguintes expressões:

$$K1 = a \,\Delta P_{\rm TM}{}^b \tag{6.A}$$

sendo $a = 9,5 \times 10^{-11}$ (m/s.Pa^{0,809}) e b = -0,191; para 0,03 < \bar{u} < 0,1 m/s e 900 < ΔP_{TM} < 1200 kPa,

$$K2 = c \,\Delta \mathsf{P}_{\mathsf{TM}}{}^d \tag{7.A}$$

sendo $c = 4,6x10^{-9}$ (m/s.Pa^{0,547}) e d = -0,453; para 0,08 < \bar{u} < 0,24 m/s e 900 < ΔP_{TM} < 1400 kPa, onde \bar{u} é a velocidade média (m/s) e ΔP_{TM} é a pressão transmembranica (Pa).



Figura A-1: Coeficiente K1 em função pressão transmembranica.

Figura A-2: Coeficiente K2 em função pressão transmembranica.

