

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE
PROCESSOS**

**ESTUDO DA FLUIDODINÂMICA DA DESSALINIZAÇÃO
DAS ÁGUAS SALOBRAS VIA OSMOSE REVERSA:
MODELAGEM E SIMULAÇÃO**

Diego David Silva Diniz

ORIENTADOR: Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE
PROCESSOS**

**ESTUDO DA FLUIDODINÂMICA DA DESSALINIZAÇÃO
DAS ÁGUAS SALOBRAS VIA OSMOSE REVERSA:
MODELAGEM E SIMULAÇÃO**

Diego David Silva Diniz

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia de Processos, área de concentração: Simulação de Processos. Orientador: Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto

D535e Diniz, Diego David Silva.
Estudo da fluidodinâmica da dessalinização das águas salobras via osmose reversa : modelagem e simulação / Diego David Silva Diniz. - Campina Grande, 2021.
248 f. : il. Color

Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) - Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2021.
"Orientado: Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto".
Referências.

1. Dessalinização. 2. Osmose Reversa. 3. Modelagem Computacional. 4. Promotores de Turbulência. I. Farias Neto, Severino Rodrigues de. II. Título.


CDU 66.065.31(043)

ESTUDO DA FLUIDODINÂMICA DA DESSALINIZAÇÃO DAS ÁGUAS SALOBRAS VIA OSMOSE REVERSA: MODELAGEM E SIMULAÇÃO

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia
de Processos da Universidade Federal de Campina Grande por
Diego David Silva Diniz

Aprovado em 26 de fevereiro de 2021.

Membros da Banca:



Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto

Orientador – UFCG



Prof. Dr. Boniek Evangelista Leite

Examinador Interno – PPGE/CCT/UFCG



Profa. Dra. Fabiana Pimentel Macêdo Farias

Examinadora Externa – UATEC/CDSA/UFCG



Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira

Examinador Externo – DESA/CCT/UEPB



Prof. Dr. Raniere Henrique Pereira Lira

Examinador Externo – CSER/Campus Sertão/UFAL

Dedico este trabalho a Deus, aos meus pais, Pedro Diniz e Rosa de Lourdes Silva Diniz, à minha família, à minha noiva, aos meus amigos e a todos que contribuíram direta ou indiretamente na construção deste trabalho.

Dedicatória

AGRADECIMENTOS

Meus sinceros agradecimentos:

À Deus, em primeiro lugar, por ter me guiado pelo caminho certo durante o decorrer do doutorado e por ter me dado forças nas horas mais difíceis.

À minha família, pelo incentivo e empenho na construção de minha educação, aos quais dedico todas as minhas vitórias já conquistadas e as futuras.

Ao Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto, pela orientação e correção deste trabalho, pela oportunidade de realizar essa pós-graduação, além de toda paciência.

Aos professores do Programa de Pós-graduação em Engenharia de Processos, que me apoiaram neste período.

Aos meus amigos de laboratório, que colaboraram para tornar esse trabalho possível e prazeroso.

À minha noiva Sâmela Duarte, pela companhia e pelo apoio na construção deste trabalho.

À Universidade Federal Rural do Semi-árido (UFERSA), por ter concedido e aprovado a realização dessa pós-graduação com afastamento integral dos meus trabalhos e manutenção da remuneração.

DINIZ, D. D. S., Estudo da fluidodinâmica da dessalinização das águas salobras via osmose reversa: modelagem e simulação. 2021. 248f. Tese de Doutorado - Programa de Pós-Graduação de Engenharia de Processos, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, Brasil, 2021.

RESUMO

Nas últimas décadas, vem se acentuando ainda mais a preocupação com a escassez hídrica, ocasionada pelo aumento da população mundial e pela mudança climática drástica do planeta. A partir dessa problemática, foram intensificados inúmeros estudos para desenvolvimento de técnicas e/ou tecnologias com o objetivo principal de aumentar a quantidade de água potável no mundo. Dentre essas técnicas destaca-se a dessalinização por processo de separação de membranas via osmose reversa. Com o auxílio e a evolução da computação, tornou-se viável a realização de simulações numéricas com modelos complexos capazes de compreender o real comportamento dos fenômenos presente nesse processo, assim será possível otimizá-lo e torná-lo mais eficiente. Neste contexto, o presente trabalho visa apresentar um estudo de modelagem computacional com foco na otimização do processo de separação por membrana via osmose reversa por meio da análise da geometria do módulo de permeação e dos efeitos dos promotores de turbulência. A modelagem computacional foi realizada pelo software ANSYS FLUENT através do método de volumes finitos, com o emprego de UDFs (*User Defined Function*). A modelagem matemática foi baseada nas equações de conservação de massa, movimento e de transporte de espécie, além disso, o modelo de Spiegler e Kedem foi utilizado para caracterizar os efeitos da membrana no fluxo de permeação. Os resultados nas simulações obtidos pelo modelo proposto proporcionaram uma análise detalhada dos comportamentos hidrodinâmicos do escoamento e da formação da camada limite de concentração por polarização sob efeitos dos promotores de turbulência, em que, ao comparar com resultados reportados pela literatura, foi observado discrepâncias inferiores a 7%. Ao analisar o efeito dos promotores de turbulência, constatou-se um efeito benéfico na redução de soluto ao longo da superfície da membrana e que havia variação de desempenho do processo quando se tinha alterações geométricas dos espaçadores, em que foi possível quantificar suas eficiências através do uso de parâmetros, como SPMP (Razão de Performance do Espaçador), $SPMP_{mod}$, a perda de pressão por unidade de comprimento e quantidade de fluxo permeado. Baseado nesses parâmetros e nas geometrias estudadas, foi observado que os espaçadores circulares tiveram melhores performances de processo, apresentando o melhor equilíbrio dentre perda de carga e capacidade de produção do produto final, que é a água potável. Quanto às geometrias tridimensionais utilizadas, verificou-se alterações na formação da camada de concentração por polarização quando se modificava geometria dos canais e que os filamentos transversais ao escoamento são mais efetivos no combate da camada polarizada do que os filamentos longitudinais.

Palavras-chave: Dessalinização. Osmose reversa. Modelagem Computacional. Promotores de Turbulência.

DINIZ, D. D. S., Study of the fluid dynamics of desalination of brackish waters via reverse osmosis: modeling and simulation. 2021. 248f. Doctoral thesis, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, Universidade Federal de Campina Grande, Brazil, 2021.

ABSTRACT

In the last decades, the concern with water scarcity, caused by the increase of the global population and by the drastic climate change of the planet, has been even more accentuated. Based on this problem, numerous studies have been intensified for the development of techniques and / or technologies with the main objective of increasing the amount of drinking water in the world, one of these techniques being desalination by the membrane separation process via reverse osmosis. With the help and evolution of computing, it became feasible to perform numerical simulations with complex models capable of understanding the real behavior of the phenomena present in this process, so it will be possible to optimize it and make it more efficient. Within this context, this work aims to present a study of computational modeling focusing on the optimization of the membrane separation process via reverse osmosis through the analysis of the permeation module geometry and the effects of the turbulence promoters. The computational modeling was performed by ANSYS FLUENT software through finite volume method, with the use of UDFs (*User Defined Function*). The mathematical modeling was based on mass conservation, movement and species transport equations, also, the Spiegler and Kedem model was used in order to characterize the effects of the membrane on the permeation flow. The results in the simulations obtained by the proposed model provided a detailed analysis of the hydrodynamic behavior of the flow and the formation of the concentration polarization limit layer by under the effects of turbulence promoters, in which, when comparing with results reported in the literature, it was observed discrepancies below 7%. When analyzing the effect of the turbulence promoters, it was found a beneficial effect in the reduction of solute along the membrane surface and that there was variation in the performance of the process when there were geometric changes in the spacers; so, it was possible to quantify their efficiencies through the use of parameters, such as SPMP (Spacer Performance Ratio), $SPMP_{mod}$, pressure loss per unit length and amount of permeate flow. Based on these parameters and studied geometries, it was observed that the circular spacers had better process performances, presenting the best balance between pressure loss and production capacity of the final product, which is drinking water. For the three-dimensional geometries used, there were changes in the formation of the concentration polarization layer when the channels geometry was modified and that the transversal filaments to the flow are more effective in combating the polarized layer than the longitudinal filaments.

Keywords: Desalination. Reverse osmosis. Computational modeling. Turbulence Promoters.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Distribuição da população mundial em função dos serviços de água potável disponível	23
Figura 2.1 – Capacidade contratada anual por tipo de tecnologia, 2013–2020.....	30
Figura 2.2 – Características dos processos de separação por membranas.....	32
Figura 2.3 – Esquema do processo de osmose (a) e osmose reversa (b).....	34
Figura 2.4 – Representação esquemática do processo de dessalinização por RO.....	34
Figura 2.5 – Planta industrial de osmose reversa	35
Figura 2.6 – Efeito da concentração de sal de alimentação nas propriedades de membranas de dessalinização de água do mar de boa qualidade (SW-30)	36
Figura 2.7 – Tipos de módulos de membrana industriais.....	38
Figura 2.8 – Módulo espiral e a seção transversal do módulo	39
Figura 2.9 – Configurações dos espaçadores de alimentação: (a) <i>nonwoven</i> , (b) <i>woven</i> parcial, (c) meia camada, (d) <i>woven</i> completo.....	40
Figura 2.10 – Característica da geometria da malha dos espaçadores <i>nonwoven</i> adotado por Li et al. (2002)	40
Figura 2.11 – Camada de concentração mássica do sal próximos aos espaçadores para promotores circular, elíptico e oval.....	41
Figura 2.12 – Declínio típico do fluxo durante o processo de filtração	42
Figura 2.13 – Interferogramas para experimento com concentração na alimentação de 6kg/m^3 e número de Reynolds de 13	44
Figura 2.14 – Perfis de concentração para experimentos com concentração na alimentação de 6kg/m^3 e número de Reynolds variando em 13, 38, 111.....	44
Figura 2.15 – Representação do processo de formação do acúmulo de soluto na superfície da membrana, surgindo a camada limite da polarização por concentração	45
Figura 2.16 – Perfil de polarização de concentração sob condições de estado estacionário....	46
Figura 2.17 – Métodos utilizados para aumento da eficiência do PSM	49
Figura 2.18 – Trabalho de Usta et al. (2017): (a) detalhamento da malha; (b) esquema escolhido para abordar o problema a ser analisado e (c) resultado do contornos do fluxo de água através da membrana superior para nervuras quadradas (lado da esquerda) e nervuras triangulares (lado da direita), para um fluxo de entrada com $\text{Re} = 1000$	51
Figura 2.19 – Simulação do escoamento com presença de vorticidade no escoamento na aplicação de espaçadores cilíndricos para diversos número de Reynolds, tais como: (a) 70, (b) 90, (c) 110 e (d) 170.....	54

Figura 2.20 – Configurações de arranjos dos espaçadores usados por Ma, Kassinos e Fatta (2006)	55
Figura 2.21 – Resultados do campo: (a, c, e) correspondente a velocidade do fluxo e (b, d, f) correspondente fração de massa de sal, para vários números de Reynolds em $t = 1s$; para zigue-zague	56
Figura 2.22 – Perfil de polarização por concentração e fluxo permeado para diferentes números de Reynolds de entrada	57
Figura 2.23 – Perfil de polarização de concentração para arranjo de zigue-zague, condições adotadas por Li et al. (2019).....	58
Figura 2.24 – Campos de velocidades para arranjo de zigue-zague, condições adotadas por Li et al. (2019)	59
Figura 2.25 – Comparação dos fluxos médios de água em um canal unitário para diferentes configurações de geometrias de rede espaçadoras	60
Figura 2.26 – Campo de velocidade e contornos de concentração nos planos yz para FW60A (a) e (b); FW30A (c) e (d)	60
Figura 2.27 – Resultado do fluxo de escoamento para $h/D = 0,05$, $Re = 193$, plotado por <i>fluid-particle pathlines</i>	63
Figura 2.28 – Curvas de concentração ao longo da superfície da membrana com uso do modelo Spiegler e Kedem e fluxo constante	71
Figura 2.29 – Efeito da pressão na taxa de rejeição e fluxo para o sistema NaCl-H ₂ O com taxa de fluxo (m ³ /s), onde S' representa os resultados simulados e 'E' as observações experimentais	77
Figura 2.30 – Esquematização da polarização de concentração.....	79
Figura 2.31 – Diagrama do modelo de teoria do trabalho de Shu et al. (2016).....	85
Figura 2.32 – Perfil dos fluxos ao longo da membrana.....	86
Figura 2.33 – Distribuições do tamanho dos poros das amostras de membrana a 8×10^5 Pa (8 bar)	88
Figura 3.1 – Fluxograma com as etapas necessárias para uso do CFD	91
Figura 3.2 – Objeto de estudo.....	93
Figura 3.3 – Fluxograma dos estudos proposto	94
Figura 3.4 – Identificação da quantidade de geometrias necessárias	95
Figura 3.5 – Geometria sem espaçador utilizado	96
Figura 3.6 – Geometria com espaçadores quadrado no arranjo submerso	96
Figura 3.7 – Geometria com espaçadores quadrado no arranjo zigue-zague	97
Figura 3.8 – Geometria dos espaçadores propostos	97

Figura 3.9 – Identificação da simulação 3D	98
Figura 3.10 – Geometria domínio 3D e suas dimensões	99
Figura 3.11 – Malha numérica do domínio 2D sem espaçadores.....	100
Figura 3.12 – Refinamento e blocagem nas regiões próximas ao espaçador	101
Figura 3.13 – Geometria tridimensional com espaçador utilizado no trabalho.....	101
Figura 3.14 – Identificação das zonas para aplicação das condições de contorno e modelos	104
Figura 3.15 – Condições de contorno e equações aplicadas na geometria tridimensional.....	108
Figura 3.16 – Fluxograma dos procedimentos de solução acoplados com as UDFs.....	112
Figura 3.17 – Algoritmo SIMPLE.....	113
Figura 3.18 – Parâmetros a ser estudados.....	115
Figura 4.1 – Evolução do fator de concentração para vários critérios de convergências.....	119
Figura 4.2 – Evolução do fator de concentração para diferentes malhas	120
Figura 4.3 – Comparação entre os resultados obtidos com modelos citados no Quadro 3.1 e os dados de De Pinho, Semião e Geraldês (2002), na pressão de 1 MPa na saída	121
Figura 4.4 – Comparação entre os resultados obtidos com modelos citados no Quadro 3.1 e os dados de De Pinho, Semião e Geraldês (2002), na pressão de 2 MPa na saída	121
Figura 4.5 – Comparação entre os resultados obtidos com modelos citados no Quadro 3.1 e os dados de De Pinho, Semião e Geraldês (2002), na pressão de 3 MPa na saída	122
Figura 4.6 – Comparação entre os resultados simulados e os obtidos por De Pinho, Semião e Geraldês (2002), Ahmad et al. (2005b) e Amokrane et al. (2015), para pressão de 1 MPa	124
Figura 4.7 – Comparação entre os resultados simulados e os obtidos por De Pinho, Semião e Geraldês (2002), Ahmad et al. (2005b) e Amokrane et al. (2015), para pressão de 2 MPa	125
Figura 4.8 – Comparação entre os resultados simulados e os obtidos por De Pinho, Semião e Geraldês (2002), Ahmad et al. (2005b) e Amokrane et al. (2015), para pressão de 3 MPa	125
Figura 4.9 – Distribuição de pressão no domínio 2D (Pressão de 1 MPa na saída do concentrado e Re 500)	127
Figura 4.10 – Distribuição da velocidade no domínio 2D (Pressão de 1 MPa e Re 500)	127
Figura 4.11 – Perfil da velocidade axial na região de saída dos canais.....	128
Figura 4.12 – Distribuição da fração mássica do soluto no domínio (Pressão de 1 MPa e Re 500).....	129
Figura 4.13 – Efeito do perfil de velocidade na seção de entrada sobre o comportamento da camada de concentração de polarização.....	130

Figura 4.14 – Curva da fração mássica na região $y = 0,1$ m	130
Figura 4.15 – Fluxo do permeado e o fator CP na superfície da membrana	131
Figura 4.16 – Espessura da camada polarizada para diferentes Números de Reynolds.....	132
Figura 4.17 – Evolução do fator de concentração para diferentes números de Reynolds.....	133
Figura 4.18 – Evolução do fluxo permeado calculado em função do número de Reynolds para diferentes pressões aplicadas.....	133
Figura 4.19 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador quadrado e com arranjo submerso a Re 100 e pressão 1 MPa.....	135
Figura 4.20 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador quadrado e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa.....	136
Figura 4.21 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador quadrado e com arranjo submerso a Re 300 e pressão 1 MPa.....	136
Figura 4.22 – Curvas do fator F para domínio com e sem espaçador (Re 100 e 1 MPa).....	137
Figura 4.23 – Perfis do fluxo permeado para domínio com e sem espaçador (Re 100 e 1 MPa)	138
Figura 4.24 – Curvas do fator F para domínio com e sem espaçador (Re 200 e 1 MPa).....	139
Figura 4.25 – Perfis do fluxo permeado para domínio com e sem espaçador (Re 200 e 1 MPa)	140
Figura 4.26 – Curvas do fator F para domínio com e sem espaçador (Re 300 e 1 MPa).....	140
Figura 4.27 – Perfis do fluxo permeado para domínio com e sem espaçador (Re 300 e 1 MPa)	141
Figura 4.28 – Espaçador e Espaçador R01	141
Figura 4.29 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador R01 e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa.....	142
Figura 4.30 – Curvas do fator F dos casos com condição Re 200 e 1 MPa	143
Figura 4.31 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa.....	143
Figura 4.32 – Curvas do fator F dos casos com condição Re 100 e 1 MPa	144
Figura 4.33 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa.....	144
Figura 4.34 – Curvas do fator F dos casos com condição Re 300 e 1 MPa	144
Figura 4.35 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa.....	144
Figura 4.36 – Linhas de corrente do escoamento para os casos com espaçadores do tipo com e sem arredondamento nos vértices	145
Figura 4.37 – Espaçadores SCI e RCI	146
Figura 4.38 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador SCI e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa.....	147

Figura 4.39 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador RCI e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa.....	147
Figura 4.40 – Comparação das linhas de correntes e distribuição da fração mássica das regiões demarcadas para o caso com espaçador SCI a Re 200 e pressão 1 MPa	148
Figura 4.41 – Curvas do fator Γ para caso SCI com condição Re 200 e 1 MPa referente as regiões com distância da seção de entrada de 0,024 mm e 0,040 mm	149
Figura 4.42 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 200 e 1 MPa	149
Figura 4.43 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa.....	150
Figura 4.44 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 100 e 1 MPa	151
Figura 4.45 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa.....	151
Figura 4.46– Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 300 e 1 MPa	151
Figura 4.47– Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa.....	151
Figura 4.48 – Espaçadores utilizados nas simulações com arranjo zigue-zague.....	154
Figura 4.49 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador SZN e com arranjo zigue-zague a Re 200 e pressão 1 MPa.....	155
Figura 4.50 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador RZN e com arranjo zigue-zague a Re 200 e pressão 1 MPa.....	155
Figura 4.51 – Linhas de correntes para os casos com espaçadores SZN e RZN a condição Re 200 e 1 MPa.....	156
Figura 4.52 – Curvas do fator de polarização de concentração dos casos com condições aplicadas de Re 200 e 1 MPa	157
Figura 4.53 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa.....	158
Figura 4.54 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 100 e 1 MPa	158
Figura 4.55 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa.....	158
Figura 4.56 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 300 e 1 MPa	159
Figura 4.57 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa.....	159
Figura 4.58 – Evolução perda de pressão média em função de Re de entrada para casos com espaçadores quadráticos a 1 MPa.....	161
Figura 4.59 – Curvas do fator Γ médio para diversos Re dos casos com espaçadores quadráticos inclinados	162
Figura 4.60 – Curvas do fator Γ médio para diversos Re dos casos com arranjo submerso e zigue-zague.....	162
Figura 4.61 – Curvas da espessura média para os casos quadráticos.....	163
Figura 4.62 – Curvas do fluxo permeado médio para diversos Re dos casos com espaçadores quadráticos inclinados	163

Figura 4.63 – Curvas do fluxo permeado médio para diversos Re dos casos com arranjo submerso e zigue-zague	163
Figura 4.64 – Valores das médias de SPMP para os casos com espaçadores estudados.....	164
Figura 4.65 – Espaçadores triangulares	164
Figura 4.66 – Campo de velocidade e fração mássica do soluto para domínio com espaçador SCN e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa	165
Figura 4.67 – Campo de velocidade e fração mássica do soluto para domínio com espaçador RCN e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa.....	165
Figura 4.68 – Campo de velocidade e fração mássica do NaCl para domínio com espaçador SCI e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa.....	166
Figura 4.69 – Campo de velocidade e fração mássica do NaCl para domínio com espaçador RCI e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa.....	167
Figura 4.70 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 100 e 1 MPa	168
Figura 4.71 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa.....	168
Figura 4.72 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 200 e 1 MPa	168
Figura 4.73 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa.....	168
Figura 4.74 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 300 e 1 MPa	168
Figura 4.75 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa.....	168
Figura 4.76 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa.....	170
Figura 4.77 – Campo de velocidade e fração mássica do NaCl para domínio com espaçador SZN e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa	171
Figura 4.78 – Campo de velocidade e fração mássica NaCl para domínio com espaçador RZN e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa.....	171
Figura 4.79 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 100 e 1 MPa	172
Figura 4.80 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa.....	172
Figura 4.81 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 200 e 1 MPa	172
Figura 4.82 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa.....	172
Figura 4.83 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 300 e 1 MPa	173
Figura 4.84 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa.....	173
Figura 4.85 – Evolução perda de pressão média em função de Re de entrada para casos com espaçadores triangulares a 1 MPa	175
Figura 4.86 – Curvas do fator Γ médio para diversos Re dos casos com espaçadores triangulares inclinados em submerso	176
Figura 4.87 – Curvas do fator Γ médio para diversos Re dos casos com promotores triangulares em submerso e em zigue-zague.....	176

Figura 4.88 – Curvas do fator Γ médio para diversos Re dos casos com espaçadores triangulares inclinados em submerso	176
Figura 4.89 – Curvas do fator Γ médio para diversos Re dos casos com promotores triangulares em submerso e em zigue-zague.....	176
Figura 4.90 – Curvas da espessura média para os casos triangulares	177
Figura 4.91 – Valores das médias de SPMP para os casos com espaçadores triangulares	177
Figura 4.92 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador circular com $d = 0,8$ mm e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa	178
Figura 4.93 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador circular com $d = 1$ mm e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa.....	178
Figura 4.94 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador circular com $d = 1,2$ mm e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa	179
Figura 4.95 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 200 e 1 MPa	179
Figura 4.96 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa.....	179
Figura 4.97 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 100 e 1 MPa	180
Figura 4.98 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa.....	180
Figura 4.99 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 300 e 1 MPa	181
Figura 4.100 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa.....	181
Figura 4.101 – Linhas de corrente para os casos com espaçadores circulares a condição de Re 300 e diâmetro de 1 e 1,2 mm	181
Figura 4.102 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador circular com $d = 0,8$ mm e com arranjo zigue-zague a Re 200 e pressão 1 MPa.....	183
Figura 4.103 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador circular com $d = 1,0$ mm e com arranjo zigue-zague a Re 200 e pressão 1 MPa.....	183
Figura 4.104 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador circular com $d = 1,2$ mm e com arranjo zigue-zague a Re 200 e pressão 1 MPa.....	184
Figura 4.105 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 100 e 1 MPa	185
Figura 4.106 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa.....	185
Figura 4.107 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 200 e 1 MPa	185
Figura 4.108 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa.....	185
Figura 4.109 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 300 e 1 MPa	186
Figura 4.110 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa.....	186
Figura 4.111 – Curvas da $\Delta P/L$ em função de diferentes número de Reynolds para geometrias com espaçadores circulares	187
Figura 4.112 – Curvas do fator Γ médio em função de Re dos casos em submerso	188

Figura 4.113 – Curvas do fator Γ médio em função de Re dos casos em zigue-zague	188
Figura 4.114 – Curvas da espessura média para os casos com espaçadores circulares.....	189
Figura 4.115 – Curvas do fluxo permeado médio em função de Re dos casos com padrão submerso.....	189
Figura 4.116 – Curvas do fluxo permeado médio em função de Re dos casos com padrão zigue-zague.....	189
Figura 4.117 – Valores das médias de SPMP para os casos com espaçadores circulares.....	190
Figura 4.118 – Valores médios do fator Γ , fluxo permeado e perda de pressão para os espaçadores e arranjos estudados	191
Figura 4.119 – Valores médios de SPMP _{mod} e SPMP para os promotores estudados.....	192
Figura 4.120 – Curvas do fator Γ para os promotores estudados e dispostos zigue-zague	193
Figura 4.121 – Curvas do fluxo permeado para os promotores em zigue-zague estudados..	193
Figura 4.122 – Curvas do fator Γ para os promotores estudados em submerso.....	194
Figura 4.123 – Curvas do fluxo permeado para os promotores estudados em submerso.....	194
Figura 4.124 – Campo de pressão absoluta, velocidade e fração mássica para domínio tridimensional sem espaçador a Re 100 e pressão 1 MPa.....	196
Figura 4.125 – Curvas da evolução do fator Γ e do fluxo permeado dos casos 3D na condição de entrada Re 100 e pressão na seção do concentrado de 1 MPa.....	197
Figura 4.126 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa.....	198
Figura 4.127 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa.....	198
Figura 4.128 – Curvas do fator Γ para as duas geometrias 3D estudados sob 1 MPa.....	199
Figura 4.129 – Curva da diferença do fator Γ para as duas geometrias 3D sob 1 MPa	199
Figura 4.130 – Curvas do fator Γ para as duas geometrias 3D estudados sob 2 MPa.....	200
Figura 4.131 – Curva da diferença do fator Γ para as duas geometrias 3D sob 2 MPa	200
Figura 4.132 – Distribuição da fração mássica na superfície da membrana para os casos estudados sob pressão no concentrado de 1 MPa e 2 MPa	201

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Faixa característica de pressão, fluxo e tamanho de poros dos principais processos de filtração por membrana.....	32
Tabela 2.2 – Correlações para determinação do coeficiente de transferência de massa para diferentes geometrias.....	80
Tabela 3.1 – Parâmetros usados nas simulações	114
Tabela 3.2 – Geometria e valores de parâmetros estudados.....	116
Tabela 4.1 – Comparação dos maiores erros relativos de cada modelo e cada pressão analisada em função das curvas obtidas por De Pinho, Semião e Geraldes (2002).....	122
Tabela 4.2 – Resultados de fluxo e fração mássica obtidos nas simulações realizadas em comparação com os dados experimentais De Pinho; Semião; Geraldes, (2002)	123
Tabela 4.3 – Valores médios do fator Γ e do fluxo permeado e perda de pressão para geometrias estudadas sob uma pressão aplicada de 2 MPa	153
Tabela 4.4 – Valores SPMP para os casos com arranjos submersos.....	153
Tabela 4.5 – Valores médios do fator Γ e do fluxo permeado e perda de pressão para geometrias estudadas sob uma pressão aplicada de 2 MPa	159
Tabela 4.6 – Valores SPMP para os casos com arranjos zigue-zague	160
Tabela 4.7 – Valores médios do fator Γ e do fluxo permeado e perda de pressão para geometrias estudadas sob uma pressão aplicada de 2 MPa	169
Tabela 4.8 – Valores SPMP para os casos com arranjos submersos.....	170
Tabela 4.9 – Valores médios do fator Γ e da fluxo permeado e perda de pressão para geometrias estudadas sob uma pressão aplicada de 2 MPa	174
Tabela 4.10 – Valores SPMP para os casos com arranjos zigue-zague	174
Tabela 4.11 – Valores médios do fator Γ e do fluxo permeado e perda de pressão para geometrias estudadas sob uma pressão aplicada de 2 MPa.....	182
Tabela 4.12 – Valores SPMP para os casos com arranjos submersos.....	182
Tabela 4.13 – Valores médios do fator Γ e da fluxo permeado e perda de pressão para geometrias estudadas sob uma pressão aplicada de 2 MPa	186
Tabela 4.14 – Valores SPMP para os casos com arranjos submersos.....	187

LISTA DE QUADROS

Quadro 2.1 – Trabalhos que estudaram promotores.....	63
Quadro 3.1 – Resumo das equações para determinação do coeficiente de reflexão	107
Quadro 3.2 – Parâmetros de processo a ser analisado em cada caso estudado	115
Quadro 5.1 – Simulações realizadas e suas condições de operações	244

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

- CA** - *Acetato de Celulose*
- CFD** - *Dinâmica de Fluidos Computacional*
- CFM** - *Condições de fronteiras e membrana*
- CP** - *Polarização por concentração*
- DHI** - *Interferometria holográfica digital*
- ESD** - *Solução-difusão estendido*
- FP** - *Modelo Finamente-Poroso*
- FUNASA** - *Fundação Nacional de Saúde*
- FVM** - *Métodos de volumes finitos*
- K-K** - *Equações Kedem – Katchalsky*
- LBM** - *Lattice Boltzmann Method*
- LPFI** - *Laboratório de Pesquisa em Fluidodinâmica e Imagem*
- MF** - *Microfiltração*
- MSF-PF** - *Fluxo de Poros de Força Superficial modificado*
- MWCO** - *Ponto de corte molar*
- NF** - *Nanofiltração*
- PA** - *Poliamida Cromáticas*
- PDE** - *Derivadas parciais*
- PSD** - *Distribuição dos tamanhos dos poros*
- PSM** - *Processos de separação por membranas*
- RCI** - *Geometria 2D com espaçadores em submerso, inclinados e com arredondamentos*
- RCN** - *Geometria 2D com espaçadores em submerso, não inclinados e com arredondamentos*
- RO** - *Osmose reversa*
- RZN** - *Geometria 2D com promotores em zigue-zague, não inclinados e com arredondamentos*
- SCE** - *Spacer Configuration Efficacy*
- SCI** - *Geometria 2D com espaçadores em submerso, inclinados e sem arredondamentos*
- SCN** - *Geometria 2D com espaçadores em submerso, não inclinados e sem arredondamentos*
- SD** - *Solução-difusão*
- SDI** - *Solução-difusão-imperfeição*
- SFPF** - *Modelo de Fluxo de Poros de Força Superficial*
- SPE** - *Substância polimérica extracelular*

SPMP - *Razão de Performance do Espaçador*

SPMP_{mod} - *Razão de Performance do Espaçador modificado*

SUPG - *Modelo Petrov/Galerkin*

SW - *Spiral wound*

SWRO - *Seawater Reverse Osmosis*

SZN - *Geometria 2D com espaçadores em zigue-zague, não inclinados e sem arredondamentos*

TFC - *Camada fina de poliamida*

TMP - *Pressão transmembrana*

UDF - *Rotina computacional criado pelo usuário (User Defined Function)*

UF - *Ultrafiltração*

UFERSA - *Universidade Federal Rural do Semi-árido*

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	22
1.1 Contextualização	22
1.2 Objetivos do trabalho	25
1.2.1 Objetivo geral	25
1.2.2 Objetivos específicos	26
1.3 Organização do trabalho	26
CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	28
2.1 Considerações iniciais	28
2.2 Dessalinização	29
2.3 Processos de Separação por Membranas (PSM)	30
2.4 Processo de Osmose Reversa (RO)	33
2.5 Módulos de permeação	37
2.6 Fatores limitantes do processo por osmose reversa.....	42
2.7 Polarização de concentração.....	43
2.8 Incrustação (<i>fouling</i>).....	46
2.9 Técnicas para redução da camada polarizada e incrustação	48
2.10 Estudos computacionais usando promotores	52
2.11 Equações de transportes governantes do PSM	64
2.12 Teoria do transporte em membranas	67
2.12.1 Modelos termodinâmicos irreversíveis.....	68
2.12.2 Modelos de membrana não porosa ou homogênea.....	71
2.12.3 Modelos de poros	74
2.13 Teoria do filme: Modelo para Polarização de concentração	78
2.14 Determinação do coeficiente de reflexão	82
2.15 Considerações Finais	88
CAPÍTULO 3 - METODOLOGIA NUMÉRICA.....	90
3.1 Considerações iniciais	90
3.2 Formulação do problema físico	92
3.3 Estudos propostos	94
3.4 Geometria dos domínios.....	95

3.4.1 Geometria do domínio bidimensional	95
3.4.2 Geometria do domínio tridimensional.....	97
3.5 Metodologia de geração das malhas numéricas	99
3.6 Modelagem matemática.....	102
3.6.1 Modelagem das condições de contornos	104
3.6.2 Modelagem das propriedades físicas da solução.....	109
3.7 Estrutura e método de simulação.....	109
3.7.1 <i>User Defined Function</i> (UDFs).....	110
3.7.2 Estrutura do solver com as UDFs	112
3.7.3 Solução numérica	113
3.8 Propriedades físicas e parâmetros utilizadas nas simulações	114
3.9 Parâmetros avaliados	114
3.10 Considerações finais.....	116
CAPÍTULO 4 - RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	118
4.1 Geometria bidimensional sem espaçador	118
4.1.1 Escolha do critério de convergência e modelo de rejeição.....	119
4.1.2 Validação do modelo proposto	123
4.1.3 Análise da hidrodinâmica e da fração mássica do soluto	126
4.2 Geometria bidimensional com espaçadores	134
4.2.1 Espaçador do tipo quadrado e com arranjo submerso	134
4.2.2 Espaçador do tipo quadrado e com arranjo zigue-zague	154
4.2.3 Análise das variáveis médias para casos com espaçadores quadráticos.....	160
4.2.4 Espaçador tipo triangular e arranjo submerso	164
4.2.5 Espaçador do tipo triângulo e com arranjo zigue-zague.....	170
4.2.6 Análise das variáveis médias para casos com espaçadores triangulares	174
4.2.7 Espaçador do tipo círculo e com arranjo submerso.....	177
4.2.8 Espaçador do tipo círculo e com arranjo zigue-zague.....	183
4.2.9 Análise das variáveis médias para casos com espaçadores circulares.....	187
4.2.10 Comparação entre os tipos de espaçadores.....	191
4.3 Geometria Tridimensional.....	195
4.3.1 Geometria tridimensional sem espaçador.....	195
4.3.2 Geometria tridimensional com espaçador	197
CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS.....	203

5.1 Considerações finais.....	203
5.2 Trabalhos futuros.....	206
REFERÊNCIAS	208
APÊNDICE A - I	222
APÊNDICE A - II.....	225
APÊNDICE A - III	234
APÊNDICE A - IV.....	240
APÊNDICE A - V	241
APÊNDICE B - I.....	244

Capítulo 1

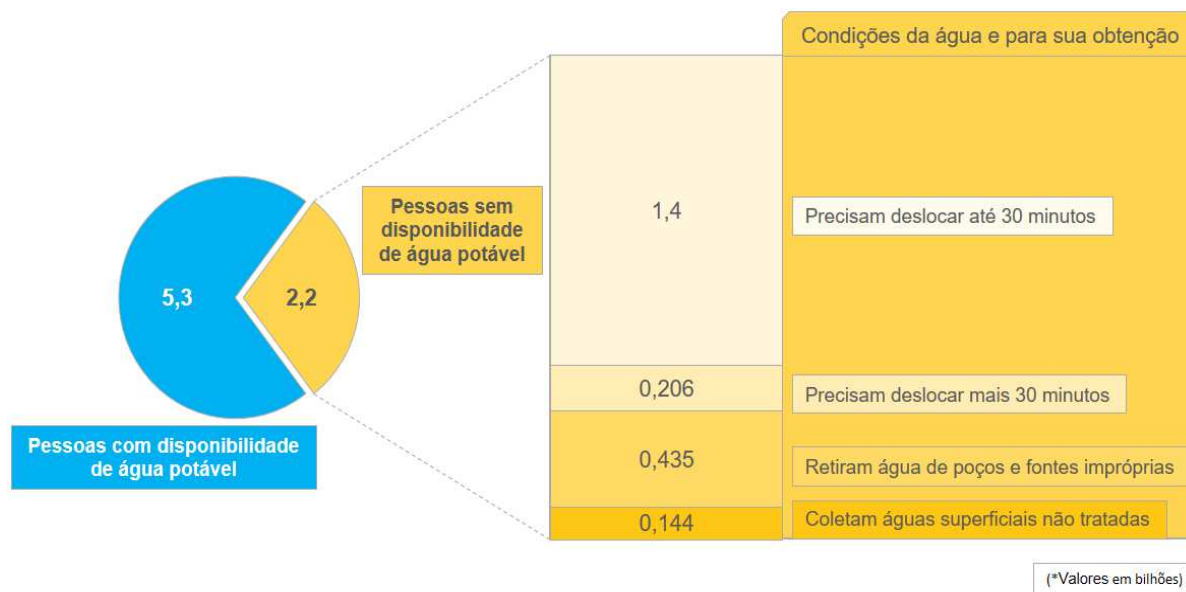
INTRODUÇÃO

Este capítulo introdutório inicia contextualizando a situação da sociedade mundial perante a escassez de recursos hídricos e apresenta possíveis soluções para resolver esse problema. Um deles apresentado é o uso da técnica de dessalinização de águas salobras via Osmose reversa, que é o tema principal deste trabalho. Assim, este capítulo está estruturado da seguinte forma: contextualização, em que o objetivo é nortear o leitor sobre o tema a ser estudado, buscando apresentar a motivação e a justificativa para a realização desse estudo; exposição de um breve resumo da metodologia a ser empregada e do que se planeja alcançar no fim deste estudo; apresentação do objetivo geral e específicos do trabalho e, por fim, é mostrado como está estruturada e organizada a parte escrita desta tese.

1.1 Contextualização

Nas últimas décadas, vem se intensificando cada vez mais a preocupação com a escassez hídrica, causada pela mudança climática drástica do planeta, principalmente nas regiões próximas à linha do Equador e em países com alta densidade populacional. Segundo o relatório da Organização Mundial de Saúde (WHO; UNICEF, 2019), em 2017, aproximadamente 2,2 bilhões de pessoas, equivalente à 29,3% da população mundial, não tem disponibilidade de água potável de qualidade nos lugares onde vivem. Dessa forma, tais pessoas ficam sujeitos a utilizar fontes de água não tratada ou que precisam realizar longos percursos de trinta ou mais minutos para chegar em fontes de água potável. A Figura 1.1 apresenta, de forma mais detalhada, os dados sobre os serviços de água utilizados para consumo disponíveis para população mundial em suas regiões, apresentando, também, a quantidade de pessoas (em bilhões) submetidas às situações mencionadas.

Figura 1.1 – Distribuição da população mundial em função dos serviços de água potável disponível



Fonte: Própria do autor com base em Who/UNICEF (2019).

No Brasil, uma das principais regiões que sofre com a escassez hídrica é a que corresponde ao semiárido brasileiro. Isso é devido à baixa precipitação pluvial, irregularidade das chuvas da região e por apresentar uma estrutura geológica que não possibilita reter, satisfatoriamente, água no subsolo, comprometendo o regime dos corpos hídricos (MOREIRA, 2016).

Apesar dessas complicações climáticas, estudos apontam que nessa região existe um volume de água retida de aproximadamente 300.000 m³ em poços e açudes inativos, que potencialmente poderiam abastecer mais de 12 milhões de habitantes no semiárido, região muito castigada pela seca (MOURA et al., 2008). No entanto, de acordo com Suassuna (1999), o tipo do solo contido no semiárido proporciona para água um elevado teor de salinidade, o que, na maioria das vezes, a torna imprópria ao consumo humano.

Para minimizar o problema referente a salinidade, que ocorre não apenas no semiárido brasileiro, mas em vários lugares do mundo, foram surgindo diversas pesquisas em desenvolvimento de técnicas e/ou tecnologias com o objetivo principal de tornar a água salobra em água potável. Assim, despontaram variados processos para a produção de água potável, tais como osmose reversa, eletrodialise, destilação *flash* multi-estágio, destilação multiefeito e destilação solar.

Atualmente, um dos processos de dessalinização mais utilizados no mundo tem sido o processo de osmose reversa (RO), no qual consiste em um processo físico-químico e mecânico

capaz de separar um solvente, a água (no caso da dessalinização), de um soluto que tem sua massa molecular baixa, como por exemplo, os sais. Isto é possível devido à presença de uma membrana seletora semipermeável, que permite a passagem do fluxo de água (fluxo permeado), e a uma pressão aplicada superior à pressão osmótica, possibilitando alterar o sentido do fluxo normal do solvente na membrana.

Um dos grandes problemas encontrados nesse processo está associado à vida útil dessas membranas, pois, por motivo de sua presença, surge a formação de uma camada com elevado teor de concentração do soluto (sais, colóides, moléculas orgânicas, microrganismos etc.) sobre a superfície desta membrana. Inicialmente, essa camada é denotada de camada polarizada ou polarização de concentração (CP), que por conta da maior presença desses componentes secundários, permite a formação de incrustações. Isso possui, como consequência, um acréscimo de uma resistência ao fluxo permeado, diminuindo, então, a produção da água potável. Seidel e Elimelech (2002) relatam que o surgimento de incrustações é, praticamente, inevitável; todavia, é possível minimizar com pré-tratamentos adequados, bom dimensionamento da planta e uma melhor seleção das condições de operação do sistema.

Em virtude das limitações inerentes ao processo, abriu-se um amplo campo para o desenvolvimento de novas pesquisas para otimizar os parâmetros do processo, aumentar a eficiência do sistema e obter um melhor entendimento dos fenômenos existentes durante o processo. Esses estudos focam, sobretudo, no que diz respeito aos novos materiais e arranjos físicos que compõem a membrana, no controle da distribuição no tamanho de poros na superfície da membrana, no desenvolvimento de novos módulos de permeação com diferentes disposições físicas, na melhoria das técnicas de limpeza e na operação do sistema de separação por membranas (COSTA, 2009; DAVIS, 2006; STRATHMANN, 2001).

Uma das técnicas estudadas nessas pesquisas é a aplicação de espaçadores como promotores de turbulência, que permite a formação de um escoamento turbulento local e de vórtices, podendo auxiliar na redução da camada limite polarizada e, conseqüentemente, diminuindo problemas de incrustações e aumentando o fluxo permeado. Tal efeito é visto nos trabalhos de Koutsou, Yiantsios e Karabelas (2004), Shakaib et al. (2012) e Li et al. (2019).

Nas últimas décadas, as referidas pesquisas e as novas tecnologias de dessalinização por osmose reversa vêm conseguindo um grande avanço devido ao suporte dado pela área de computação e sua evolução. Com o uso dos métodos computacionais, destaca-se as ferramentas de Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD, *Computational Fluid Dynamics*), que aliadas a modelos de previsão de fluxo permeado e polarização, são capazes de simular o comportamento hidrodinâmico de um sistema de separação com membranas, bem como os fenômenos

envolvidos no processo (turbulência, transferência de massa, queda de pressão através do módulo, etc.), isso de forma ágil e de baixo custo quando comparada análises experimentais.

Face a isso, inúmeros modelos mecanicistas e fenomenológicos foram desenvolvidos no último século, com esse intuito de prever o comportamento dos escoamentos e dos fenômenos existentes durante o processo de separação por membranas. Infelizmente, apesar da considerável quantidade de trabalhos sobre o assunto, o entendimento científico do mecanismo pelo qual as membranas de osmose reversa separam o soluto do solvente ainda está incompleto e até então não há um consenso científico de como é realizado o transporte da solução no interior da membrana. Na literatura publicada, isso se reflete no desenvolvimento de vários modelos de transporte por membrana, baseados em diferentes mecanismos possíveis, que não revelam grande compatibilidade entre eles (BOUDMAR, 1991) e, atualmente, isso ainda é perceptível nos trabalhos publicados, pois não há uma padronização dos modelos utilizados nas simulações.

Baseando-se nessa realidade, o propósito deste trabalho é avaliar o comportamento hidrodinâmico e da camada polarizada de uma membrana, comumente utilizada em um processo de dessalinização por osmose reversa, empregando uma modelagem numérica via volumes finitos com uso de variáveis locais do processo para alimentar os modelos utilizados no cálculo do fluxo do permeado e da fração mássica. Neste trabalho foi utilizado o *software* ANSYS FLUENT v. 15.0.7 em conjunto com rotinas computacionais criadas pelo usuário (UDF) para configuração dos modelos e obtenção das soluções. As simulações foram realizadas, inicialmente, num modelo bidimensional e, posteriormente, adotou-se um modelo tridimensional, ambos os domínios possuem dois canais (alimentação e permeado) e com presença de espaçadores em determinados casos, em que se assemelha a forma encontrada na maioria das membranas comerciais. Essas configurações permitiram analisar o efeito geométrico dos promotores, a influência do raio de curvatura e a turbulência provida ao fluxo e a camada polarizada, buscando um melhor entendimento dos fenômenos reais para, assim, otimizar a produção da água produzida.

1.2 Objetivos do trabalho

1.2.1 Objetivo geral

Avaliar a influência da geometria dos espaçadores como promotor de turbulência e do

raio de curvatura da membrana com esses promotores, sobre o processo de dessalinização de águas salobras via osmose reversa.

1.2.2 Objetivos específicos

- Definir um modelo matemático capaz de prever o processo de dessalinização via osmose reversa, empregando as equações de conservação de massa, momento linear e transporte de espécie;
- Incluir modelos matemáticos via UDFs não disponibilizado no *software* ANSYS FLUENT v. 15.0.7 para determinar o fluxo do permeado, a fração mássica do soluto que passa na membrana e as propriedades físicas da solução aquosa, utilizando parâmetros calculados localmente, que permitirá uma maior sensibilidade aos fenômenos locais quando comparado as simulações que utilizam valores médios para esses parâmetros;
- Avaliar os efeitos das diferentes formas geométricas dos promotores de turbulência para os arranjos em submerso e zigue-zague no processo de dessalinização em geometrias bidimensionais, quantificando a sua eficiência por meio dos parâmetros SPMP e pela perda de pressão por unidade de comprimento;
- Analisar o efeito geométrico da espiral do módulo sobre o processo de dessalinização via osmose reversa em geometrias tridimensionais;
- Analisar a influência dos parâmetros operacionais (número de Reynolds na entrada e pressão aplicada no canal de alimentação) sobre o processo de dessalinização;
- Comparar resultados obtidos com os dados analíticos e/ou experimentais reportados na literatura.

1.3 Organização do trabalho

Para melhor entendimento do conteúdo, este trabalho foi disposto em cinco capítulos, sendo que o primeiro expõe a parte introdutória do trabalho, apresentando a contextualização sobre o assunto estudado, os objetivos gerais e específicos do trabalho e, por fim a estrutura organizacional do seu conteúdo.

O segundo capítulo consiste em uma revisão bibliográfica a respeito do assunto de dessalinização de águas, dando ênfase à técnica de osmose reversa em módulo espiral, polarização por concentração, incrustações e técnicas para redução da camada de polarização por concentração. Além disso, é apresentada uma modelagem matemática capaz de prever os comportamentos dos fenômenos existentes no processo de dessalinização, assim como, são expostos os principais trabalhos publicados no meio científico referente a esse assunto.

Por sua vez, o terceiro capítulo aborda a metodologia utilizada no trabalho, apresentando os domínios utilizados para o estudo, hipóteses, condições de contornos, parâmetros de entradas e o equacionamento empregado.

Já o quarto capítulo apresenta os resultados obtidos e as discussões, o qual está disposto em quatro partes distintas: validação do modelo matemático utilizado e comparação dos resultados obtidos com dados experimentais; simulação com geometria 2D avaliando os efeitos dos parâmetros do processo e computacional; simulações com diversos tipos de espaçadores no âmbito da geometria bidimensional e, por fim, exposição dos resultados obtidos nas simulações com e sem espaçadores com geometria tridimensional e simulando uma célula unitária de um módulo em espiral.

Por último, o quinto capítulo expõe as conclusões e as sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O Capítulo 2 fornece uma revisão abrangente sobre a literatura referente à dessalinização de águas, explorando assuntos relevantes como a técnica de osmose reversa, módulos de permeação, polarização por concentração, métodos de redução da camada de polarização por concentração, equacionamento e dinâmica das membranas voltadas à mecânica dos fluidos e transferência de massa, parâmetros influentes no desempenho do processo e outros conteúdos que possam auxiliar uma melhor compreensão do comportamento dos fenômenos presentes durante o processo de separação por membrana para o dessalinização de águas.

2.1 Considerações iniciais

Nas últimas décadas, a comunidade científica tem concentrado esforços para tentar solucionar um dos grandes problemas existentes no planeta terrestre, que é a escassez hídrica. Dessa maneira, vem surgindo estudos e novas tecnologias que buscam aumentar nossos recursos hídricos.

Uma das formas encontradas para reduzir a escassez hídrica foi desenvolver processos de dessalinização para remoção dos sais dissolvidos, de modo a tornar a água salobra ou salina em água doce, sendo necessário, no Brasil, atingir valores abaixo do limite de salinidade estipulado pela portaria nº 2914/2011 do Ministério da Saúde e pela portaria de consolidação nº 05/2017, que é de 1.000 mg/L.

Dentre os estudos de dessalinização, foram despontando diversos processos de natureza térmica ou de filtração por meio de membranas. Nessa última categoria destaca-se a técnica de osmose reversa por ser uma das mais usadas nas plantas industriais de dessalinização de águas, pois possuem parâmetros operacionais e intrínsecos que prevalecem às outras técnicas criadas, como por exemplo, alta capacidade de produção com baixo nível de consumo de energia.

A partir disso, este capítulo buscou explorar a literatura que envolve a dessalinização das águas, com ênfase no processo de separação por membranas via osmose reversa,

apresentando os fenômenos intrínsecos do processo, formação da camada de polarização por concentração, técnicas para minimizar fatores limitantes referentes ao processo e as equações capazes de prever os fenômenos presentes na dessalinização das águas e que estão disponíveis na literatura, assim como a breve citação dos principais artigos e seus resultados mais relevantes da literatura referente a essa área de estudo.

2.2 Dessalinização

Segundo Bahar e Hawlader (2013), a dessalinização vem ocorrendo na Terra desde a formação dos mares de forma natural. A água evapora do mar e em seguida condensa-se em água de chuva pura. A dessalinização praticada pelo homem foi datada por volta ao século IV a.C. e ocorria através do processo de destilação, quando marinheiros gregos aplicavam a técnica de evaporação para dessalinizar a água do mar.

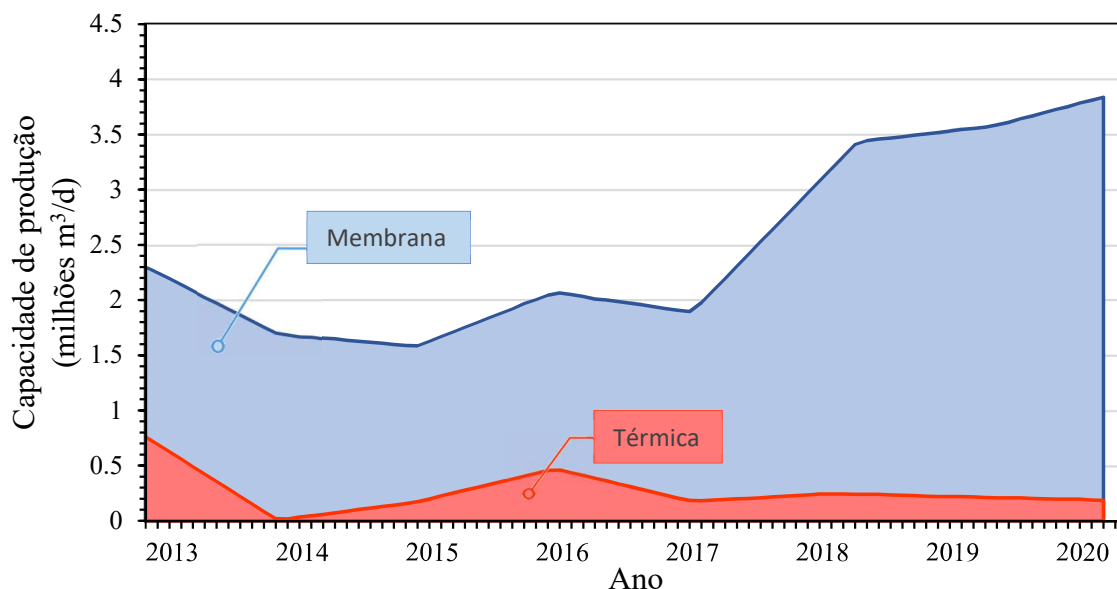
Com o passar do tempo e buscando com frequência solucionar o problema da escassez hídrica, a humanidade desenvolveu vários processos diferentes para realizar a dessalinização da água do mar. Atualmente, o processo de dessalinização pode ser dividido, basicamente, em dois métodos: processo térmicos de separação e separação por membranas (EL-DESSOUKY; ETTOUNEY, 2002; SOUSA, 2013; SILVA, 2016)

Fundamentalmente, os processos térmicos de separação se referem a uma técnica que inclui dois fenômenos principais: evaporação da água seguida de condensação do vapor para formação de água fresca. Enquanto o segundo método de dessalinização utiliza membranas no processo de seleção com base nos diâmetros das partículas que queira rejeitar. Nessa perspectiva, Wang et al. (2011) afirmaram que esse processo de separação utiliza uma membrana, que é um meio de filtração poroso, podendo ter natureza catiônica, aniônica ou não-iônica e atua como uma barreira para bloquear o movimento de massa de fases seletivas, mas propicia a passagem das outras fases restantes. Essas fases selecionadas podem ser sólidas (como sólidos suspensos, sólidos orgânicos, sólidos inorgânicos, etc.), líquidas (como água, etanol, clorofórmio, etc.) e gasosas (como ar, nitrogênio, oxigênio, etc.).

Dentre as variadas técnicas atuais de dessalinização a que mais vem se destacando industrialmente é o processo de separação por membrana, pois possui uma superioridade na capacidade de água produzida, como é possível analisar na Figura 2.1. Este gráfico expõe dados comparativos, coletados na plataforma GWI/DesalData, da capacidade produtivas dos anos

2013 a 2020 para os processos de separação térmica e por membranas (ALMAR WATER SOLUTIONS, 2016).

Figura 2.1 – Capacidade contratada anual por tipo de tecnologia, 2013–2020¹



Fonte: Adaptado de Almar Water Solutions (2016).

2.3 Processos de Separação por Membranas (PSM)

Os processos de separação por membranas, nos últimos 20 anos, veem buscando desempenhar um importante papel nos processos de separação a nível industrial. Pak et al. (2008) afirmam que esses processos possuem uma tecnologia primária com garantia da pureza, segurança e eficácia dos tratamentos de água ou efluentes, sendo que a dessalinização é uma das principais aplicações do processo de separação de membranas em todo o mundo.

Os processos de membrana têm demonstrado um rápido crescimento, tornando um grande concorrente da dessalinização térmica nos anos posteriores, por a ter requisitos de alta eficiência energética, fácil manutenção, menor ocupação de área, rápida iniciação e boa relação custo-eficácia, apresentando uma influência na redução nos custos globais de dessalinização na

¹ No gráfico apresentado, os resultados relativos ao período entre 2017 e 2020 são dados de tendência futura da capacidade da produção de água contratada que o autor estimou baseado nos dados obtidos na plataforma GWI/ DesalData.

última década (BAHAR; HAWLADER, 2013; CAY-DURGUN; LIND, 2018; WERBER; DESHMUKH; ELIMELECH, 2016). No entanto, há algumas limitações durante a operação do PSM e essas estão vinculados à polarização de concentração e à formação de incrustações, que levam à redução de fluxo permeado, aumento de pressão de operação, seletividade inadequada, menor duração da membrana e aumento dos custos operacionais. Uma outra limitação do processo é a produção de rejeitos altamente salino que, na maioria das vezes, são despejados no solo ou em cursos d'água, possuindo uma alta risco de impacto ambiental.

O PSM consiste na separação de um soluto em um meio (solvente), mediante a presença da membrana semipermeável, que pode ser: sintética ou natural; homogênea ou heterogênea; simétrica ou assimétrica na sua estrutura; sólida ou líquida; neutra, com cargas positivas ou negativas, ou bipolar. Na membrana, o transporte de massa é possível por meio do fenômeno de convecção e/ou difusão de moléculas individuais devido a uma força motriz, que pode ser de diversas naturezas, como um campo elétrico, um gradiente de concentração, pressão ou temperatura (WANG et al., 2011).

A seletividade dessas membranas é caracterizada a partir da sua habilidade de permear, sendo possível por meio de alguns mecanismos, tais como: a) rejeição por tamanho de partículas em função ao tamanho dos poros da membrana; b) seleção por diferença na difusividade ou de permeabilidade de um componente em relação a outros solutos de uma mistura, originando o escoamento distinto entre componentes na membrana; c) seleção por densidades de carga elétrica de partículas, íons ou moléculas. d) seleção ocasionada pelo fenômeno de adsorção devido à alta área superficial e existência de um potencial superficial da membrana em função do meio em que está sendo usada (ARMOA; JUNIOR, 2011).

Nos processos de separação por membranas existentes na indústria, destacam-se as técnicas que possui a variável pressão como força motriz, no qual é possível citar: microfiltração (MF), ultrafiltração (UF), nanofiltração (NF) e osmose reversa (RO). Esses processos são distinguidos por meio da intensidade da pressão hidráulica aplicada como força motriz do transporte de massa, pelo fluxo de solução produzida por área de membrana e pela diferença entre os tamanhos dos poros de suas membranas, vide a Tabela 2.1. Todavia, a natureza da membrana é a responsável pelo controle dos componentes que irão permear e quais serão retidos, já que eles são seletivamente separados de acordo com suas massas molares, tamanho de partícula, afinidade e interação com a membrana (DE MORAIS COUTINHO et al., 2009).

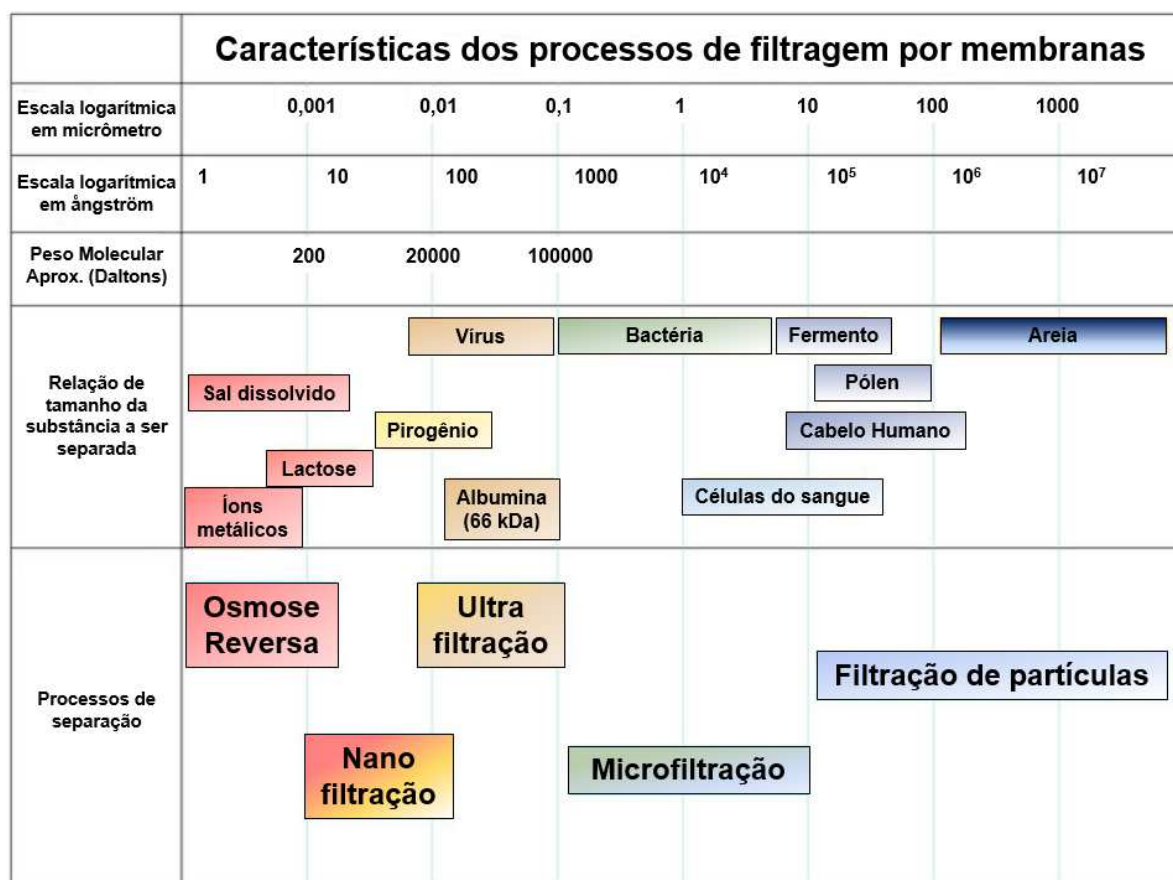
Tabela 2.1 – Faixa característica de pressão, fluxo e tamanho de poros dos principais processos de filtração por membrana

PSM	Faixa de Pressão (Bar)	Faixa de Fluxo $\left(\frac{l}{m^2 \cdot h \cdot bar}\right)$	Tamanho dos poros (nm)
Microfiltração	0,1 – 2,0	> 50	50 – 10 ⁴
Ultrafiltração	1,0 – 10	10 – 50	1 – 100
Nanofiltração	10 – 25	1,4 – 12	< 2
Osmose Reversa	15 – 120	0,05 – 1,4	< 0,5

Fonte: Adaptado de Bernales et al. (2013)

A Figura 2.2 apresenta o espectro da separação por membranas, expondo algumas características intrínsecas dos processos, como relação de corte dos fluxos baseado no peso molecular dos solutos e tamanho dos poros e das partículas.

Figura 2.2 – Características dos processos de separação por membranas



Fonte: Adaptado de Macedonio et al. (2012).

Dentre esses diversos tipos de processos, destaca-se a osmose reversa, sendo considerado o processo de dessalinização por membrana mais empregado no âmbito mundial (53% do total, aproximadamente), por conta de sua habilidade de rejeitar praticamente todo o material coloidal ou dissolvido presente na água (Figura 2.2), produzindo, no fim, uma salmoura concentrada e um permeado de uma água com baixo teor de salinidade (SOUSA, 2013). El-dessouky e Ettouney (2002) também afirmam que o principal processo de dessalinização da membrana é a osmose reversa (RO), onde a água doce permeia sob alta pressão através de membranas semipermeáveis, deixando para trás uma solução de salmoura altamente concentrada. Essas membranas de osmose reversa são capazes de rejeitar moléculas sólidas e sais (multivalentes e monovalentes) com faixa de tamanho de 0,00025 - 0,003 μm a uma pressão operacional de 20-50 bar (WANG et al., 2011).

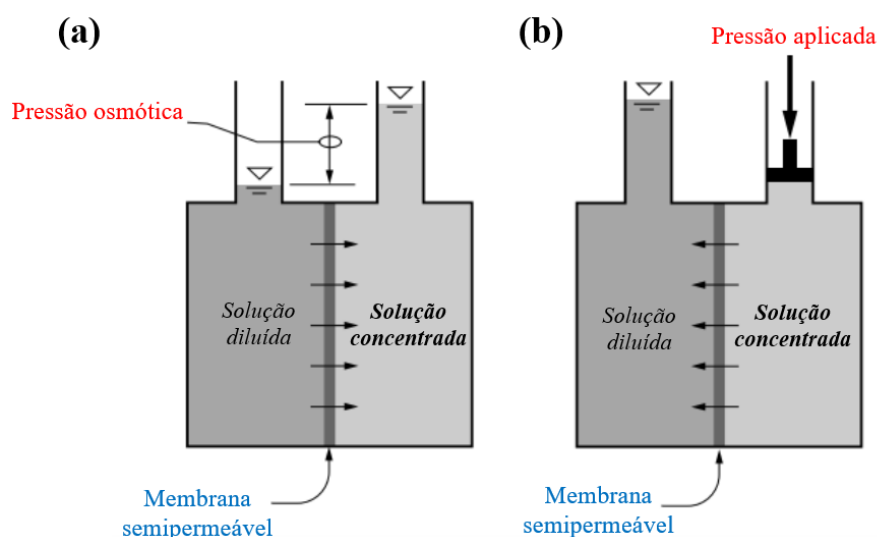
2.4 Processo de Osmose Reversa (RO)

O fenômeno de osmose é verificado quando há uma solução separada por uma membrana semipermeável, onde há diferença de concentração de soluto nos dois lados separados, o que provocará um fluxo natural do solvente da região de menor para maior concentração, até que atinja um equilíbrio no potencial químico dos dois lados da membrana. Esse movimento do solvente puro para equilibrar as concentrações do soluto gerará um desnível de coluna em cada lado de uma membrana, gerando, assim, uma diferença de pressão entre os meios, denominada "pressão osmótica". Quando há uma aplicação de uma pressão superior à da osmótica no meio com alto teor de concentração, ocorrerá a inversão do fluxo, ou seja, o solvente irá se deslocar da região de maior concentração para a solução diluída, esse processo é denotado de osmose reversa (RO) ou inversa. A Figura 2.3 representa esquematização dos dois processos.

A Figura 2.4 apresenta de forma esquemática o processo de dessalinização por osmose reversa, em que a pressão externa é aplicada com auxílio de uma bomba acoplada no canal de alimentação e é responsável por exceder a pressão osmótica da água. Como resultado, a direção natural do fluxo de água através de uma membrana semipermeável é invertida. O concentrado (fluxo de rejeição) formado tem uma maior concentração de sais em comparação com o permeado (fluxo de produto) e é retirado no final do módulo. A principal parte intensiva de energia no processo de RO da água do mar é a bomba de alta pressão usada para criar uma

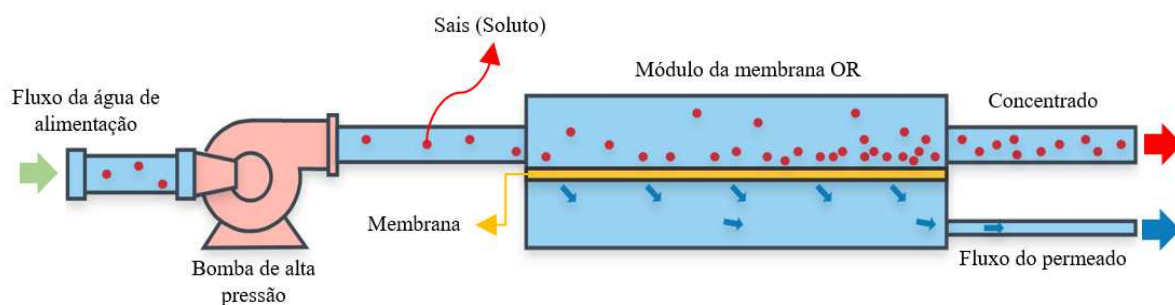
pressão de 60 a 80 bar (SAEED, 2012). Já o requisito de pressão para o tratamento da água salobra é menor, cerca de 15 bar, em comparação com o necessário para a dessalinização da água do mar (FRITZMANN et al., 2007).

Figura 2.3 – Esquema do processo de osmose (a) e osmose reversa (b)



Fonte: Adaptado de Voutchkov (2013).

Figura 2.4 – Representação esquemática do processo de dessalinização por RO



Fonte: Própria do autor.

Em uma escala industrial, um sistema de dessalinização de água via osmose reversa (Figura 2.5) é constituída, basicamente, por filtros de pré-tratamentos, válvulas, vários módulos ligados em série e um sistema de bombeamento, para oferecer ao processo a pressão requerida para superar a pressão osmótica. Esse tipo de sistema de dessalinização via osmose reversa é considerado como mais eficiente em termos energéticos quando comparado com os outros tipos de processos (MILLER; SHEMER; SEMIAT, 2015).

Figura 2.5 – Planta industrial de osmose reversa



Fonte: Gomes (2011).

Para estimar valores de pressão fornecida por esse sistema de bombeamento, faz-se necessário conhecer a pressão osmótica do processo e isso pode-se basear na concentração do soluto e/ou íons e na temperatura, por meio da equação de Van't Hoff (Equação 2.1).

$$\pi = i \cdot R_c \cdot c \cdot T \quad (2.1)$$

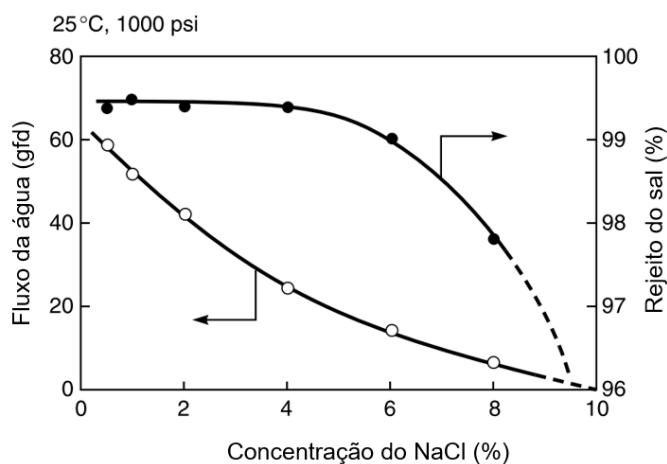
sabendo que π é a pressão osmótica da solução, c é a concentração do soluto em solução, R_c é a constante universal dos gases perfeito, T a temperatura em Kelvin e i o fator de correção de Van't Hoff.

Referente à membrana utilizada no processo RO, o parâmetro bastante utilizado para medir a eficiência da sua seletividade é o coeficiente de rejeição de sal (R), que é definido através da Equação 2.2 por meio dos valores de concentrações coletados nas saídas dos canais do permeado (c_{sp}) e da alimentação (c_{sf}).

$$R(\%) = \left(1 - \frac{c_{sp}}{c_{sf}} \right) \cdot 100 \quad (2.2)$$

Na Equação 2.2, é possível notar que o aumento da concentração de sal na solução de alimentação possibilita uma redução no desempenho da membrana, podendo causar uma queda do fluxo permeado, como notado na Figura 2.6. A explicação para isso está relacionada ao aumento da concentração de sal com um incremento efetivo no termo de pressão osmótica, como visto na Equação 2.1, o que promove, numa pressão de alimentação constante, uma diminuição da força motriz do processo e conseqüentemente do fluxo de água permeado.

Figura 2.6 – Efeito da concentração de sal de alimentação nas propriedades de membranas de dessalinização de água do mar de boa qualidade (SW-30)



Fonte: Cadotte (1980) apud Baker (2004)

Um outro fato interessante apresentado na Figura 2.6 é que as rejeições de sal superiores a 99% (valor usualmente utilizado nos estudos para caracterização de rejeição) são alcançadas em concentrações de sal inferiores a 6%, correspondendo a uma pressão aplicada líquida de cerca de 400 psi.

A recuperação é determinada pela razão entre as vazões de permeado e da alimentação, por meio da Equação 2.3. Sua função é a capacidade de descrever a eficiência de operação de um sistema e está relacionada à possibilidade de formação de incrustações.

$$\text{Recuperação (\%)} = \frac{Q_p}{Q_A} \cdot 100 \quad (2.3)$$

onde Q_p e Q_A é a vazão do permeado e da alimentação, respectivamente.

Quando há um aumento na recuperação, ocorrerá um incremento na concentração dos solutos rejeitados na superfície da membrana do lado da corrente do concentrado, o que motiva acréscimo na pressão osmótica, redução do fluxo do permeado e formação de incrustações, produzindo uma redução da vida útil da membrana. Costa (2009) também retrata esse fenômeno, no qual explicita que a permeação seletiva da água pela membrana induz a um aumento da concentração dos solutos rejeitados próximo à sua superfície, gerando um gradiente de concentração, havendo difusão desses solutos de volta ao o seio da alimentação.

No que diz respeito aos fenômenos presentes no PSM por uso de membrana de osmose reversa, foram desenvolvidos, ao longo do tempo, vários modelos matemáticos na literatura, que permitem descrever os comportamentos como escoamentos do fluxo de alimentação e

permeado, dinâmica do transporte através da membrana e a polarização de concentração na região próxima à superfície da membrana.

Esses principais fenômenos são inerentes ao processo de separação por membrana via osmose reversa, havendo, portanto, a necessidade de buscar uma melhor predição dos modelos matemáticos para, dessa forma, aproximar-se ainda mais do que acontece na realidade. Dentre dos modelos teóricos matemáticos pode-se citar as equações governantes do transporte: as leis de conservação da mecânica dos fluidos e a equação de transporte de massa, a teoria do filme, modelos de resistências em série, camada em gel, modelo da pressão osmótica e modelo da retenção do soluto.

Para descrever o transporte do solvente e do soluto através da membrana, existem inúmeros modelos matemáticos que tentam replicar os fenômenos e com várias naturezas de mecanismos e conceitos diferentes. Em geral, segundo Malaeb e Ayoub (2011), Williams (2003) e Wang et al. (2011), pode-se dividir em três grupos: modelos termodinâmicos irreversíveis, modelos porosos com aplicação do transporte através da difusão e convecção e modelos homogêneos de membrana.

Alguns desses modelos matemáticos são discutidos de forma breve nos próximos tópicos, principalmente aquelas formulações pertinentes ao trabalho.

2.5 Módulos de permeação

As plantas industriais de dessalinização por membranas necessitam de centenas a milhares de metros quadrados de membranas para obter uma produção em grande escala de água potável e que seja viável economicamente. Assim, na indústria utiliza-se métodos de empacotamento capazes de proporcionar maior área de contato entre a membrana e a solução com uma menor ocupação volumétrica. Esses pacotes são chamados de módulos de membrana (BAKER, 2004). Segundo Voutchkov (2013), os módulos podem ser classificados em tipo espiral (SW - "*spiral wound*"), tipo chapa ("*plate e frame*") e tipo fibroso ("*hollow fiber*"), vide Figura 2.7. Tais módulos proporcionam uma boa densidade de empacotamento das membranas, baixo custo de fabricação, baixa ocupação de espaço e facilidade de manuseio e de manutenção. Entretanto, conforme França Neta (2009), apresentam limitações na transferência de massa e tendência à formação de incrustações, deixando em aberto um vasto campo para o desenvolvimento de novos projetos.

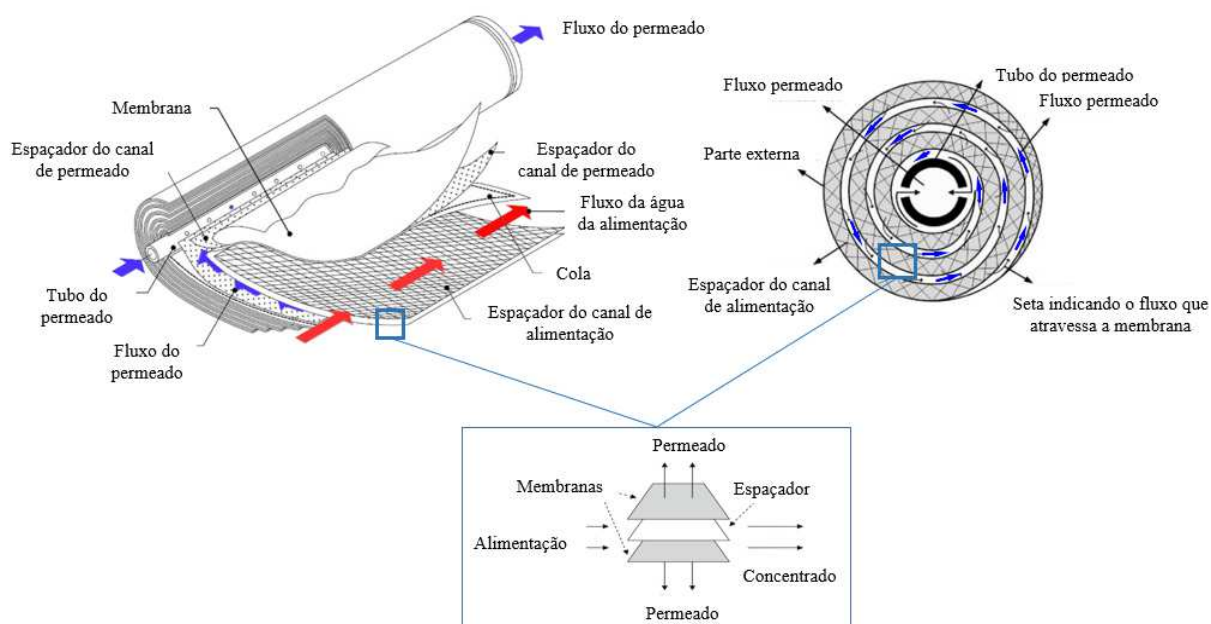
Figura 2.7 – Tipos de módulos de membrana industriais(a) Módulo em espiral (*spiral wound*)(b) Tipo chapa (“*plate e frame*”)(c) Tipo fibroso (“*hollow fiber*”)

Fonte: (a) e (c) <http://www.kochmembrane.com> e (b) <https://www.alfalaval.com>.

Dentre essas configurações, o módulo de membrana em espiral é encontrado na maioria das plantas industriais que operam com PSM, principalmente as que utilizam a osmose reversa como principal método de separação, fato esse relatado por Farrell (2008), Wang, He e Zhu (2016), Voutchkov (2017) e Qasim et al. (2019). Farrell (2008) completa afirmando que o módulo em espiral se beneficia da sua alta densidade de empacotamento da membrana e do baixo investimento inicial e operacional quando comparado com os demais tipos de módulos.

No módulo espiral, representado esquematicamente na Figura 2.8, emprega-se a membrana entre dois espaçadores, em que um destes serve como um canal coletor para o permeado (canal do permeado) enquanto o outro fornece espaço para escoar a solução de alimentação (canal da alimentação). As membranas unida com os espaçadores são enroladas em torno de um duto perfurado, pelo qual o permeado escoar, por fim, o conjunto é selado externamente (MOURA et al., 2008). Um ponto interessante é a utilização das formas e do arranjo dos espaçadores para promover turbulência no fluxo do fluido de alimentação para ocasionar uma redução da camada por polarização. Essa questão é relatada na literatura nos trabalhos de Cunha et al. (2013), Koutsou, Yiantsios e Karabelas (2009), Santos et al. (2007), Schwinge et al. (2003) e Foo, Liang e Weihs (2020).

Figura 2.8 – Módulo espiral e a seção transversal do módulo

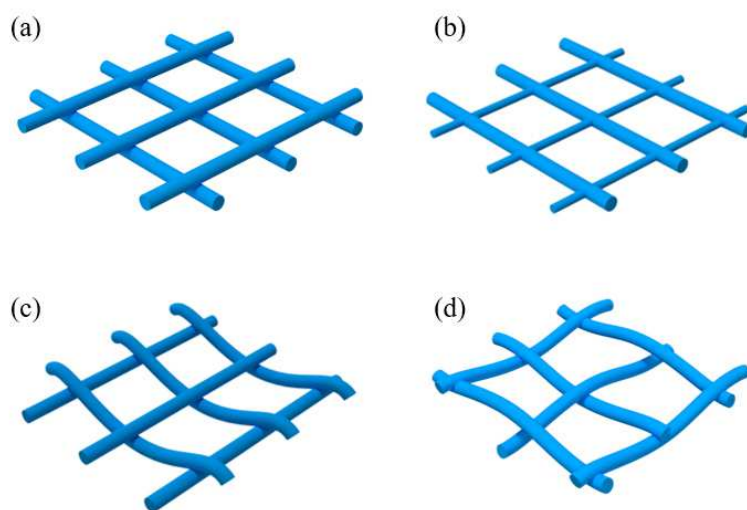


Fonte: Adaptado de Li e Tung (2008) e Johnson e Busch (2010).

Os componentes do módulo espiral que têm influência direta no desempenho da membrana são os espaçadores, também chamados de promotores de turbulência. Para Geraldes, Semião e De Pinho (2002) e Ghidossi, Veyret e Moulin (2006), isso é possível porque os espaçadores além de ter a função de separar as folhas das membranas – tanto nos módulos de membranas enrolados em espiral como nas *slits* (finos canais retangulares) –, também é responsável por aumentar a transferência de massa, pois são usados para aumentar a tensão de cisalhamento na parede e promover mistura por turbilhonamento, reduzindo, portanto, a concentração de soluto na parede e incrustações.

Ao verificar a eficácia dos espaçadores, surgiram diversas geometrias de malha dos espaçadores e perfis de filamentos, sempre focando em criar turbulência na camada de concentração polarizada para ter, como consequência, uma diminuição da sua espessura e aumento do fluxo de escoamento do permeado. No entanto, ao aumentar a turbulência, desenvolve-se a preocupação com as perdas de energia e de pressão, o que promove uma busca incessante em otimizar a relação entre aumentar do fluxo do permeado e diminuir perdas energéticas. Basicamente, pode-se encontrar a malha dos espaçadores nas formas *woven* (entrelaçado) e *nonwoven* (filamentos paralelos), podendo haver pequenas variâncias entre eles, conforme consta na Figura 2.9, que mostra essas duas configurações e suas variâncias.

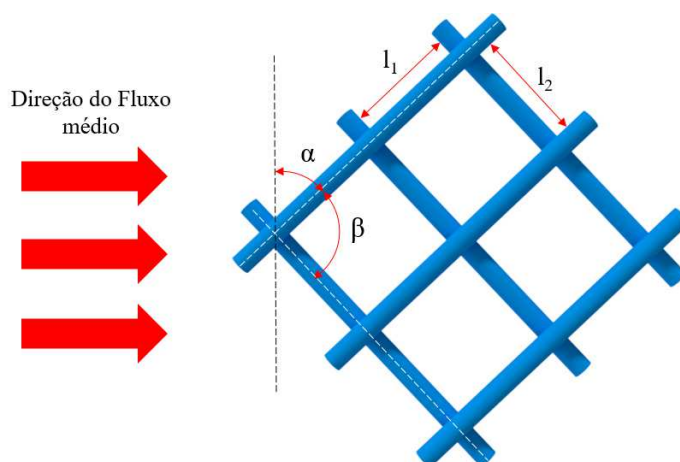
Figura 2.9 – Configurações dos espaçadores de alimentação: (a) *nonwoven*, (b) *woven* parcial, (c) meia camada, (d) *woven* completo



Fonte: Própria do autor.

Além do tipo, é possível variar parâmetros geométricos da malha, como por exemplo o ângulo entre os filamentos (β), conforme a Figura 2.10, com intuito de otimizar a eficiência do módulo de permeação. Estudos como o de Li et al., (2002) e Gu, Adjiman e Xu (2017) mostram que esse parâmetro angular apresenta um papel fundamental para formação de vórtices responsáveis em afetar a camada de concentração polarizada, ocasionando bons resultados no que diz respeito ao aumento do fluxo do permeado.

Figura 2.10 – Característica da geometria da malha dos espaçadores *nonwoven* adotado por Li et al. (2002)

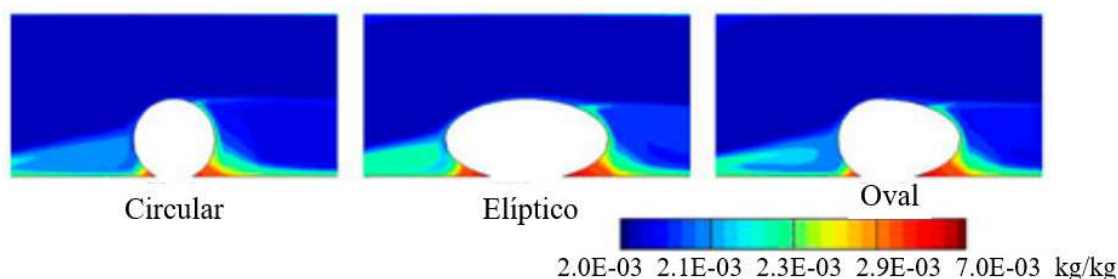


Fonte: Própria do autor.

Outros parâmetros geométricos, tais como variações geométricas das conexões de contato entre filamentos, também são explorados pelos pesquisadores a fim de buscar uma boa relação entre a minimização da espessura da camada de concentração polarizada e a perda de pressão, como podem ser vistos nos resultados de Foo, Liang e Weihs, (2020), Ruiz-García e Pestana (2019), Saeed (2012) e Koutsou, Karabelas e Kostoglou (2018). Nesse contexto, Ahmad, Lau e Abu Bakar (2005), Amokrane et al. (2016) e Ranade e Kumar (2006) investiram seus estudos nas geometrias dos perfis dos filamentos, por meio dos quais foi possível analisar e comparar o comportamento do fluxo de alimentação, camada de concentração, perda de pressão e formação dos vórtices para diferentes perfis.

A Figura 2.11 apresenta um dos resultados das simulações em 2D realizadas por Amokrane et al. (2016) para o estudo do comportamento da camada de concentração do sal em diferentes perfis de filamentos (circular, elíptico e oval).

Figura 2.11 – Camada de concentração mássica do sal próximos aos espaçadores para promotores circular, elíptico e oval



Fonte: Amokrane et al. (2016).

De acordo com o autor mencionado, há uma forte relação entre a geometria desses perfis com o tamanho das regiões de estagnações do fluxo, locais esses são susceptíveis à formação de zonas com alta concentração de sais, o que prejudicaria a eficiência da membrana. Houve outros estudos, como os de Lau et al., (2009) e de Gu, Adjiman e Xu (2017), que buscaram entender a influência dos ângulos de ataques dos filamentos em relação ao fluxo (α), (vide Figura 2.10), com formação da camada de concentração polarizada. Os resultados apontaram para a necessidade de um maior leque de estudos voltados a analisar perfis geométricos da malha dos espaçadores a fim obter um melhor entendimento dos fenômenos existentes e dos fatores influenciadores da eficiência do processo.

Portanto, nos últimos anos, houve um aumento gradual de pesquisadores interessados em analisar esses tipos de parâmetros no mundo, destacando-se as pesquisas computacionais

por possuir um baixo custo computacional, rápida aquisição de resposta e uma facilidade de obter resultados que podem elucidar melhor a influência desses parâmetros no processo.

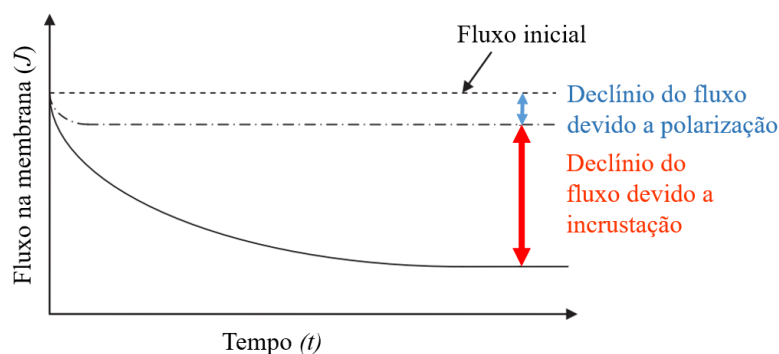
2.6 Fatores limitantes do processo por osmose reversa

O principal e determinante fator técnico limitante para a aplicação da filtração por membranas é o declínio do fluxo durante um processo de separação por membrana, ou seja, o fluxo permeado através da membrana irá fatalmente reduzir com o tempo. Esse declínio é um fator importante a ser considerado no desempenho dos sistemas de membrana ao longo de sua vida útil e, conseqüentemente, no seu custo de operação (PENG; ESCOBAR; WHITE, 2004).

O declínio de fluxo permeado pode ser atribuído a dois fatores principais: fenômenos de polarização (principalmente polarização de concentração) e incrustação na membrana. A Figura 2.12 apresenta um padrão típico de declínio do fluxo ao longo da duração de uma operação de filtração por membrana, ilustrando a influência desses dois fatores (KEIR, 2012).

Pela Figura 2.12 pode-se perceber que a incrustação das membranas tem um papel importante como causadora do declínio do fluxo permeado, conseqüentemente, pelo prejuízo da qualidade do produto nos sistemas de osmose reversa e na vida útil de seus componentes. A facilidade da formação de camada de incrustação na superfície da membrana é dependente de alguns fatores, que podem ser divididos em três grupos principais: pressão de condução, dimensões e características do canal de membrana e propriedades físico-químicas da água de alimentação (WANG et al., 2011).

Figura 2.12 – Declínio típico do fluxo durante o processo de filtração



Fonte: Adaptado de Keir (2012).

Os causadores de incrustação são conduzidos para a superfície da membrana pelo fluxo do fluido de permeação de água, onde são impulsionados, principalmente, pela pressão de acionamento do processo, que provoca um acréscimo de acúmulo de incrustações na superfície da membrana, causando uma adição na resistência ao fluxo permeado ao longo do tempo de operação. Em uma situação de camada de incrustação mais compacta, também, surgirá uma redução da quantidade de água que atravessa a membrana, diminuindo a quantidade de água produzida, pois haverá entupimento dos poros e diminuição do contato da superfície da membrana com a água advinda do fluxo do canal de alimentação.

Keir (2012) destaca que o declínio de fluxo devido à polarização ocorre de forma rápida no processo, no entanto, é um fenômeno reversível e que representa uma pequena parcela da quantidade do declínio do fluxo total. O restante do declínio do fluxo ocorre por conta das incrustações na membrana, como foi visto na Figura 2.12. Todavia, a incrustação não é totalmente independente dos fenômenos de polarização e pode ser minimizada à medida que consegue limitar a extensão e os efeitos da polarização. Nos próximos tópicos será discutido com mais detalhes sobre esses fatores, a polarização de concentração (o fenômeno de polarização de interesse em processos de membrana acionados por pressão) e a incrustação de membrana, podendo perceber uma maior distinção entre esses fenômenos.

2.7 Polarização de concentração

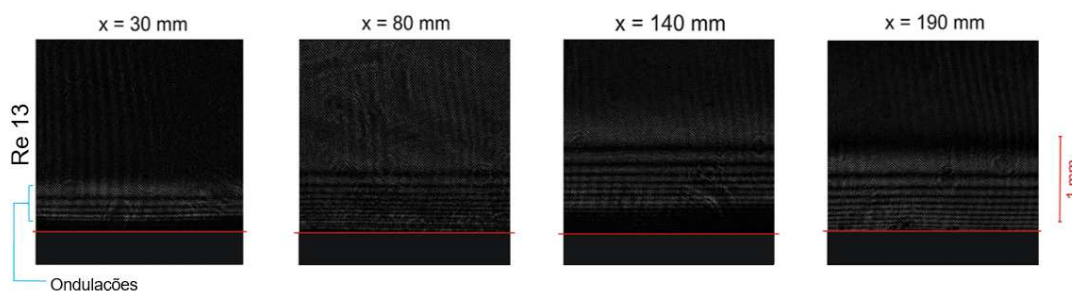
A polarização de concentração é um dos principais fenômenos responsáveis pelo acréscimo da resistência do fluxo permeado, além de ocasionar o aumento da pressão de acionamento para manter o mesmo fluxo, formação de incrustações e redução da vida útil da membrana. Isso ocorre devido ao processo de seletividade provido pela membrana, o que causa uma retenção do soluto na superfície da membrana, havendo maior concentração nessa região quando comparado ao meio do fluxo de alimentação. Esse fenômeno é intrínseco ao PSM e independe da forma com que o processo de separação ocorre. Segundo Wang e Song (1999), a polarização por concentração é um processo reversível que se inicia nos primeiros minutos de filtração, ocasionando a formação de um perfil de concentração de espécies retidas, de forma perpendicular, próximo à superfície da membrana.

A Figura 2.13 exhibe resultados publicados por Salcedo-Díaz et al. (2014), que buscaram capturar os perfis de concentração de forma experimental, utilizando a interferometria

holográfica digital (DHI) em quatro posições diferentes ao longo da membrana de osmose reversa. Assim, o conjunto de ondulações verificadas nas imagens da Figura 2.13 representa a camada polarizada do processo, pois cada ondulação corresponde a alterações dos valores de concentração do soluto na solução.

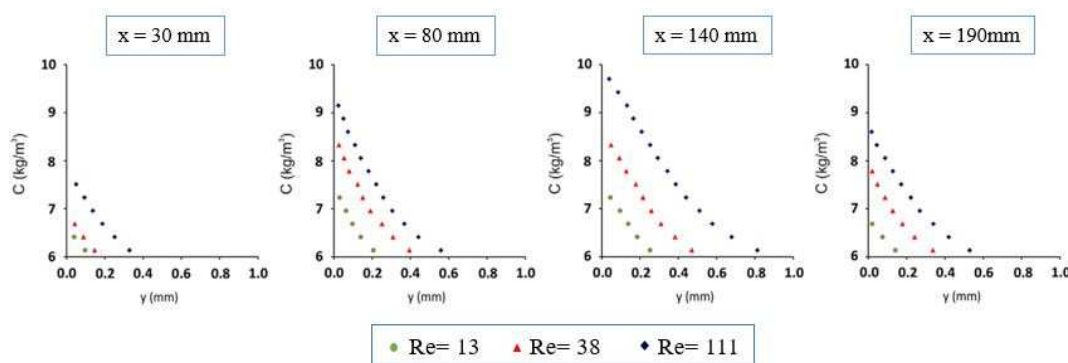
Nota-se, a partir dos interferogramas, que à medida que se desloca ao longo da membrana, a camada polarizada vai aumentando gradativamente à sua altura, atingindo o valor máximo na saída do canal. Além disso, os autores referenciados acima realizaram experimentos para três números de Reynolds distintos, publicando gráficos com perfis de concentração em função de y (altura do canal de alimentação) nas 4 posições estudadas (vide Figura 2.14). Esses perfis de concentração revelam a influência da velocidade do fluxo cruzado na camada polarizada, mostrando que o aumento dessas velocidades causa uma redução da camada, devido ao maior efeito de cisalhamento proporcionado pelo escoamento do canal.

Figura 2.13 – Interferogramas para experimento com concentração na alimentação de 6kg/m^3 e número de Reynolds de 13



Fonte: Salcedo-Díaz et al. (2014).

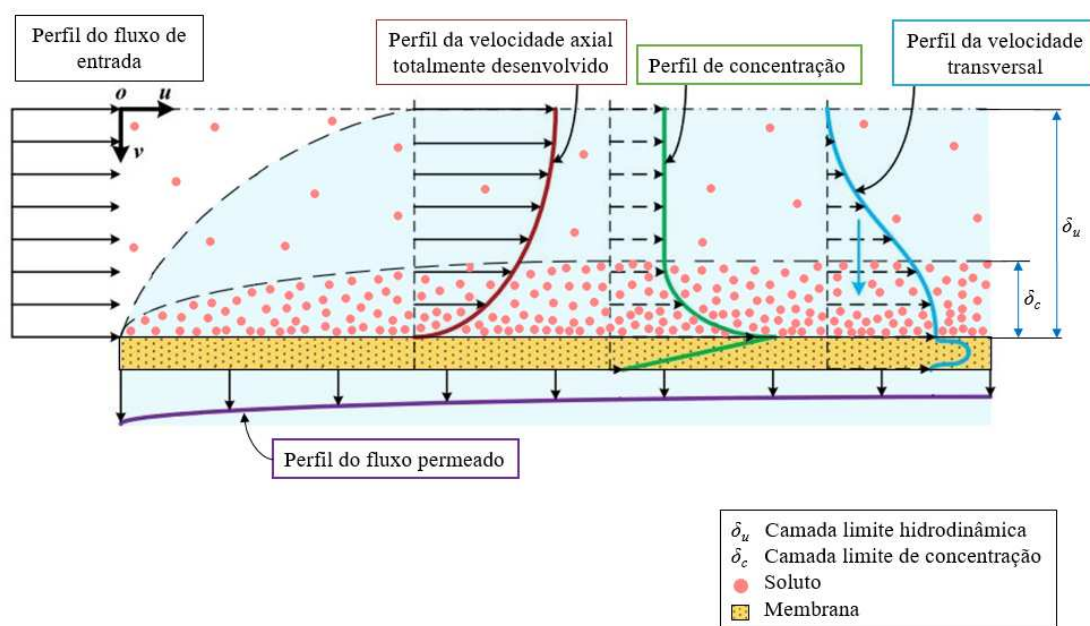
Figura 2.14 – Perfis de concentração para experimentos com concentração na alimentação de 6kg/m^3 e número de Reynolds variando em 13, 38, 111



Fonte: Salcedo-Díaz et al. (2014).

A Figura 2.15 exibe, de forma esquemática, como ocorre esse processo de acúmulo do soluto na superfície da membrana, mostrando os formatos das camadas limite de concentração e hidrodinâmica do fluxo, assim como os perfis de concentração e de velocidade axial e transversal presente nesse processo.

Figura 2.15 – Representação do processo de formação do acúmulo de soluto na superfície da membrana, surgindo a camada limite da polarização por concentração



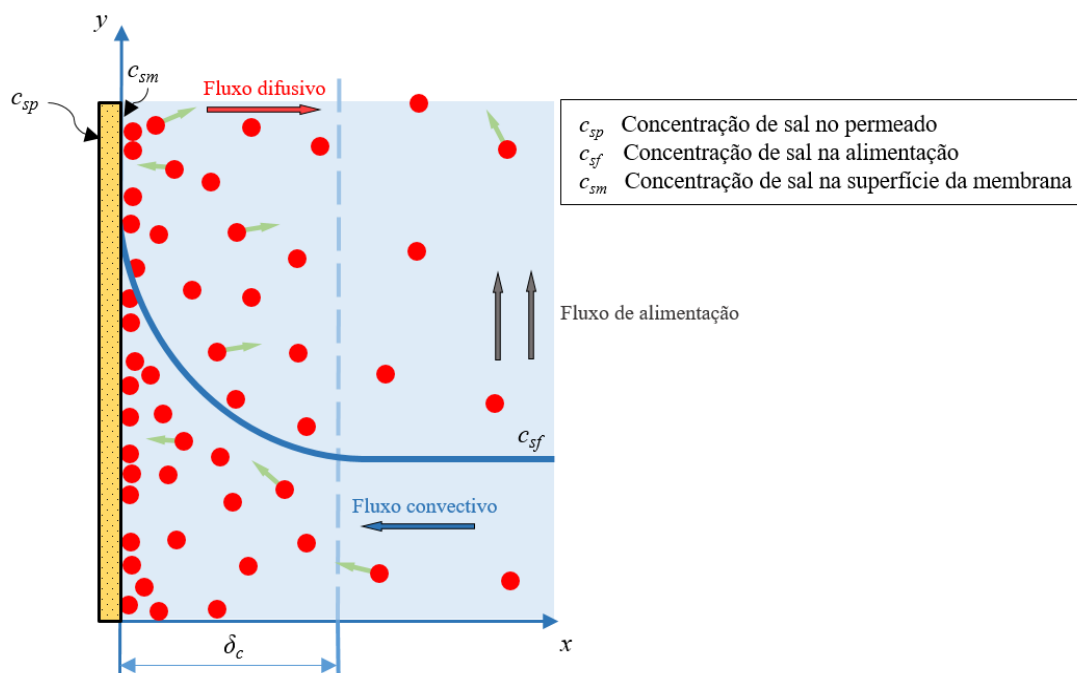
Fonte: Adaptado de Li et al. (2017).

Esse perfil de concentração do soluto na superfície da membrana implica a formação de uma camada limite ao longo das proximidades dessa superfície no canal de alimentação (Figura 2.15), que depende das características fluidodinâmicas do escoamento transversal e axial. Como consequência a esse gradiente de concentração entre a superfície da membrana (c_{sm}) e o meio do canal de alimentação (c_{sf}), surge um mecanismo de transporte difusivo em que os solutos acumulados nas proximidades da membrana retorna para o meio do fluxo de alimentação.

No início do processo, a taxa de fluxo convectivo da solução é tipicamente maior que a do fluxo de difusão do soluto; logo, os sais rejeitados pela membrana tendem a se acumular na camada limite, com a maior concentração de sal ocorrendo no interior da superfície da membrana (MULDER, 1996; VOUTCHKOV, 2013). Com um aumento da quantidade do soluto na superfície, os mecanismos de transporte convectivo e difusivo irão atingir o equilíbrio entre os fluxos, estabilizando a camada limite e com isso atinge a formação da polarização de

concentração. A Figura 2.16 ilustra as direções e as participações dos fluxos nessa camada limite.

Figura 2.16 – Perfil de polarização de concentração sob condições de estado estacionário



Fonte: Própria do autor.

Há inúmeras tentativas para formulação de modelos matemáticos que possam caracterizar e prever os efeitos causados pelo mecanismo de formação da camada limite de concentração. Dentre essas formulações, destacam-se: teoria do filme; modelo da camada de gel; modelo da pressão osmótica; modelo de difusão induzida por cisalhamento e entre outros.

2.8 Incrustação (*fouling*)

A incrustação de membranas é a principal causa do declínio do fluxo permeado e perda da qualidade do produto em sistemas de osmose reversa, de modo que o controle de incrustação domina o projeto e a operação do sistema de osmose reversa (BAKER, 2004). Esse fenômeno consiste na deposição irreversível de componentes presentes na água salobra sobre a superfície e/ou estrutura interna da membrana e é intensificado devido à presença da camada limite de polarização de concentração. Esses componentes podem ser partículas, compostos orgânicos e

inorgânicos, fragmentos celulares, substâncias poliméricas extracelulares (SPE) e microrganismos.

Mai (2014) explicita uma outra forma de definição para incrustação, afirmando que a incrustação de membranas é um fenômeno em que substâncias suspensas ou dissolvidas da fase líquida se depositam numa superfície da membrana e/ou nos poros da membrana de uma forma que degrada o desempenho da membrana. Para ele, a incrustação da membrana é influenciada por três fatores principais: propriedades do material da membrana, as características do soluto e as condições de operação. Ainda segundo o autor, as interações entre a membrana e os contaminantes determinam o grau de incrustação.

Wang et al. (2011) também defendem que a incrustação da membrana está relacionada com as propriedades da solução alimentar (concentração, pH, força iônica e interações dos componentes), com a natureza da membrana (hidrofobicidade, carga, rugosidade, tamanho dos poros, distribuição do tamanho dos poros e porosidade) e com condições operacionais (temperatura, pressão transmembrana (TMP) e velocidade de fluxo cruzado). Os autores ainda afirmam que se a incrustação da membrana não for controlada eficazmente através de pré-tratamentos, a incrustação pode se intensificar de tal modo que a limpeza da membrana não consiga reverter o declínio na produção de água.

Existem vários processos de formação de incrustação na membrana durante o processo de separação, inclusive o de osmose reversa (VOUTCHKOV, 2013), no qual se destacam: incrustações por deposição, incrustações por precipitação e bioincrustações.

A deposição de sólidos suspensos, tais como: coloides, moléculas orgânicas, produtos de corrosão, hidróxido de ferro, algas e materiais particulados finos, pode ocorrer gradativamente na superfície da membrana. Esse efeito é intensificado na superfície da membrana pelo fenômeno de polarização de concentração, especialmente em altas pressões de operação, que são características dos processos de osmose reversa e, normalmente, estão associadas a elevados fluxos permeados de solvente (COSTA, 2009). Esses materiais suspensos podem afetar, através de entupimento ou colmatação, o canal de alimentação dos módulos de membranas, causando um declínio no fluxo permeado, diminuição do desempenho do processo e redução da vida útil da membrana.

O segundo tipo de incrustação deriva da precipitação dos componentes dissolvidos no canal de alimentação quando atingido o limite de solubilidade dos solutos, principalmente nas regiões próximas à interface da membrana, por motivo da presença do fenômeno de polarização de concentração. Silva (2012) relata que, além da polarização de concentração, o processo de cristalização na superfície da membrana, também é uma das causas para a formação desse tipo

de precipitação do soluto. Esse tipo de incrustação pode ser reduzido ou evitado com a adição de ácido, que possibilita reduzir as espécies de ânions na água de alimentação. Outra forma seria um pré-tratamento com aplicação de calcário para remover metais formadores de incrustações e adição de agentes anti-incrustantes como hexametáfosfato (WANG et al., 2011).

A bioincrustação é a formação de uma camada que permite o crescimento de bactérias na superfície da membrana. Uma outra definição dada por Baker e Dudley (1998), explicita que as bioincrustações ocorrem devido ao acúmulo de material orgânico na superfície da membrana, incluindo fragmentos celulares, substância polimérica extracelular (SPE) e microrganismos, que resulta na formação de biofilmes.

A composição da membrana também é um fator que auxilia na formação dessa camada de biofilmes, como, por exemplo, as membranas de acetato de celulose, que são um nutriente ideal para as bactérias. Essa camada de biofilmes que apresenta sistemas muito complexos, é constituída por células microbianas e colônias introduzidas em um gel de um determinado polissacarídeo. Além disso, os biofilmes possuem partículas de proteínas, lipídeos, fosfolipídios, carboidratos, sais minerais, vitaminas, entre outros, formando uma crosta onde os microrganismos de uma ou mais espécies se desenvolvem (COSTA, 2009). Para processos de osmose reversa e nanofiltração, a formação de biofilme eleva a resistência ao transporte, diminuindo o fluxo permeado, o qual causará uma maior necessidade de consumo de energia para aumentar a pressão de operação. Segundo Vrouwenvelder et al (2010) e Karime, Bouguecha e Hamrouni (2008), a incrustação biológica é considerada, atualmente, o maior problema para a osmose reversa e a nanofiltração.

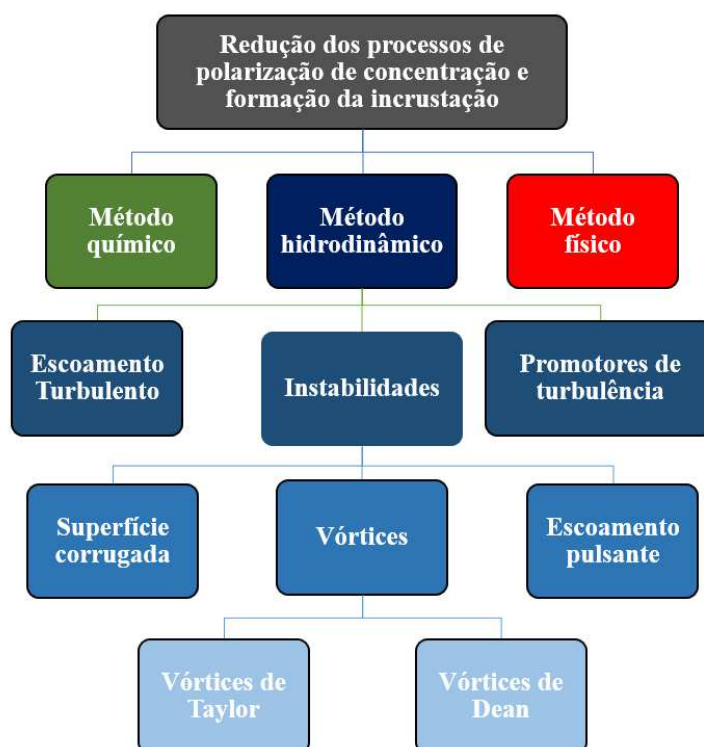
Diversas pesquisas são realizadas a fim de caracterizar esses problemas de polarização de concentração e incrustação, de modo que haja uma minimização dos seus efeitos no desempenho do processo. Para tal, surgiram algumas técnicas de ordem química, hidrodinâmica e física, que vem apresentando resultados promissores no que se refere ao combate desses problemas. Dentre esses métodos, destacam-se os promotores de turbulência.

2.9 Técnicas para redução da camada polarizada e incrustação

A maximização da eficiência de um módulo de membrana pode ser obtida reduzindo o potencial de formação da camada de polarização por concentração e da incrustação através de estratégias vinculadas ao pré-tratamento do fluxo de alimentação, propriedades da membrana,

controle operacionais do processo e limpeza periódica do sistema. A Figura 2.17 resume os métodos com capacidade de redução da camada polarizada e incrustação utilizados no âmbito industrial.

Figura 2.17 – Métodos utilizados para aumento da eficiência do PSM



Fonte: Própria do autor.

Os métodos químicos utilizam uma estratégia com foco em alterar as características da superfície da membrana, de modo a torná-la menos suscetível à adsorção. Essa modificação química da superfície da membrana pode ser pela polimerização na superfície com inserção de grupos hidrofílicos, irradiação por plasma, entre outros (COSTA, 2006). Assim, a pré-adsorção da membrana por um determinado componente que possa ser facilmente removido ou o uso de membranas de superfícies hidrofílicas (onde proteínas são menos facilmente adsorvidas) são métodos de reduzir a queda do fluxo permeado (PORCIÚNCULA, 2007).

Zhang et al. (2015) citam que essa estratégia inclui variadas técnicas para alterar o comportamento da superfície da membrana como o tratamento de plasma. Essa técnica permite a criação de grupos funcionais hidrofílicos na superfície da membrana, tais como O_2 , N_2 , CO_2 , H_2O e NH_3 , que poderão melhorar a hidrofílicidade da membrana, aprimorando a capacidade anti-incrustante, assim como a otimização das propriedades de sua superfície e sua

biocompatibilidade mais seletiva, sem alterar as propriedades do fluxo de alimentação. No entanto, a complexidade das reações químicas e físicas do tratamento plasmático dificulta a aplicação no âmbito industrial.

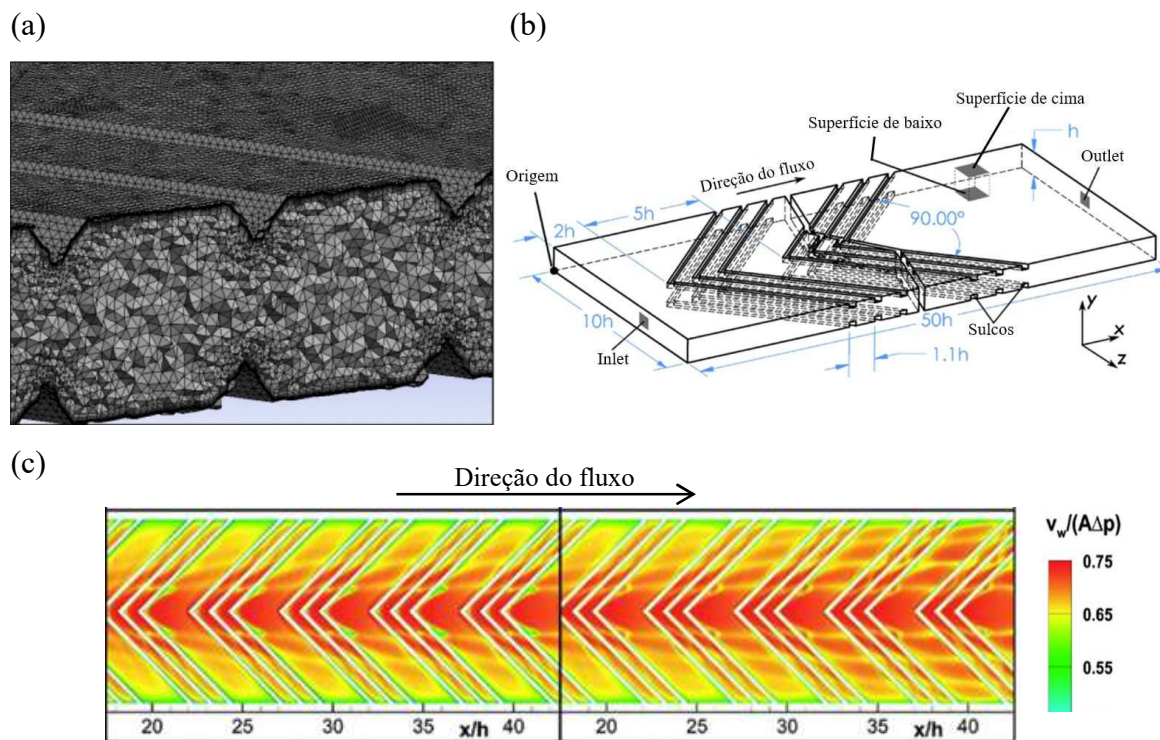
Os métodos físicos englobam a adição de partículas ou campos elétricos que atraem as partículas causadoras das incrustações (FRANÇA NETA, 2009). Essa técnica consiste em aplicar um campo elétrico sobre o módulo, em que os íons e moléculas carregadas são forçadas a se movimentarem em direção do campo de tal modo a se afastar das membranas. Esse efeito mostrou bons resultados na melhoria do fluxo permeado, sendo comprovado por Karthik, Dasgupta e De (2002).

Os métodos hidrodinâmicos propiciam a alteração das propriedades do escoamento do fluxo de alimentação de maneira que cause um aumento na taxa de cisalhamento nas proximidades da interface da membrana e, assim, um incremento no coeficiente de transferência de massa. Isso terá, como consequência, um aumento do fluxo permeado e um melhor combate contra a polarização e a incrustação.

Uma alternativa para esse método é a aplicação de superfícies corrugadas na membrana com o objetivo de promover uma alteração nos padrões de escoamentos, principalmente nas regiões de formação da camada polarizada e incrustações. Usta, Anqi e Oztekin (2017) realizaram simulações com membranas corrugadas para diferentes números de Reynolds do fluxo de alimentação. Os autores concluíram que houve, para membranas com nervuras impressas sobre a superfície, um aumento da taxa de permeação de água em 50% em baixas taxas de fluxo e em cerca de 30% em vazões mais altas, ambos comparados com resultados que tinham membranas planas. Segundo esses autores, isso foi possível por causa da presença desses corrugados que promoveram uma maior turbulência, conseqüentemente, uma maior mistura da solução e um aumento da taxa de cisalhamento sobre as regiões próximas à superfície da membrana.

A Figura 2.18 exibe um detalhe da malha numérica utilizada por Usta et al., (2017), o esquema usado do problema tratado e um dos resultados abordados, o qual mostra um fluxo permeado quase constante em praticamente toda membrana analisada. Os resultados das simulações ilustradas na Figura 2.18c apresentaram os valores médios da taxa da água permeada sobre a área adimensionalizada com uso do número de Reynolds de 1000, havendo 53,85 L/m²h para membrana plana e para membranas com nervuras quadradas e triangulares obtiveram valores de 67,71 e 69,18 L/m²h, respectivamente.

Figura 2.18 – Trabalho de Usta et al. (2017): (a) detalhamento da malha; (b) esquema escolhido para abordar o problema a ser analisado e (c) resultado do contornos do fluxo de água através da membrana superior para nervuras quadradas (lado da esquerda) e nervuras triangulares (lado da direita), para um fluxo de entrada com $Re = 1000$



Fonte: Adaptado de Usta et al. (2017).

Uma outra técnica pertencente ao grupo dos métodos hidrodinâmicos é o uso de promotores de turbulências (espaçadores, chicanas ou *baffles*), que favorece um incremento no coeficiente de transferência de massa, pela mudança hidrodinâmica do escoamento do fluxo de alimentação com formação de um fluxo local turbulento com vórtices, como o de Taylor e de Dean. Isso tem consequências benéficas na redução da camada limite polarizada por concentração, minimizando problemas de incrustações que atenuam o fluxo permeado. Em contrapartida, esses espaçadores promovem um aumento da perda de carga, conseqüentemente, um aumento da quantidade de energia utilizada e pode, nas regiões próximas aos espaçadores, ajudar na formação de incrustações, devido ao surgimento de locais de estagnação.

Dentro desse contexto, Saeed (2012) complementa explicitando que os espaçadores no canal de alimentação podem ser orientados para gerar altas velocidades de fluxo cruzado ou padrões de fluxo secundário que podem desenvolver maiores forças cisalhantes na superfície da membrana para reduzir a polarização de concentração e incrustações. No entanto, essa abordagem necessita de maior energia de bombeamento para compensar as perdas dentro do módulo de membrana e, portanto, os espaçadores devem ser otimizados para reduzir o acúmulo

de soluto na superfície da membrana com perda moderada de energia. Dessa forma, nas últimas décadas, diversas pesquisas foram produzidas visando essa otimização, impulsionadas pelo intenso avanço computacional e por uma modelagem matemática e numérica robusta.

2.10 Estudos computacionais usando promotores

Nas últimas décadas, as pesquisas e as novas tecnologias de dessalinização por osmose reversa vêm conseguindo um grande avanço devido ao suporte dado pela área de computação e sua evolução. A partir do uso de métodos numéricos e, em muitas situações, a obtenção mais rápida de solução dos modelos matemáticos é possível prever e descrever melhor o comportamento e os fenômenos existentes durante o processo de separação por membranas via osmose reversa. Além disso, o método computacional permite alterar alguns parâmetros intrínsecos ao processo e avaliar a sua influência no desempenho do equipamento, possibilitando, portanto, uma otimização da sua eficiência e uma minimização das limitações do processo em questão, dentro de um menor espaço de tempo e a baixo custo quando comparado com estudos experimentais.

Nessa perspectiva, de acordo com Versteeg e Malalasekera (2007), as principais vantagens encontradas no uso de uma simulação numérica computacional são: o baixo custo de aquisição e operação; o fornecimento de diversas informações a respeito de um problema; a facilidade de mudança rápida de parâmetros; a simulação de escoamentos com detalhe realista da geometria em estudo; a oferta de informações detalhadas sobre o escoamento estudado e, por último, a permissão do uso de condições de fronteira e carregamentos complexos.

Em geral, a modelagem computacional de um sistema de separação por membranas via osmose reversa pode ser realizada na forma bidimensional ou tridimensional; todavia, a maioria dos trabalhos na literatura opta por utilizar a modelagem unidimensional ou 2D por conta de menores custos e tempos computacionais. Segundo Fimbres-Weihs e Wiley (2010), a diferença na memória e nos requisitos de tempo computacional pode facilmente ser caracterizada pela variação da ordem de grandeza da quantidade de elementos utilizadas na malha, visto que as simulações 2D requerem um número da ordem de dezenas a centenas de milhares, enquanto as simulações 3D têm sido relatadas a exigência de milhões a dezenas de milhões de elementos de malha quando incorporada transferência de massa.

Baseado nessa esfera de conhecimento em modelagem numérica em processo de separação por membranas, pesquisas voltadas para análise de desempenho dos promotores de turbulência vêm ganhando forças com a justificativa de promover uma otimização do processo com a redução do declínio do fluxo e diminuição dos efeitos negativos da camada de polarização de concentração e de incrustação. Tal fato se tornou muito importante, pois não é possível obter uma visão detalhada do efeito do espaçador por meio de procedimentos experimentais comuns, devido a complexidades envolvidas na visualização de padrões de fluxo e concentração em canais estreitos.

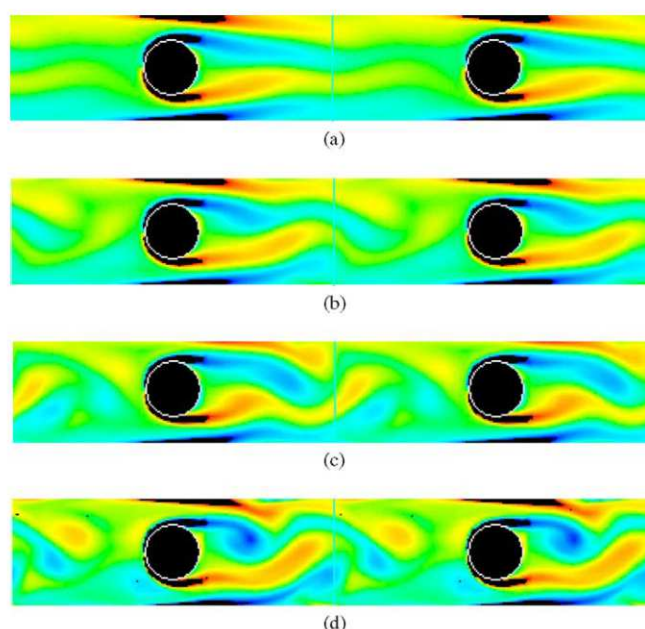
Cavaco Morão et al. (2008) e Sablani et al. (2001) relataram essas limitações em descrever e quantizar melhor a camada de concentração formada na superfície da membrana via realizações de experimentos, principalmente em determinar o perfil dessa camada limite. Por conta disso, vários pesquisadores no campo da ciência da membrana estão usando ferramentas de CFD ou mudaram seu foco de métodos experimentais para ferramentas de CFD para investigar a transferência de massa e a hidrodinâmica em canais estreitos cheios de espaçadores (SAEED, 2012). À posteriori, serão apresentados trabalhos voltados a simulações do processo de separação por membrana, em 2D e 3D, que exploraram os efeitos da geometria dos promotores de turbulência e seus arranjos na performance do processo.

Cao, Wiley e Fane (2001) foram um dos pioneiros a investigar os efeitos dos espaçadores no PSM pelo uso de simulações em CFD com geometria em 2D. Os autores empregaram na simulação o *software* ANSYS FLUENT 4.0 com aplicação do algoritmo de solução SIMPLE, em que adicionaram um perfil parabólico de velocidade da entrada do canal e um modelo de turbulência RNG no problema. Foram simulados para duas configurações de arranjos dos espaçadores: zigue-zague (representação em 2D *woven* parcial) e submerso (representação em 2D da meia camada). Eles observaram que a posição e a distância entre filamentos dos espaçadores desempenham um papel fundamental na distribuição de tensão de cisalhamento, nos coeficientes de transferência de massa e na pressão dentro do canal.

Koutsou, Yiantsios e Karabelas (2004) estudaram a influência dos promotores em simulação utilizando o ANSYS FLUENT v. 6.0.12. Seguiu-se as seguintes configurações: problema 2D, escoamento de entrada do fluxo de alimentação com número de Reynolds variando 70, 90, 110 e 170, condição de não deslizamento e impermeabilidade para superfícies do canal, assim como para os espaçadores, que tiveram um arranjo do tipo submerso. A Figura 2.19 apresenta um dos resultados publicados por esses autores e mostra o campo de distribuição de velocidade no canal estudado para cada número de Reynolds proposto. Percebe-se nos resultados, que quando há um aumento da velocidade de entrada, vai surgindo e intensificando

instabilidades do fluxo próximos às paredes do canal e isso é causado devido à interação da vorticidade lançada pelos cilindros com as camadas de fluxo nas paredes do canal, criando redemoinhos nas paredes. Os autores destacaram no seu trabalho que esses espaçadores cilíndricos têm a capacidade de gerar turbulência com número de Reynolds maior que 60, e as características do escoamento no canal têm uma dependência forte com a velocidade de entrada do fluxo.

Figura 2.19 – Simulação do escoamento com presença de vorticidade no escoamento na aplicação de espaçadores cilíndricos para diversos número de Reynolds, tais como: (a) 70, (b) 90, (c) 110 e (d) 170



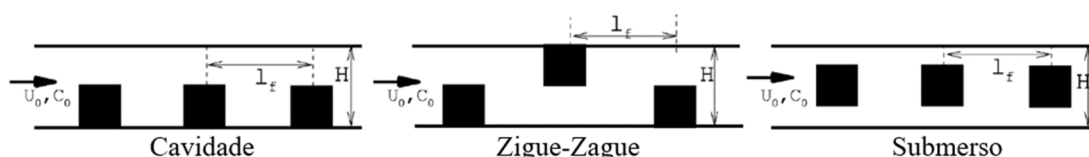
Fonte: Koutsou, Yiantsios e Karabelas (2004).

Ma, Kassinos e Fatta (2006) apresentaram resultados utilizando espaçadores quadrados e quatro tipos de arranjos diferentes: sem espaçadores, submerso, zigue-zague e cavidade, (vide Figura 2.20). Suas simulações foram em 2D com escoamento em regime laminar sob condições presentes ao PSM por osmose reversa, sendo resolvido numericamente empregando o método de elemento finitos com uso do modelo Petrov/Galerkin (SUPG). O objetivo dos autores foi avaliar, para tais situações ditas anteriormente, a acuracidade das simulações, em que foi assumido, como hipótese, a condição de velocidade média do permeado constante para estudar e determinar os perfis de concentração na superfície.

No entanto anteriormente mencionado, os autores concluíram que, embora sempre resulte em variações substancialmente maiores de concentrações na parede, o método da

velocidade constante do permeado é capaz de imitar, quando comparados com outros trabalhos, o padrão geral de variação das concentrações da superfície da membrana em ambas as situações, sem e com espaçadores. Provavelmente, a razão se dá ao fato da velocidade do permeado ser de ordem de grandeza menor do que a velocidade média do fluxo cruzado e a suposição de velocidade de permeado constante seria incapaz de alterar o padrão geral de transferência de massa no canal. No entanto, os erros se tornam maiores quando há contato direto dos espaçadores com as membranas (cavidade, zigue-zague), podendo haver erros maiores que 120%.

Figura 2.20 – Configurações de arranjos dos espaçadores usados por Ma, Kassinos e Fatta (2006)



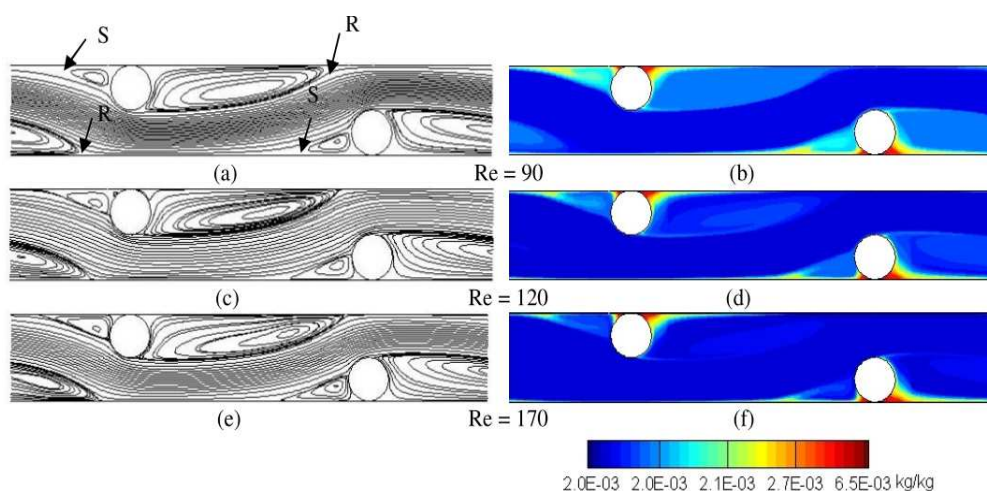
Fonte: Ma, Kassinos e Fatta (2006).

Fimbres-Weihs et al. (2006) conduziram um estudo numérico, utilizando um código comercial CFD ANSYS CFX (versão 10.0) para investigar fluxos bidimensionais e transporte de massa em canais estreitos com espaçadores cilíndricos de configuração em zigue-zague. O diâmetro do filamento e o espaçamento entre filamentos foram dados em função da altura do canal, cujo valores da proporcionalidade foram 0,5 e 4, respectivamente. Para a geometria específica do espaçador, verificou-se que o fluxo se tornou instável no número de Reynolds hidráulicos entre 526 - 841. Os autores também concluíram que a transferência de massa é aumentada em duas regiões que mostram comportamentos distintos: regiões com alta taxa de cisalhamento de parede e regiões onde a direção do fluxo do fluido é normal a paredes da membrana. Eles concluíram que, para as condições estudadas em filtragem de água salobra, dessas duas regiões descritas, a segunda dominou o aumento da transferência de massa.

Nesse contexto de análise do comportamento do escoamento e transferência de massa sob efeitos dos promotores, também se destaca o trabalho de Amokrane et al. (2015), que desenvolveu um modelo transiente para estudar o fluxo e polarização de concentração em canais preenchidos com espaçadores que possuem a configuração de arranjo submerso e zigue-zague. Para as duas configurações estudadas, os principais parâmetros analisados foram em relação aos parâmetros espaciais e temporais.

A Figura 2.21 corresponde aos resultados do campo de velocidades (lado esquerdo) e distribuição da fração mássica do soluto (sal) para diferentes números de Reynolds de entrada, onde R e S representam as zonas de recirculações criadas. Nesses resultados, percebe-se que há um acúmulo de massa de sal nas proximidades do espaçador e superfície da membrana e, segundo Amokrane et al. (2015), isso acontece por causa das zonas de estagnações causadas pela presença dos espaçadores, o que permite o depósito de sais nessas regiões. Observa-se também, que o aumento da velocidade de fluxo (representado pelo acréscimo do número de Reynolds) acima de um determinado nível, não afeta os perfis de concentração de sal de forma significativa. Além disso, perto do contato do filamento com a superfície da membrana, os valores de concentração permanecem praticamente constantes para todos os números de Reynolds estudados. Depois da análise para as duas configurações, o autor sugere que a disposição em zigue-zague é mais desejável para melhorar a dessalinização.

Figura 2.21 – Resultados do campo: (a, c, e) correspondente a velocidade do fluxo e (b, d, f) correspondente fração de massa de sal, para vários números de Reynolds em $t = 1s$; para zigue-zague



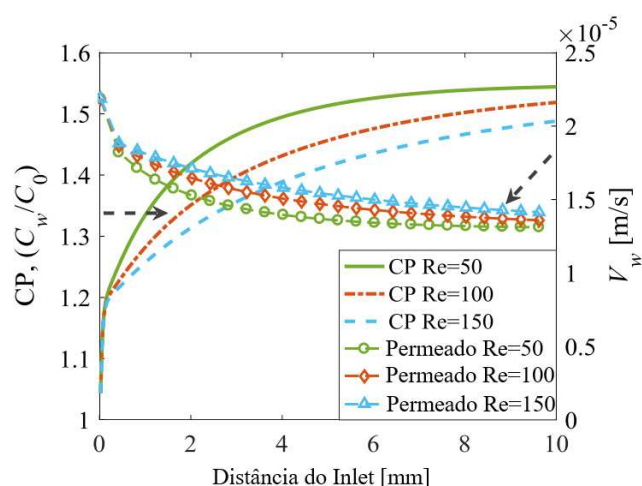
Fonte: Amokrane et al. (2015).

Li et al. (2019) realizaram estudos sobre a influência dos espaçadores na camada de polarização por concentração com a presença do efeito de incrustação inorgânica em um processo de filtração em osmose reversa. Eles utilizaram uma modelagem numérica baseada em *Lattice Boltzmann Method* (LBM), que permite obter soluções das equações de Navier-Stokes e de convecção-difusão, utilizando procedimentos similares a adotadas pelos métodos de elementos finitos e diferenças finitas, como o uso de uma malha com nós, condições de contornos, hipóteses e etc. As geometrias usadas foram de um canal de 1 mm sem e com

espaçadores, onde esses promotores possuem formas circulares de diâmetro de 0,5 mm, variando os arranjos em zigue-zague e cavidade. As paredes dos canais foram tratadas como membranas semipermeáveis com o fluxo normal dado pelo modelo de *Starling-Darcy's law*. Nos resultados, os autores identificaram que um maior potencial de incrustação está perto dos filamentos do espaçador devido a ter regiões de estagnações de fluxo e, assim possuem valores de CP mais altos nessa área. A Figura 2.22 mostra um dos resultados apresentados nesse trabalho, na qual é possível observar o perfil de polarização de concentração e o fluxo permeado ao longo da parede da membrana para números de Reynolds na seção de entrada de 50, 100 e 150 em uma configuração de canal sem espaçadores.

Li et al. (2019) constataram que havia uma relação inversamente proporcional entre a quantidade de concentração e o fluxo. Ademais, notaram que números mais altos de Reynolds provocaram uma redução na camada de polarização e consequentemente um maior fluxo permeado. Destaca-se que esse comportamento também foi verificado por outros autores como, Ahmad et al. (2005a), Anqi, Alkhamis e Oztekin (2015), Ma, Kassinos e Fatta (2006), que utilizaram outros tipos de métodos (elementos e volumes finitos), apresentando uma boa acurácia com o método LBM usado por Li et al. (2019).

Figura 2.22 – Perfil de polarização por concentração e fluxo permeado para diferentes números de Reynolds de entrada



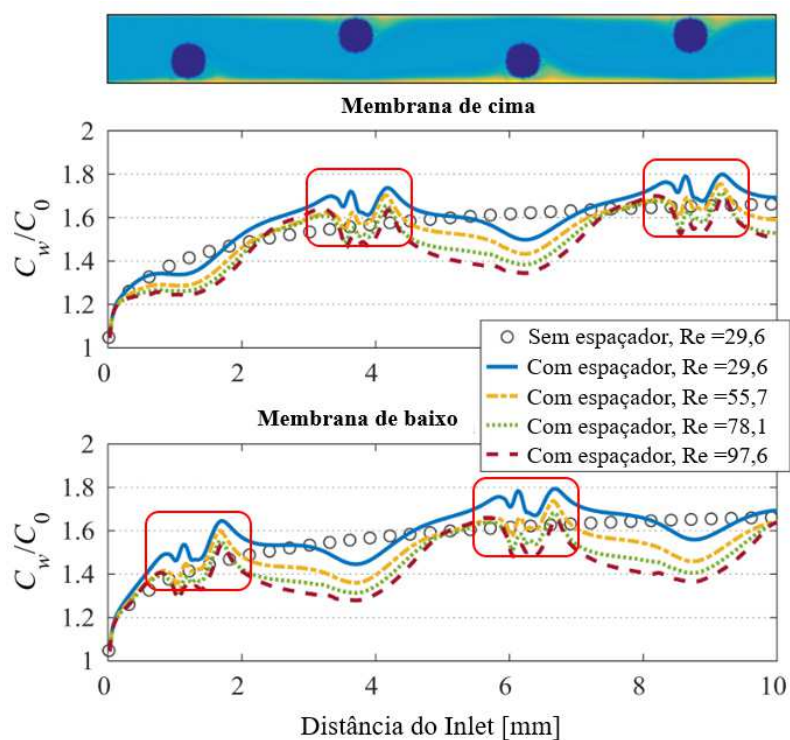
Fonte: Adaptado de Li et al. (2019).

Além disso, Li et al. (2019), também, apresentaram resultados referentes à distribuição da camada polarizada por concentração e ao campo de velocidade no canal de alimentação para casos com geometria contendo uma configuração do tipo zigue-zague com distanciamento de 2,5 mm para cada filamentos e variando o número de Reynolds na seção da entrada do canal.

Os resultados indicam que a polarização de concentração é mais alta perto do canto dos filamentos quando comparado com valores longe dos filamentos. Isso pode ser observado no gráfico da Figura 2.23 nas regiões de picos (em destaque) e comparando com a curva do sem espaçador. Os autores explicam esse efeito se baseando na hipótese de que a velocidade do fluido nas bases dos espaçadores é menor do que a velocidade longe do elemento espaçador (vide Figura 2.24), o que torna esses locais em regiões de estagnações, sendo assim mais susceptíveis a acumular solutos.

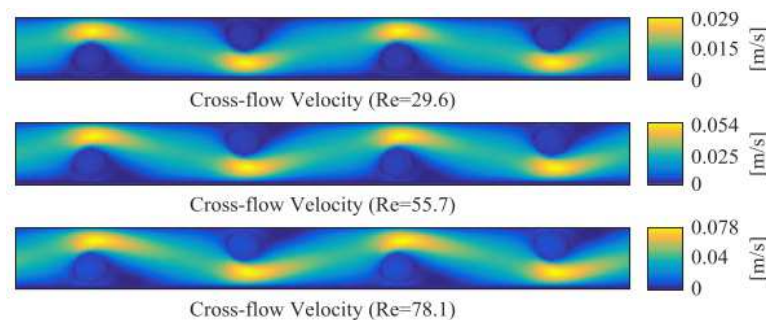
Os mesmos autores concluem que essa modelagem adotada pode ser bastante utilizada para prever os comportamentos da polarização de concentração e campos de velocidades, assim como medir a eficiência dos espaçadores utilizados. Eles ressaltam que o modelo numérico ainda permite analisar, de forma qualitativa, o crescimento de uma camada de incrustação inorgânica sob esses efeitos hidrodinâmicos e de transferência de massa. Entretanto, Li et al. (2019) relatam dificuldades em obter dados de entradas e de adicionar fenômenos como efeitos químicos presentes no processo, o que poderia tornar o modelo ainda mais realístico, caso tivesse esses elementos incorporados.

Figura 2.23 – Perfil de polarização de concentração para arranjo de zigue-zague, condições adotadas por Li et al. (2019)



Fonte: Adaptado de Li et al. (2019).

Figura 2.24 – Campos de velocidades para arranjo de zigue-zague, condições adotadas por Li et al. (2019)



Fonte: Adaptado de Li et al. (2019).

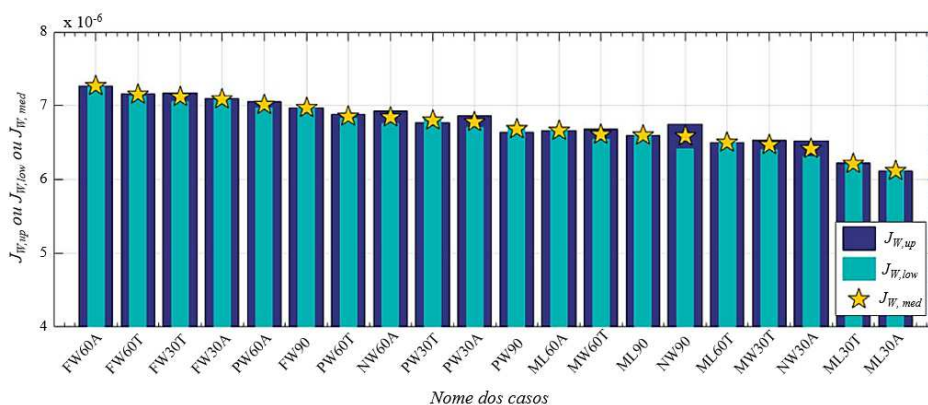
Ranade e Kumar (2006) investigaram o desempenho de diferentes formas de espaçadores no processo de separação por membranas por meio de simulações tridimensionais e compreenderam o seu papel na dinâmica dos fluidos dentro de canais retangulares e curvilíneos (representando um módulo espiral), permitindo verificar a importância da geometria dos canais no escoamento em 3D. Os autores utilizaram o *software* ANSYS FLUENT com uma abordagem da metodologia de célula unitária para minimizar os custos computacionais, além disso os autores consideraram um escoamento estacionário, podendo ser laminar ou turbulento com o modelo $k-\epsilon$. Ademais, foi considerado apenas modelagem hidrodinâmica com variação do número de Reynolds hidráulico entre 50 - 1500.

Os referidos autores concluíram que para as condições propostas e a abordagem utilizada, os resultados com canais planos foram bastantes semelhantes aos canais curvilíneos e que o uso de simulações em 3D com a técnica de célula unitária permite mostrar a importância dos espaçadores no combate do declínio do fluxo permeado. Além disso, mostraram que a geometria desses promotores tem uma influência significativa no campo de escoamento, fato esse destacado em trabalhos que tiveram o uso de simulações em 2D, como Ahmad, Lau e Abu Bakar (2005), Amokrane et al. (2016), Anqi, Alkhamis e Oztekin (2015) e Jeong et al. (2020).

Gu, Adjiman e Xu (2017) analisaram quatro tipos de configurações de espaçadores de alimentação – *nonwoven*, parcial *woven*, meia camada e *woven* completo (Figura 2.9) –, com 20 variações geométricas baseadas em espaçadores comercialmente disponíveis e em ângulos de filamentos selecionados. O impacto da geometria dos promotores de turbulência no desempenho da membrana foi investigado por meio de simulações tridimensionais (3D) através da Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) com abordagem de célula unitária, onde o modelo solução-difusão foi empregado para caracterizar o transporte de água e soluto através de membranas de osmose reversa.

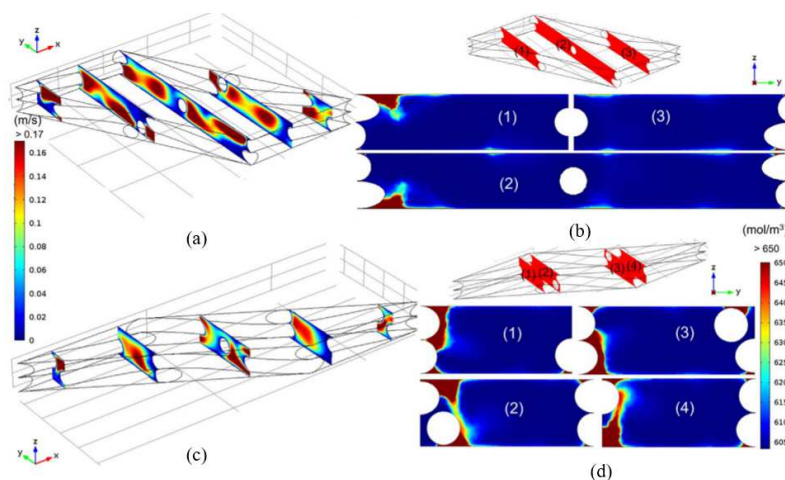
A partir dos resultados de simulação numérica, das condições operacionais e geométricas analisadas, Gu, Adjiman e Xu (2017) concluíram que o arranjo *woven* completo superam as outras configurações de malha no que diz respeito à atenuação da polarização de concentração (CP). Quando projetados com um ângulo de malha entre filamentos de 60°, a rede *woven* completo também proporcionam o maior fluxo de água permeado, enquanto as perdas de pressão são levemente superiores às outras configurações. Por outro lado, os espaçadores com um ângulo de malha de 90° mostram a menor queda de pressão entre todos os arranjos de filamentos examinados. As Figuras 2.25 e 2.26 mostram os resultados obtidos por esses autores.

Figura 2.25 – Comparação dos fluxos médios de água em um canal unitário para diferentes configurações de geometrias de rede espaçadoras



Fonte: Gu, Adjiman e Xu (2017).

Figura 2.26 – Campo de velocidade e contornos de concentração nos planos yz para FW60A (a) e (b); FW30A (c) e (d)



Fonte: Gu, Adjiman e Xu (2017).

Na Figura 2.25 observa-se um gráfico de colunas referente ao fluxo médio da água permeado para cada configuração estudada, onde conclui-se que a configuração *woven* completo com ângulo de 60° (FW60A) foi o que obteve-se o melhor resultado. Já na Figura 2.26 estão representados os campos de velocidade e a distribuição de concentração do soluto no canal de alimentação para essa configuração considerada de melhor resultado e compara com a configuração que apresentou segundo maior fluxo permeado e que possui as mesmas condições de operação com a diferença apenas no ângulo da malha (30 graus). Percebe-se, nessa figura, que há maiores regiões de acúmulo de sais no FW30A quando se compara com FW60A e isso é função do comportamento do escoamento nos canais sob o efeito da geometria da malha dos espaçadores presentes.

Santos et al. (2007) investigaram os efeitos dos promotores no campo de transferência de massa e do escoamento, usando o *software* OpenFOAM CFD para simular condições de fluxo 3D laminar e turbulento, através de canais preenchidos com espaçadores retangulares. Os autores variaram a rede dos espaçadores com um total de 12 configurações, utilizando uma membrana impermeável com concentração constante na sua superfície, e introduziram um fator de atrito modificado para investigar o efeito das condições hidrodinâmicas no canal mediante a tensão de cisalhamento nas paredes. Os autores observaram que a presença e quantidade de filamentos longitudinais nos canais estudados não afetaram significativamente o escoamento do fluxo, indicando que apenas os filamentos transversais influenciam nos padrões de fluxo e na transferência de massa, isso quando a malha está alinhada ao fluxo². Ressalta-se que eles compararam seus resultados computacionais com os experimentais e foi considerado uma excelente concordância entre eles.

Por sua vez, Kavianipour, Ingram e Vuthaluru (2017) desenvolveram simulações com foco em PSM via osmose reversa. Os autores usaram Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) para analisar o comportamento de um escoamento em estado estacionário, tridimensional e com transferência de massa, para comparar quatro configurações de canais com espaçador (*nonwoven*, triplo, *woven* parcial e submerso) e um canal simples sem espaçador. Para avaliar o desempenho do processo, utilizou-se o parâmetro SCE (*Spacer Configuration Efficacy*)³, potência consumida, perda de pressão, entre outras medidas de

² Quando ângulo (α) entre o filamento e o fluxo está a 90° é dito que a malha está alinhada com o fluxo. Para entender melhor esse ângulo veja a Figura 2.10.

³ SCE (*Spacer Configuration Efficacy*) é um parâmetro adimensional usado para analisar a eficiência do espaçador no processo. Esse parâmetro relaciona quantidade de transferência de massa, baseado na capacidade de misturar a solução com a energia necessária no processo. O cálculo da SCE é realizado através de uma razão entre o número de Sherwood (Sh) e o número de potência (Pn).

desempenho. Para modelagem da membrana, foi considerada uma condição de parede, cuja a sua superfície teria uma condição de limite de concentração saturada, logo aplicou-se uma condição de contorno Dirichlet de concentração (35%) do soluto na interface da parede.

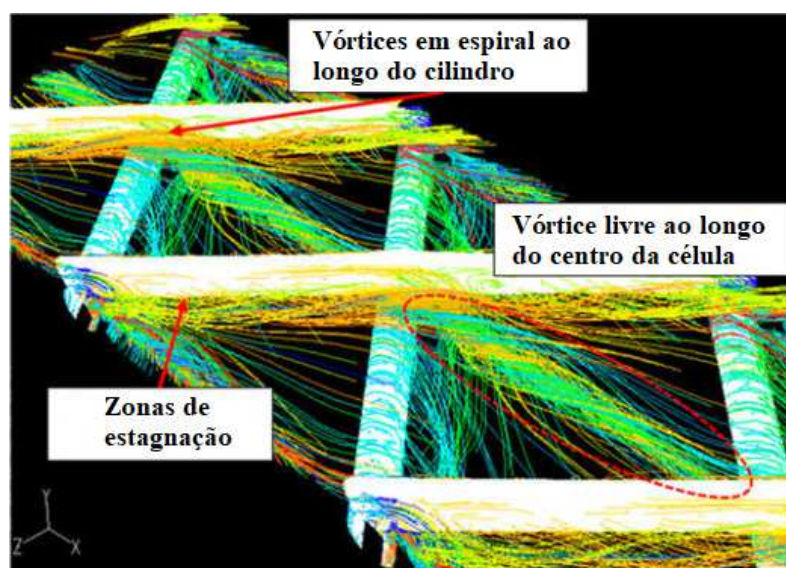
Os resultados do estudo de Kavianipour, Ingram e Vuthaluru (2017) indicaram que a presumida concentração de soluto saturado na membrana afeta fortemente o coeficiente de transferência de massa. Ademais, os autores concluíram que com base no SCE, a configuração da rede dos espaçadores do tipo *woven* parcial mostrou o melhor desempenho para $Re > 120$ entre as geometrias consideradas, enquanto o tipo *nonwoven* foi melhor para $Re < 120$.

Koutsou, Karabelas e Kostoglou (2018) investigaram a influência da espessura da camada de incrustação, variando a sua altura entre 2,5 a 10% do diâmetro do filamento em uma análise com escoamento tridimensional e transiente. Eles utilizaram a abordagem de célula unitária e aplicaram condições de contornos periódicos nos canais que contêm uma rede de espaçadores com configuração do tipo *nonwoven*. Esses autores concluíram que para uma determinada taxa de vazão do fluxo da seção de entrada, a queda de pressão, as tensões de cisalhamento da parede no tempo médio e os coeficientes de transferência de massa aumentam significativamente com o aumento da espessura da camada de incrustação devido à redução da abertura do canal.

Koutsou, Karabelas e Kostoglou (2018) também explicitam que as características qualitativas do campo de fluxo para as condições de variação da camada de incrustação são muito semelhantes às da geometria sem essa camada. As principais características do comportamento do fluxo encontradas incluem um vórtice livre ao longo da diagonal da célula unitária (aproximadamente na direção do fluxo principal), bem como vórtices em espiral e zonas de recirculação a jusante de cada filamento espaçador (vide Figura 2.27). No entanto, é interessante afirmar que a redução da abertura do canal aparentemente tende a estabilizar o fluxo e estender a transição para o fluxo instável para números de Re um pouco maiores.

Por fim, os citados autores disponibilizam inúmeras correlações que relaciona o efeito da espessura da camada de incrustação nas proximidades da superfície da membrana com alguns parâmetros adimensionais, tais como: número de Reynolds, Schmidt, Sherwood, entre outros, que tinha por finalidade foi caracterizar parâmetros importantes na análise de otimização do processo de separação por membranas com canal de alimentação contendo uma malha de espaçadores, como perda de pressão por unidade de comprimento e fator de fricção (KOUTSOU; KARABELAS; KOSTOGLU, 2018).

Figura 2.27 – Resultado do fluxo de escoamento para $h/D = 0,05$, $Re = 193$, plotado por *fluid-particle pathlines*



Fonte: Adaptado de Koutsou, Karabelas e Kostoglou (2018).

O Quadro 2.1 apresenta, de forma resumida, outros trabalhos que estudaram promotores para o processo de dessalinização via separação por membranas.

Quadro 2.1 – Trabalhos que estudaram promotores

(continua)

Autores	Domínio e condições de simulação	Resultados significantes
Schwinge, Wiley e Fletcher (2002)	2D com espaçador circular dispostos em zigue-zague, submerso e cavidade. Simulações feitas variando o Re da entrada entre 100 – 400.	Apresentou o conceito de razão de performance do espaçador (SPMP) e mostrou que o arranjo em zigue-zague teve o melhor resultado de SPMP para os casos estudados.
Amokrane et al. (2016)	2D com espaçadores circular, elíptico e oval dispostos em zigue-zague e com variação da inclinação dos promotores. Teve simulações com faixa de $Re_{entrada}$ entre 100 a 380 e com $\Delta p = 8,103 \times 10^5$ Pa.	Os resultados destacaram que os espaçadores elípticos e ovais geram uma espessura da camada de polarização da concentração maior em comparação com a de um espaçador circular.

Quadro 2.1 – Trabalhos que estudaram promotores (conclusão).*(conclusão)*

Autores	Domínio e condições de simulação	Resultados significante
Li et al. (2005)	3D com arranjos de filamentos circulares torcidos e paralelos entre si. Foi considerado regime laminar, instável, número de $Re_{hidráulico} = 90 - 850$ e, para membrana, condição de parede com concentração do soluto constante.	Os resultados indicaram que o desempenho dos espaçadores com filamentos modificados e fitas torcidas são geralmente piores do que arranjos de filamentos circulares e paralelos entre si.
Lau et al. (2009)	3D com filamentos circulares e paralelos entre si, variando os ângulos dos arranjos. Nas simulações, o escoamento é dado em regime laminar, instável e com $Re_{hidráulico} = 331 - 1160$. A membrana foi tratada como parede permeável e com equação para cálculo da concentração na superfície da membrana	As variações dos ângulos dos arranjos geram diferentes graus de desenvolvimento da concentração e de consumo de energia específico do processo, sendo $\beta = 120$ e $\alpha = 30$ a configuração com melhor performance dentre os casos estudados.

Fonte: Própria do autor.

2.11 Equações de transportes governantes do PSM

Em problemas que envolvam escoamento de fluidos, como no processo de separação por membranas, a caracterização dos fenômenos de transporte se torna essencial na busca para prever o comportamento dos escoamentos dos fluidos. As equações capazes de descrever tal fenômeno são regidas pela conservação de massa, energia, momento linear e angular. Essas equações são denominadas de equações de Navier-Stokes.

Assim, para simular o fluxo de um fluido newtoniano para uma situação próxima a que é encontrada no PSM, são utilizadas as equações da continuidade, Navier-Stokes e de transporte de espécie. Desse modo para fluxo laminar, transiente e tridimensional, essas equações adquirem a seguinte forma (FARRELL, 2008; VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007):

Equação da continuidade

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2.4)$$

Equação do movimento em x

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla(\rho u) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \nabla^2 u + S_{Mx} \quad (2.5)$$

Equação do movimento em y

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla(\rho v) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \nabla^2 v + S_{My} \quad (2.6)$$

Equação do movimento em z

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla(\rho w) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \nabla^2 w + S_{Mz} \quad (2.7)$$

Equação do transporte de espécie

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{U} \cdot \nabla(c) = D \nabla^2 c \quad (2.8)$$

onde u , v e w são os componentes do vetor velocidade (\vec{U}) na direção x , y e z , respectivamente e p é a pressão. A densidade, viscosidade e o coeficiente de difusão do soluto em água são representados nas equações por ρ , μ e D , na devida ordem. O termo fonte (S_M) nas três direções representa as fontes perturbadoras com natureza externa ao meio de estudo, como a gravidade que pode ser considerada como exemplo de efeito externo. Na equação de transporte de espécie percebe-se o parâmetro c , que representa a concentração do soluto no solvente, esse parâmetro é tratado como variável a ser encontrada. Os primeiros termos de cada equação configuram o efeito temporal do sistema e são utilizados quando se analisa o sistema no regime transitório, se for permanente o termo é anulado.

As Equações 2.4 - 2.8 são válidas em todos os pontos no campo de fluxo e requerem condições de contorno específicas do problema para a solução (SAEED, 2012). Elas são de natureza de derivadas parciais (PDE) e possuem soluções analíticas para casos simples. Para geometrias complexas com acoplamento de transferência de massa e modelos para fenômenos

advinda da presença da membrana, essas soluções se tornam inviáveis analiticamente, sobrando a remeter para soluções numéricas, utilizando algum método existente, tais como método de elementos finitos, volumes finitos, diferenças finitas, *Lattice Boltzmann Method* (LBM), entre outras.

Saeed (2012) e Bernales et al. (2013) relatam tal dificuldade de obter as soluções e citam os métodos numéricos como um caminho para resoluções desse problema, mas frisam que se faz necessário o conhecimento prévio das condições de contorno e inicial. A filosofia básica de cada método numérico envolve a transformação das PDEs num sistema de equações algébricas que, depois, é resolvido de forma iterativa por meios de métodos numéricos (SAEED, 2012).

Silva (2012) explicita que as tendências dos trabalhos atuais na área de processo de separação por membranas está em buscar a solução desses modelos complexos, empregando modelagens numéricas capazes de detalhar o comportamento do fluxo e as características locais de concentração em cada região e dentro das membranas. Portanto, com o avanço tecnológico atual, a modelagem numérica se tornou uma alternativa bastante interessante para prever os comportamentos do processo por osmose reversa, pois reduz de maneira drástica os custos, o tempo e os riscos nas operações dos experimentos. Saeed (2012) até cita a tecnologia do CFD como uma ferramenta empregada para solução numérica das equações de continuidade, momento, energia e de espécie, destacando que a maioria dos códigos de CFD existentes se baseia no método de volume finito para a solução de PDE.

Segundo Versteeg e Malalasekera (2007), a dinâmica de Fluidos Computacional (CFD) trata-se de uma técnica poderosa e abrange uma grande variedade de áreas de aplicação industrial e não industrial, que consiste numa análise de sistemas que pode envolver fluxo de fluido, transferência de calor e fenômenos específicos, como combustão. Para França Neta (2009), a fluidodinâmica computacional consiste em solucionar as equações da conservação de massa, energia e movimento capazes de delinear o comportamento do escoamento de um fluido, da transferência de calor e de fenômenos pertinentes às reações químicas.

Para utilizar a dinâmica de fluidos computacional, faz-se necessário seguir algumas etapas, que inicia pelo entendimento do problema físico com a busca de informações importantes sobre os fenômenos existentes, como por exemplo, se é transiente ou estacionário, se há turbulência, o tipo de fluidos e/ou materiais envolvidos, junto com suas propriedades e outras variáveis intrínsecas ao problema. Após essa etapa, a geometria do domínio é gerada, no qual é dividida em vários pequenos volumes discretos, criando, assim, o que é nomeado de malha. Em seguida, são especificadas as condições iniciais e de contornos para auxiliar nas soluções dos PDEs. Por fim, é aplicada uma metodologia algorítmica que regerá os

procedimentos para resolução das equações do problema e, assim, solucioná-los, obtendo uma gama de resultados referentes ao problema.

Os códigos comerciais CFD disponíveis usam diferentes técnicas de solução numérica, das quais se destaca na discretização numérica, os métodos de volumes finitos (FVM). O objetivo da discretização, independentemente do tipo de método, é conseguir um conjunto de equações algébricas oriundas das equações diferenciais de cada elemento finito da malha, que vão relacionar os valores de um determinado ponto (nó) com os valores dos pontos vizinhos (nós vizinhos) referente à malha estudada. Essas equações são linearizadas e são resolvidas sequencialmente para cada variável, usando métodos iterativos, como Gauss Seidel, método LU, escalonamento, dentre outros. No final, é possível conhecer os valores de determinada quantidade, unicamente num número discreto de pontos (SOUSA, 2013).

Diversos trabalhos, como os de Koutsou, Karabelas e Kostoglou (2018), Kavianipour, Ingram e Vuthaluru (2017), Amokrane et al. (2016), Pankaj, Sajikumar e Kaimal (2016) e Saeed (2012) utilizaram o *software* da ANSYS FLUENT para analisar os fenômenos previstos no processo de separação por membrana por osmose reversa. Este software se destaca por ter modelos robustos capazes de prescrever os fenômenos existentes nesse tipo de processo de separação.

2.12 Teoria do transporte em membranas

A maioria das pesquisas na área PSM tem sido direcionada na busca por descrever o comportamento do transporte do fluxo através da membrana e obter a compreensão da sua seletividade, uma vez que há a presença de um alto grau de complexidade nos fenômenos envolvidos nesse meio, quando se busca entender os fatores, efeitos e identificação do grau de relação de importância do fluxo e da seletividade com alguns parâmetros presentes na membrana, como a porosidade, tortuosidade, afinidade química entre o soluto e a estrutura interna da membrana, solubilidade do soluto, mecanismos de formação de cristais e outras propriedades físicas da membrana.

Assim, inúmeros modelos mecanicistas e matemáticos foram desenvolvidos a fim de prever o fluxo do solvente e do soluto através da membrana. Devido à sua variedade, esses modelos costumam ser divididos em três grupos: modelos termodinâmicos irreversíveis, modelos de membrana não porosa ou homogênea e modelos de poros.

2.12.1 Modelos termodinâmicos irreversíveis

Os modelos de membranas baseados no princípio da termodinâmica irreversível tratam a membrana como uma “caixa preta”, onde se assume que os processos relativamente lentos ocorrem perto do equilíbrio e que os fluxos de soluto e solvente estão diretamente relacionados com as diferenças de potencial químico entre os dois lados da membrana, sem a necessidade de conhecer os mecanismos de transporte e a estrutura da membrana (DACH, 2009, MALAEB; AYOUB, 2011). Voutchkov (2013) complementa que esses modelos conseguem descrever o desempenho da membrana por meio de uma função de dissipação que reflete a divisão do campo de fluxo em pequenos sistemas que estão em equilíbrio termodinâmico numa visão local. Levitt (1975) resume que esta teoria é fenomenológica e não mecanicista e que a termodinâmica irreversível revela pouco sobre o mecanismo físico do fluxo osmótico na membrana.

Um dos primeiros modelos práticos baseados na termodinâmica irreversível foi desenvolvido por Kedem⁴ e Katchalsky por volta de 1958 e é conhecido como modelo K-K, que relaciona os fluxos com os componentes fenomenológicos e as diferenças da concentração do soluto e da pressão. As equações regentes desse modelo, Equações 2.9 e 2.10, surgiram partir das simplificações adotadas e aplicadas na função de dissipação advinda do princípio da termodinâmica irreversível; seu detalhamento pode ser encontrado em Soltanieh e Gill (1981) e Ismail, Khulbe e Matsuura (2018).

$$J_w = L_p(\Delta p - \sigma\Delta\pi) \quad (2.9)$$

$$J_s = B\Delta\pi + J_w(1 - \sigma)(c_s)_{Avg} \quad (2.10)$$

onde J_w e J_s são denotados como fluxo do solvente (água) e do soluto (sal), respectivamente. As diferenças de pressão hidráulica e osmótica em toda a membrana são representadas por Δp e $\Delta\pi$, $(c_s)_{Avg}$ é a concentração média do soluto em ambos os lados da membrana. Conforme Williams (2003), esse modelo assume que a concentração da solução de alimentação é igual à concentração da solução de parede da membrana; embora essa hipótese não seja verídica, pois essa concentração está relacionada ao efeito da polarização de concentração, havendo necessidade de aplicar formulações apropriadas que consiga descrever tal fenômeno. Os

⁴ Ora Kedem nascida em Viena em 1924, tornou-se professora de Físico-Química no Instituto de Ciência Weizmann de Israel, onde, juntamente com o físico Aharon Katchalsky publicou renomado trabalho sobre a análise do comportamento das biomembranas no âmbito da termodinâmica de processos irreversíveis. Ela recebeu prêmio Israel de ciência em 1961 e foi incorporada a Academia Nacional de Engenharia em 2005.

parâmetros L_P , B , σ são funções baseados nos componentes fenomenológicos do problema abordado e são chamados de coeficiente mecânico de filtração, permeabilidade do soluto para fluxo volumétrico igual a zero e coeficiente de reflexão, respectivamente. Esses coeficientes podem ser determinados experimentalmente quando as condições impostas ao sistema atingem um fluxo permeado igual a zero.

No trabalho de Kedem (1961) conceitua a permeabilidade do soluto como sendo um parâmetro que possui uma relação inversamente proporcional à soma dos coeficientes de fricções entre as moléculas do solvente e entre a estrutura da membrana. Ele explica que a natureza desse efeito não se resume a ações viscosas, mas a qualquer natureza que venha a causar efeitos restritivos ao movimento natural do soluto. O próprio autor formula a Equação 2.11 para a permeabilidade do soluto (B) baseando-se na Equação 2.10 e na condição experimental de fluxo permeado igual a zero.

$$B = \frac{K}{\Delta x (f_{sw} + f_{sm})} \quad (2.11)$$

sabendo que f_{sw} e f_{sm} são os coeficientes de fricção entre o soluto com a água e com a matriz da membrana, respectivamente. A espessura da membrana é dada por Δx e K representa o coeficiente de distribuição médio, definida por Kedem (1961).

Para o coeficiente de reflexão (σ), Kedem (1961) citou os casos extremos para explicar o conceito físico desse parâmetro e mostrou que há uma vínculo relativo com a seletividade da membrana, ou seja há uma relação com a capacidade de rejeição do soluto, onde σ varia entre zero e um, sendo $\sigma = 1$ considerado ideal, não havendo fluxo do soluto na membrana e a membrana é conceituada como semipermeável. A determinação do coeficiente de reflexão é bastante discutida por vários autores, que tentam caracterizá-lo, associando-o com as características da membrana, componentes da solução e condições de trabalho. Por conta disso, há diversas equações que buscam relacionar o coeficiente de reflexão com outras variáveis do sistema, principalmente com o parâmetro de rejeição (R), como a Equação 2.12 sugerida por Pusch (1977).

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{\sigma} + \left(\frac{L_\pi}{L_P} - \sigma^2 \right) \left(\frac{L_P \pi_F}{\sigma J_w} \right) \quad (2.12)$$

Sabendo que L_π é a permeabilidade osmótica da membrana e π_F é a pressão osmótica do fluxo de alimentação.

Segundo Soltanieh e Gill (1981), os coeficientes fenomenológicos (L_P , B e σ) do modelo de Kedem – Katchalsky são dependentes da concentração e há, para alta diferença de concentração na membrana, uma invalidação das leis lineares postuladas por Onsager, que foram utilizadas no desenvolvimento do modelo K-K. Essas desvantagens podem limitar o uso desse modelo para modelagens de membrana osmose reversa que apresentam alta diferença de concentração e de pressão no fluxo de alimentação.

A fim de remover essas desvantagens, surgiu o modelo de Spiegler e Kedem, que descreve as leis lineares a nível local e não para a membrana como o todo. Desse modo, através da aplicação da derivação, esse modelo consegue descrever os fluxos locais do solvente e do soluto por meio das Equações 2.13 e 2.14, respectivamente.

$$J_w = -P_w \left(\frac{dp}{dx} - \frac{d\pi}{dx} \right) \quad (2.13)$$

$$J_s = -P_s \frac{dc_s}{dx} + (1 - \sigma)J_w c_s \quad (2.14)$$

x é a coordenada perpendicular a membrana, c_s é a concentração local da membrana e P_w e P_s são as permeabilidades locais do solvente e do soluto.

Considerando como hipóteses, fluxos e coeficientes fenomenológicos constantes, as Equações 2.13 e 2.14 podem ser integradas e rearranjadas numa versão simplificada para os fluxos (Equação 2.15 e 2.16) e, por fim, definir rejeição real do soluto (R) (Equação 2.17) (AHMAD; LAU, 2007; HIDALGO et al., 2013, 2019; SOLTANIEH; GILL, 1981; ZOUHRI et al., 2018).

$$J_w = \frac{P_w}{\Delta x} (\Delta p - \sigma \Delta \pi) \quad (2.15)$$

$$J_s = P_s (c_{sf} - c_{sp}) + (1 - \sigma)J_w c_s \quad (2.16)$$

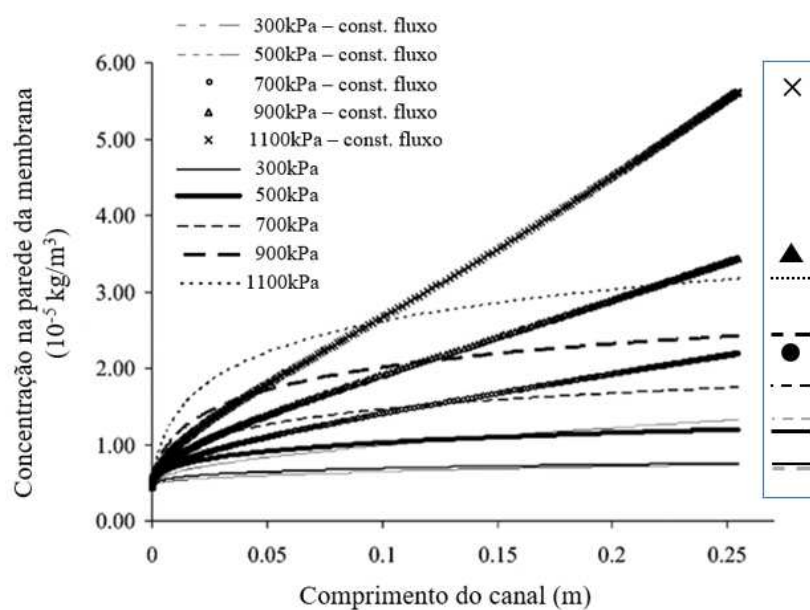
$$R = 1 - \frac{1 - \sigma}{1 - \sigma e^{-\frac{(1-\sigma)J_w}{P_s}}} \quad (2.17)$$

onde c_{sf} e c_{sp} corresponde a concentração no canal de alimentação e no permeado.

O modelo de Spiegler e Kedem estão sendo amplamente usadas para descrever e analisar processos de separação via osmose reversa (RO) e nanofiltração (NF) (DACH, 2009; QASIM et al., 2019; WILLIAMS, 2003), assim como o modelo K-K, guardadas as limitações.

Ahmad e Lau (2007) utilizaram o modelo de Spiegler e Kedem nas suas simulações PSM, na qual, em um dos resultados (Figura 2.28), os autores perceberam que o comportamento da camada de concentração polarizada é afetada ao se adotar diferentes pressões aplicadas e, também, é influenciada pela forma de calcular o fluxo permeado, se é considerando fluxo constante ou usando o modelo de Spiegler e Kedem. Percebe-se que o modelo causou um achatamento nas curvas enquanto os resultados com base no fluxo constante têm uma tendência de um comportamento linear.

Figura 2.28 – Curvas de concentração ao longo da superfície da membrana com uso do modelo Spiegler e Kedem e fluxo constante



Fonte: Adaptado de Ahmad e Lau (2007).

2.12.2 Modelos de membrana não porosa ou homogênea

Os modelos mecanicistas assumem um determinado tipo de mecanismo de transporte para relacionar o desempenho da membrana com as propriedades físicas e químicas da membrana e dos solutos (WANG et al., 2014). O modelo de membrana não porosa ou homogênea é um desses modelos mecanicistas, o qual assume que as membranas não possuem poros reais visíveis (membrana densa), no entanto há o transporte da solução do lado de alta

para baixa concentração do soluto da membrana por mecanismos de convecção e/ou difusão entre os espaços intersticiais das cadeias poliméricas de forma aleatória. O transporte de água através das membranas apresentam três etapas: (1) adsorção de moléculas de água na superfície da membrana; (2) convecção e difusão através da membrana; e (3) dessorção do lado do permeado da superfície da membrana (VOUTCHKOV, 2013).

Segundo Voutchkov (2013), para esse grupo de modelos, o processo de transporte de sal (soluto) é impulsionado pelo gradiente de concentração entre os dois lados da membrana e pela capacidade da membrana de retenção de soluto por meio da exclusão de tamanho da molécula e de carga (dielétrica). Esse autor cita que as moléculas não carregadas (solutos ou sais) são rejeitadas pela membrana devido à sua capacidade de agir como uma peneira para moléculas maiores do que o seu ponto de corte molar (MWCO⁵).

Os modelos não porosos ou homogêneos mais comuns incluem solução-difusão (SD), o modelo solução-difusão estendido (ESD), e o modelo solução-difusão-imperfeição (SDI).

Um dos modelos mais usados para caracterização de uma membrana de osmose reversa é o modelo solução-difusão (SD), proposto por Lonsdale, Merten e Riley (1965). O modelo assume que água e sal se dissolvem e se difundem através da membrana de uma forma desacoplada (BOUDMAR, 1991), desse modo, havendo apenas o mecanismo transporte por difusão no processo. Matematicamente o modelo SD para a caracterização do fluxo da água e do soluto é dado pelas Equações 2.18 e 2.19 (BAKER, 2004; QASIM et al., 2019; SOLTANIEH; GILL, 1981), em que essas equações têm sua origem na lei de Fick (WILLIAMS, 2003).

$$J_w = A(\Delta p - \Delta \pi) = \frac{c_{wm} D_{wm} \bar{V}_w}{\Delta x R_c T} (\Delta p - \Delta \pi) \quad (2.18)$$

$$J_s = B(c_{sm} - c_{sp}) = \frac{D_{sm} K_s}{\Delta x} (c_{sm} - c_{sp}) \quad (2.19)$$

onde c_{wm} é a concentração da água na membrana e \bar{V}_w é o volume molar do solvente. R_c e T representa a constante universal e a temperatura absoluta. Já as difusividades do solvente e soluto na membrana estão concebidas a D_{wm} e D_{sm} , assim como A e B suas respectivas permeabilidades.

⁵ MWCO (*Molecular weight cut-off*) – É um parâmetro representativo do tamanho médio das moléculas que podem ser retidas por uma determinada membrana e está relacionada com a rejeição de uma dada massa molecular de um soluto.

Baseado nesse modelo SD, a rejeição do sal (R) pode ser determinada pela seguinte equação (WANG et al., 2014).

$$R = \frac{J_w}{J_w + B} \quad (2.20)$$

O modelo de transporte baseado no modelo SD com aplicação dos efeitos polarização de concentração por meio de um equacionamento, tem sido empregado com êxito para prever resultados de fluxos em diversas condições introduzidas no sistema, com possibilidade de averiguar e entender os fenômenos ocorrido durante o processo.

Cséfalvay, Pauer e Mizsey (2009) e Wang et al. (2014) citam que o modelo de solução-difusão é largamente utilizado para prever o desempenho de membranas em aplicações de tratamento de água como NF e RO, bem como diálise, separações de gás e pervaporação. No entanto, Soltanieh e Gill (1981) indicam que esse modelo está limitado a membranas com baixo teor de água, nas quais o fluxo de poros pode ser negligenciado. Outros autores citam alguns efeitos que podem destoar os resultados simulados com os reais, tais como imperfeições na camada da membrana, fluxos de poros por mecanismos de convecção e interações soluto-solvente-membrana.

Em busca de suprir os fatores limitantes do modelo SD, Burgoff e seus coautores, em 1980, otimizaram esse modelo adicionando o efeito da pressão na equação de transporte do soluto. Tal efeito foi negligenciado por apresentar uma boa aproximação em solutos inorgânicos, algo diferente quando se trabalha em solutos orgânicos, devido à sua dependência da pressão na descrição do potencial químico do soluto. Assim o modelo ESD sugere alterar a Equação 2.19 para seguinte forma (QASIM et al., 2019):

$$J_s = B(c_{sm} - c_{sp}) + l_{sp}\Delta p \quad (2.21)$$

onde é o parâmetro da pressão induzida ao soluto na membrana.

Baseado no modelo ESD, é possível determinar a rejeição do soluto que a membrana consegue exercer.

$$\frac{1}{R} = 1 + \frac{B}{A(\Delta p - \Delta\pi)} \quad (2.22)$$

Esse modelo mostrou boa acurácia para diversos solutos, principalmente os orgânicos que permeava em membranas de acetato de celulose (BURGHOFF; LEE; PUSCH, 1980).

Todavia, assim como o modelo SD, o ESD também não consegue introduzir os efeitos advindos das imperfeições (poros) nas estruturas das membranas devido ao processo de síntese (QASIM et al., 2019). A fim de adicionar esse efeito no modelo SD, Sherwood, Brian e Fisher (1967) desenvolveram o modelo solução-difusão-imperfeição (SDI), no qual considera essas pequenas imperfeições ou defeitos (poros) vindas do processo de construção da membrana e que o solvente ou soluto podem fluir através deles sem a necessidade da presença do gradiente de concentração no local. Assim, segundo Jonsson e Macedonio (2010) o modelo SDI inclui fluxo de poros, bem como difusão de soluto e solvente através da membrana e pode ser considerado um combinação entre solução-difusão e modelos porosos. Dessa forma, baseado no modelo SDI, os fluxos do soluto e do solvente pode ser dado pelas Equações 2.23 e 2.24.

$$J_w = A(\Delta p - \Delta\pi) + K_1\Delta p \quad (2.23)$$

$$J_s = B(c_{sm} - c_{sp}) + K_1\Delta p c_{sm} \quad (2.24)$$

sendo que K_1 é um parâmetro de acoplamento para transporte do fluxo do poro.

A rejeição do soluto pela membrana baseada no modelo SDI pode ser dado pela Equação 2.25.

$$\frac{1}{R} = 1 + \frac{B}{A(\Delta p - \Delta\pi)} + \frac{K_1\Delta p}{A(\Delta p - \Delta\pi)} \quad (2.25)$$

Dijkstra et al. (2006) e Fierro et al. (2012) tiveram êxito no uso do modelo SDI, pois mostraram excelentes ajustes de dados experimentais com os do modelo. Entretanto, o modelo possui duas limitações: tem três parâmetros que necessitam ser encontrados usando a técnica de regressão não linear com a finalidade de caracterizar o sistema de membrana; e o modelo tem parâmetros que são dependentes da concentração e pressão de alimentação do sistema (SOLTANIEH; GILL, 1981).

2.12.3 Modelos de poros

Os modelos de poros ou estrutural são considerados como modelos mecanicistas, em que consideram a membrana composta por poros na forma cilíndrica e o fluxo permeado governado pelos mecanismos de transporte convectivo e difusivo, no qual há uma interação

entre o soluto e as paredes dos poros. Esses modelos conseguem implementar efeitos causados por várias características mecânicas e físicas da estrutura interna da membrana e da solução, como porosidade, formato geométrico do poro, diâmetro do soluto, tortuosidade, solubilidade entre o soluto e solvente.

Para as membranas NF e RO, esses modelos não consideram a existência física visível de poros com geometrias bem definidas, ao contrário, as membranas podem ser caracterizadas por um tamanho de poro equivalente que se aproxima do obstáculo no transporte de soluto causado pela complexa microestrutura polimérica destas membranas (BOWEN; MOHAMMAD, 1998). Nessa mesma linha, Gregor e Gregor (1978) explicam que a membrana de osmose reversa não tem poros definíveis, apenas espaços entre fibras poliméricas, onde um pequeno volume de água pode ser absorvido. Esses espaços citados podem ser modelados como poros e, assim, validando o uso dos modelos pertencente a esse grupo.

Um dos modelos de poros comumente usados para caracterização de membranas osmose reversa e nanofiltração é o modelo de Finamente-Poroso (FP) desenvolvido por Merten em 1966 e, posteriormente otimizada por Jonnson e Boesen em 1975. Este modelo assume que o transporte de água ocorre por fluxo viscoso através de poros uniformes da membrana e que o transporte de soluto ocorre tanto por difusão como por convecção nesses poros (WILLIAMS, 2003). Pusch (1977) complementa explicitando que, teoricamente, esse modelo trata o transporte de solutos através da membrana por meio de troca iônica, utilizando a equação de Nernst-Planck e que este modelo, supõe-se que a membrana contém pequenos poros de diâmetro inferior a 50 Å. O modelo FP é fundamentado numa análise unidimensional do balanço entre as forças externas e as das fricção atuantes do soluto no poro da membrana de raio r_p e comprimento $\tau\delta$. Baseado nessa fundamentação, Merten conseguiu descrever o fluxo do soluto total através da Equação 2.26 e, é possível encontrar o procedimento para o desenvolvimento dessa equação nos trabalhos de Ismail, Khulbe e Matsuura (2018) e Soltanieh e Gill (1981).

$$J_s = \left(-\frac{R_c T}{f_{sw} b} \right) \frac{dc_s}{dx} + \frac{c_s u}{b} \quad (2.26)$$

onde u é a velocidade local no centro de massa do fluido do poro, que pode ser determinado pela lei de Poiseuille. O parâmetro b é um fator definido como uma medida de atrito entre as moléculas do soluto e a constante da parede do poro da membrana e é dado pela Equação 2.27.

$$b = 1 + \frac{f_{sm}}{f_{sw}} \quad (2.27)$$

Baseado nesse modelo, a equação de rejeição do sal (R) pode ser caracterizado pela Equação 2.28.

$$R = 1 - \frac{k'_s e^{\left(\frac{uxf_{sw}b}{bR_cT}\right)}}{k''_s - b\epsilon + b\epsilon e^{\left(\frac{u\tau\delta f_{sw}b}{bR_cT}\right)}} \quad (2.28)$$

sendo que k'_s e k''_s são os coeficientes de partições no canal de alimentação e permeado, respectivamente. O parâmetro ϵ representa a porosidade da membrana.

Tratado como extensão do modelo FP, o modelo poroso de Fluxo de Poros de Força Superficial (SFPF) analisa o fenômeno de transporte em membrana de osmose reversa na forma bidimensional, com direções axiais e radiais. Qasim et al. (2019) afirma que este modelo considera a membrana como estrutura microporosa composta por cilindros perfeitos nos quais se admite que a velocidade e concentração do soluto variam tanto no sentido radial como no sentido axial. Entretanto, Mehdizadeh e Dickson (1989) relata que o modelo SFPF empregava o equilíbrio material de forma errônea, pois a função potencial no poro era inconsistente para geometria cilíndrica e que a concentração do soluto no interior do poro é igual ao do permeado. Esses mesmos autores propuseram correções e desenvolveram o modelo denotado de Fluxo de Poros de Força Superficial Modificado (MSF-PF), que caracteriza a média dos fluxos dos solutos e do solvente nos poros pelas as Equações 2.29 e 2.30, respectivamente.

$$\bar{J}_w = 2 \left(\frac{c_s R_c T}{\tau \delta f_{sw}} \right) \int_0^1 \alpha(\chi) \chi d\chi \quad (2.29)$$

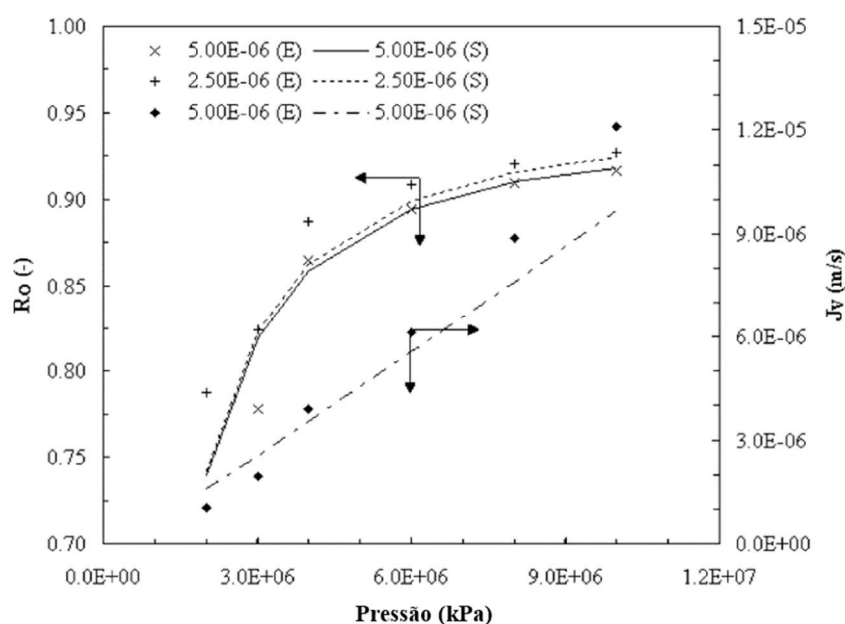
$$\bar{J}_s = 2 \left(\frac{1}{\tau \delta f_{sw}} \right) \int_0^{1-\frac{r_s}{r_p}} \frac{\alpha(\chi)}{b(\chi)} \left(\pi_2 + \frac{\pi(c_{sm}) - \pi(c_{sp})}{e^{\alpha(\chi)} - 1} \right) e^{-\mathcal{O}(\chi)} \chi d\chi \quad (2.30)$$

sabendo que χ é uma variável adimensional que representa a distância radial em qualquer ponto do poro pelo seu raio ($\chi = r/r_p$), r_s é o raio do soluto, podendo ser calculado pela equação de Stokes, $\tau\delta$ é o comprimento do poro, \mathcal{O} representa o potencial da parede de superfície, $\alpha(\chi)$ é o perfil de velocidade adimensional, $b(\chi)$ é o parâmetro de fricção adimensional.

Devido à complexidade das equações diferenciais do modelo MSF-PF, são necessárias técnicas numéricas para a obtenção da solução, tais como o esquema de colocação ortogonal, volumes finitos, elementos finitos, entre outros. Segundo Wang et al. (2014) cita que a fim de empregar o modelo MSF-PF, o próprio Mehdizadeh et al. recomendou uma metodologia detalhada para resolver o sistema de equações, além disso ele constatou que os resultados da simulação de MSF-PF foram consistentes com a performance da membrana RO e que a rejeição da membrana aumenta com a redução do tamanho dos poros, incrementando a pressão de operação e a concentração de soluto de alimentação.

A Figura 2.29 apresenta comparações entre simulado, usando o modelo MSF-PF, com dados experimentais de rejeição e de fluxo permeado em função da pressão, com variação no fluxo de alimentação de 5×10^{-6} e $2,5 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$. Esse resultado obtido por Jain e Gupta (2004), permitiu concluir que os resultados tem uma boa concordância com os dados experimentais, no entanto, as rejeições previstas foram ligeiramente melhores que os resultados do fluxo.

Figura 2.29 – Efeito da pressão na taxa de rejeição e fluxo para o sistema NaCl-H₂O com taxa de fluxo (m^3/s), onde 'S' representa os resultados simulados e 'E' as observações experimentais



Fonte: Adaptado de Jain e Gupta (2004).

Apesar desses resultados, os modelos SFPF e MSF-PF tem suas aplicações limitadas, pois não preveem adequadamente o fluxo de água quando diluído em alguns produtos orgânicos e, além disso, necessita que o raio dos poros seja reduzido, a fim de forçar uma aproximação do fluxo de água prevista com os dados obtidos em sistemas reais (WANG et al., 2011).

2.13 Teoria do filme: Modelo para Polarização de concentração

A grande maioria dos modelos de transporte na membrana citados no tópico 2.12 necessitam serem acoplados a algum modelo que descreva o fenômeno de polarização de concentração para que consigam ter resultados mais consistente em comparação com os dados experimentais. Isso se faz necessário, pois esses modelos precisam ser alimentados por variáveis, que são influenciados por esse fenômeno, como por exemplo o perfil de concentração na superfície da membrana do lado do canal de alimentação.

Como mencionado no tópico 2.7, a polarização de concentração é um fenômeno intrínseco e maléfico ao processo de separação por membrana, que causa diversos efeitos negativos a performance do processo, principalmente em processos que envolve osmose reversa, onde os efeitos são considerados altamente indesejáveis e mais sensíveis quando comparado a outros processos de mesma natureza. Os principais efeitos adversos da polarização de concentração estão caracterizados pela diminuição do fluxo de permeado, aumento a resistência hidráulica e a diminuição da força motriz da pressão efetiva através da membrana (FRITZMANN et al., 2007; KUCERA, 2015). Além disso, devido ao aumento da quantidade de soluto na superfície da membrana, a polarização de concentração contribui com o incremento no fluxo do soluto através da membrana (FRITZMANN et al., 2007), que, muitas vezes, pode danificar até a estrutura interna da membrana. A severidade da polarização de concentração é governada pelas propriedades do soluto, características da membrana e pela hidrodinâmica do processo, como condições de fluxo, pressão e geometria do canal de fluxo (SABLANI et al., 2001; SALCEDO-DÍAZ et al., 2014). Assim, esse fenômeno consegue ser influente no processo, e como foi dito, é dependente de vários fatores, o que tornam necessários estudos numéricos que consigam replicar os efeitos físicos reais de forma consistente e por isso, existe diversos modelos desenvolvidos com objetivo de caracterizar tal fenômeno.

Dentre esses modelos, pode-se destacar a teoria do filme, por ser um modelo simples e que permite, para osmose reversa, caracterizar a origem e o significado do fenômeno da polarização de concentração (BAKER, 2004; SILVA, 2012).

A teoria do filme simplifica um complexo problema de transporte para um problema de transferência de massa unidimensional, onde assume-se o fluxo convectivo axial do soluto próximo à superfície da membrana como insignificante (KIM; HOEK, 2005). Essa teoria, também, admite que, durante o processo de filtração, a concentração de soluto na interface membrana/solução aumenta gradualmente até atingir o regime permanente (BAKER, 2004;

MULDER, 1996). Baseado nessas hipóteses e na Figura 2.30, é feito o balanço de massa de convecção/difusão unidimensional (Equação 2.31) na camada polarizada para caracterizar o gradiente da concentração nessa região de interface membrana/solução.

$$J_w c(x) + D \frac{dc}{dx} = J_w c_{sp} \tag{2.31}$$

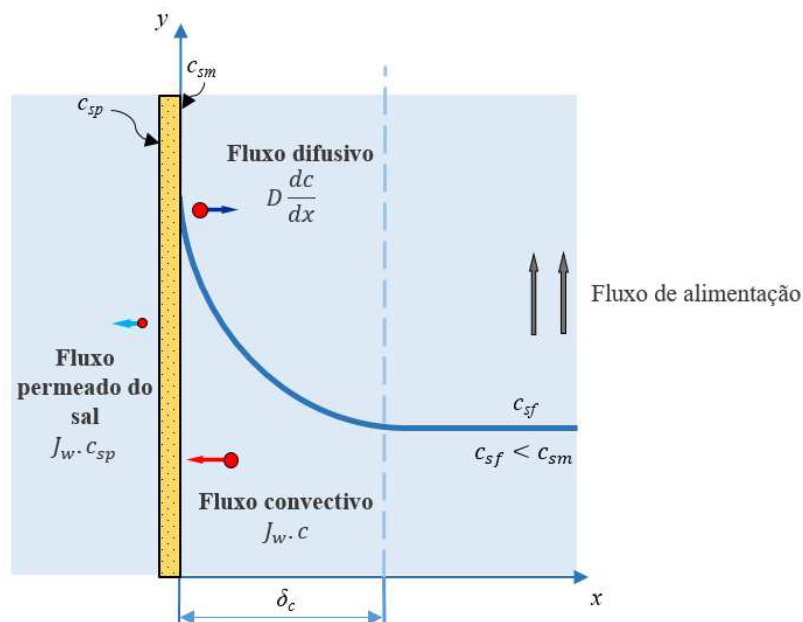
Utilizando as condições de contorno mostrada na Figura 2.30, $x = 0 \rightarrow c = c_{sm}$, e na região em que a concentração não difere da solução da alimentação, $x = \delta_c \rightarrow c = c_{sf}$, foi possível integrar a Equação 2.31, resultando na equação do modelo do filme:

$$\frac{c_{sm} - c_{sp}}{c_{sf} - c_{sp}} = \exp\left(\frac{J_w}{k_m}\right) \tag{2.32}$$

$$k_m = \frac{D}{\delta} \tag{2.33}$$

onde k_m é o coeficiente de transferência de massa.

Figura 2.30 – Esquematização da polarização de concentração



Fonte: Própria do autor.

Para um fluxo laminar totalmente desenvolvido em um canal retangular fino, a espessura da camada de filme pode ser estimada pela equação (KIM; HOEK, 2005).

$$\frac{\delta(y)}{y} = 1,475 \left(\frac{h}{y}\right)^{2/3} \left(\frac{D}{u_{max}h}\right)^{1/3} \quad (2.34)$$

onde y é a coordenada longitudinal, h é a metade da altura do canal de alimentação e u_{max} representa a velocidade máxima do fluxo no centro do canal.

Inúmeras correlações foram desenvolvidas com intuito de determinar o coeficiente de transferência de massa ao longo da superfície da membrana. Percebeu-se que essa variável era bastante influenciado pela geometria do canal e pela sua hidrodinâmica, assim na Tabela 2.2, retirado do trabalho de Wang et al. (2014), mostra algumas correlações para diferentes tipos de canais em função dos parâmetros adimensionais de Sherwood (Sh), Reynolds (Re), Schimdt (Sc) e Peclet (Pe).

Tabela 2.2 – Correlações para determinação do coeficiente de transferência de massa para diferentes geometrias

Geometria do canal	Regime Laminar ($Re < 2000$)	Regime turbulento ($Re > 2000$)
Canais retangulares finos sem espaçadores	$Sh = 1,85 \left(Re Sc \frac{d_h}{L} \right)^{1/3}$	$Sh = 0,04 Re^{0,75} Sc^{0,33}$
Tubo	$Sh = 1,62 \left(Re Sc \frac{d_h}{L} \right)^{1/3}$	$Sh = 0,023 Re^{0,83} Sc^{0,33}$
Sistema com fluxo cruzado radial	$Sh = 1,05 \left(Re Sc \frac{h}{R_A} \right)^{1/3}$	$Sh = 0,275 \left(Re^{1,75} Sc \frac{2h}{L} \right)^{1/3}$
Célula agitada	$Sh = 0,23 Re^{0,567} Sc^{0,33}$	$Sh = 0,03 Re^{0,66} Sc^{0,33} Pe_t^{0,16}$
Canais retangulares com espaçadores	$Sh = 0,46 (Re Sc)^{0,36}$	$Sh = 0,0096 Re^{0,5} Sc^{0,6}$

Fonte: (WANG et al., 2014)

onde L e h são o comprimento e a altura do canal, d_h é o diâmetro hidráulico, u_0 é a velocidade do fluxo cruzado e R_A é o raio do canal do fluxo. Os parâmetros adimensionais podem ser dados pelas seguintes equações.

$$Sh = \frac{k_m d_h}{D} \quad (2.35)$$

$$Re = \frac{u_0 d_h \rho}{\mu} \quad (2.36)$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D} \quad (2.37)$$

$$Pe_t = \frac{J_w h}{D} \quad (2.38)$$

O coeficiente de difusão (D) é uma variável intrínseco da relação entre o soluto e o meio (solvente). A Equação 2.39 pode ser usado para calcular esse coeficiente, no qual apresenta uma relação baseada com a temperatura da solução (T), a viscosidade dinâmica do meio (μ) e o raio da partícula a ser permeada (r_s).

$$D = \frac{kT}{a\pi\mu r_s} \quad (2.39)$$

Pode-se assumir valor de r_s , para o caso água e sal, igual a $9,554 \times 10^{-10}$ m (LIDE, 2003). O parâmetro k é a constante de Boltzmann e a é um variável ligada as partículas do soluto e solvente.

Pelas equações, pode-se analisar formas de como reduzir essa espessura da camada limite polarizada. Uma forma simples seria aumentar a velocidade do escoamento na superfície. Outras formas para reduzir estão, na maioria das vezes, interligadas no efeito de geração de escoamentos secundários através de fatores geométricos dos módulos de permeação, no emprego de escoamento pulsante sobre a superfície da membrana, na presença de corrugações em sua superfície e na inserção de promotores de turbulência para geração de vórtices. Fato esses relatados por Baker (2004), Mulder (1996), França Neta (2009) e Usta, Anqi e Oztekin (2017).

2.14 Determinação do coeficiente de reflexão

Nos estudos de processos de separação por membranas, o coeficiente de reflexão está presente em várias equações de transporte e desempenha um papel crucial para determinação da performance do processo, por causa da sua alta correlação com os parâmetros referentes a rejeição do soluto na membrana. Devido a esse fato, muitos trabalhos como de Ahmad e Lau (2007), Boussouga e Lhassani (2017) e Dach (2009), utilizam métodos de ajustes de curvas em gráficos Rejeição *versus* Fluxo permeado para encontrar, de forma experimental, valores do coeficiente de reflexão.

No trabalho de Dach (2009), o autor, ao analisar a equação de Spiegler e Kedem (Equação 2.14), relata que o coeficiente de reflexão (σ) é característico do transporte convectivo do soluto, no qual o valor unitário (100%) significa que o transporte convectivo do soluto é totalmente dificultado ou que não ocorre nenhum transporte por convecção, este é o caso hipotético das membranas RO ideais onde não há poros. Nesse contexto, Ismail, Khulbe e Matsuura (2018) complementa afirmando que o coeficiente de reflexão quantifica o grau de imperfeição de uma membrana semipermeável, com variação entre 1 (um) e 0 (zero), onde para $\sigma = 1$ representa 100% de rejeição do soluto na membrana e para $\sigma = 0$ quando não há rejeição do soluto, ou seja, o soluto passa livremente na membrana.

Além do uso de ajustes de curvas experimentais para determinação do coeficiente de reflexão, existem diversos modelos teóricos que tentam relacionar as propriedades da membrana e do soluto com esse coeficiente. Uso dos modelos teóricos traz como vantagem a diminuição da dependência de procedimentos experimentais e, assim, diminuição de gastos e tempo de análise, pois vários experimentos são necessários para caracterizar o comportamento desse coeficiente em uma determinada membrana e sob diversas condições de trabalho, principalmente no que diz respeito a pressão e a concentração de processo.

Um dos primeiros modelos teóricos para a determinação do coeficiente de reflexão foi proposto por Manning, em 1968, onde foi utilizado uma base hidrodinâmica em que o transporte de solvente é realizado no estado permanente através de uma membrana, assumindo que o seu efeito seja equivalente ao de uma força imposta externamente que atua sobre o soluto, mas não sobre o solvente (GUELL, 1991). A modelo de Manning é caracterizada pela Equação 2.40, onde é em função principalmente do perfil do potencial energético dessa força externa atuante numa determinada região.

$$\sigma = 1 - \langle e^{\beta V} \rangle^{-1} \quad (2.40)$$

O termo $\langle e^{\beta V} \rangle^{-1}$ é chamada de coeficiente de partição e pode ser determinado usando as equações apresentada por Giddings et al. (1968), em que os autores caracterizaram esse termo para diversas condições, com variações na forma geométrica e movimento livre do soluto, assim como na forma do poro.

Um outro modelo para determinação do coeficiente de reflexão foi desenvolvido por David Charles Guell, em 1991, onde em sua tese propôs a aplicação de uma teoria generalista baseada na combinação das equações de momento de transporte 'instantâneas' em microescala com abordagens dos efeitos hidrodinâmicos decorrentes das partículas Brownian, o que destoava das teorias existentes que se baseavam nas equações termodinâmicas e nas equações de transporte médio na escala do comprimentos dos poros da membrana. Guell (1991) afirma que a sua teoria demonstra que a força exercida sobre as partículas do soluto pela membrana causa osmose e pressão osmótica. Assim, em equilíbrio, a maior força exercida pela membrana sobre a solução mais concentrada é equilibrada pela diferença de pressão macroscopicamente observável, conhecida como pressão osmótica, no qual, sob condições de ausência de equilíbrio, a força da membrana é transmitida ao solvente, que é assim o faz ser transportado (GUELL, 1991). Baseado nessa fundamentação, Guell (1991) apresentou várias derivações do seu modelo para diferentes situações em que possa ser aplicado. Numa situação de um soluto esférico atravessando uma membrana com poros cilíndricos uniformes (situação aproximada para PSM), o autor sugeriu a Equação 2.41, que é função da razão entre o raio do soluto e do poro (Equação 2.42).

$$\sigma = 1,8\lambda^2 - 0,8\lambda^3 \quad (2.41)$$

$$\lambda = \frac{r_s}{r_p} \quad (2.42)$$

Em 2016, Liangso Shu et al. propuseram uma outra forma de utilizar o coeficiente de reflexão nas equações Kedem – Katchalsky (K-K), considerando que há dois valores diferentes para o coeficiente de reflexão, um para cada equação de transporte (soluto e solvente), além disso esses valores dos coeficientes eram dados por sistemas, baseando na teoria da dinâmica molecular, cujo há uma relação quantitativa entre o coeficiente de pressão osmótica e o tamanho da molécula. Tal hipótese é condizente ao que foi relatado por Anderson e Malone (1974) em

um dos seu trechos, onde deduz a equação do coeficiente de reflexão para um fluxo da água igual a zero, no qual explicita que ao formular as relações fluxo-força e ao utilizar o teorema da reciprocidade de Onsager, Staverman pôde concluir que os coeficientes das duas equações K-K são iguais para transporte de membrana unidimensional. Assim, baseado nessas suposições e na dinâmica molecular com efeitos de entrada do soluto no poro, Shu et al. (2016) propõe utilizar σ_o para o coeficiente de reflexão usado na equação de transporte do solvente (Equação 2.9) e σ_s para a de transporte do soluto (Equação 2.11). O σ_o e σ_s são denotados de coeficiente de pressão osmótica e coeficiente de filtração primária, respectivamente, e são determinados pelos sistemas a seguir.

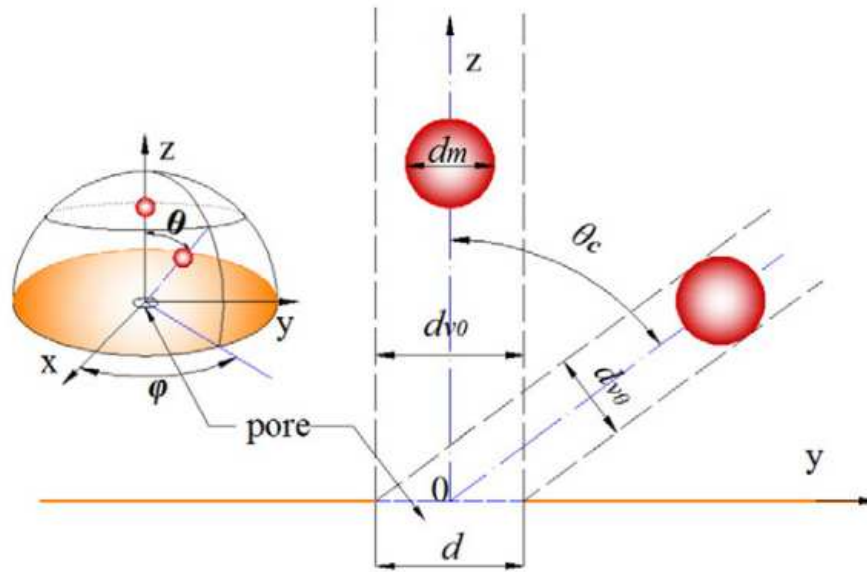
$$\sigma_o = \begin{cases} \beta^3 & 0 < d_m \leq d \\ 1 & d_m > d \end{cases} \quad (2.43)$$

$$\sigma_s = \begin{cases} \beta^2 & 0 < d_m \leq d \\ 1 & d_m > d \end{cases} \quad (2.44)$$

onde d é o diâmetro da entrada efetiva de um poro e d_m é o diâmetro do soluto molecular. O parâmetro β é dado pela razão entre os diâmetros do soluto e do poro ($\beta = d_m / d$). Shu et al. (2016) relatam que a Equação 2.43 consegue descrever a contribuição do efeito causado durante a entrada do soluto no poro, tal efeito o autor denota de *Solomon-Hill effect*.

O fenômeno de *Solomon-Hill effect* representa a perda da quantidade do movimento devido a colisão da molécula na entrada do poro, pois, como o modelo não é 1D, a molécula pode se locomover em direção a entrada do poro com um ângulo θ_c , formado pelo vetor de movimento da molécula com a direção axial do poro (Vide a Figura 2.31). Esse efeito é ainda mais sensível quando se compara o diâmetro da molécula com o diâmetro projetado do poro na direção do ângulo θ_c . Se uma molécula, ao mover na direção θ_c , for maior que o diâmetro projetado do poro ($d_m > d \cos \theta_c$), a molécula não poderá entrar no poro e, conseqüentemente, não contribuirá com o seu impulso. Este tipo de colisão é chamado de colisão supercrítica (SHU et al., 2016). O próprio autor complementa dizendo que todas as colisões das moléculas do solvente podem contribuir com o seu impulso para os poros. Assim, em comparação com um solvente puro, haverá uma pressão negativa para o poro resultante das colisões supercríticas das moléculas de soluto. Esta pressão negativa é a pressão osmótica.

Figura 2.31 – Diagrama do modelo de teoria do trabalho de Shu et al. (2016)



Fonte: Shu et al. (2016).

O outro modelo com foco na determinação do coeficiente de reflexão foi proposto por John L. Anderson e Dermot M. Malone em 1974 no trabalho intitulado de *Mechanism Of Osmotic Flow In Porous Membranes*. Seu modelo baseia-se nas formulações das equações clássicas de transporte e das relações termodinâmicas, considerando ou não os efeitos estéricos e/ou adsorções presentes no processo. Fundamentado nessas premissas e considerando uma condição em que o fluxo osmótico ocorre em um poro cilíndrico e sem efeito de entrada do poro, os autores desenvolveram a Equação 2.45 para descrição do coeficiente de reflexão.

$$\sigma = 1 - \frac{8}{r_p^4} \int_0^{r_p} 2r dr \int_r^{r_p} \frac{dy}{y} \int_0^y x \cdot e^{-V(x)} dx \quad (2.45)$$

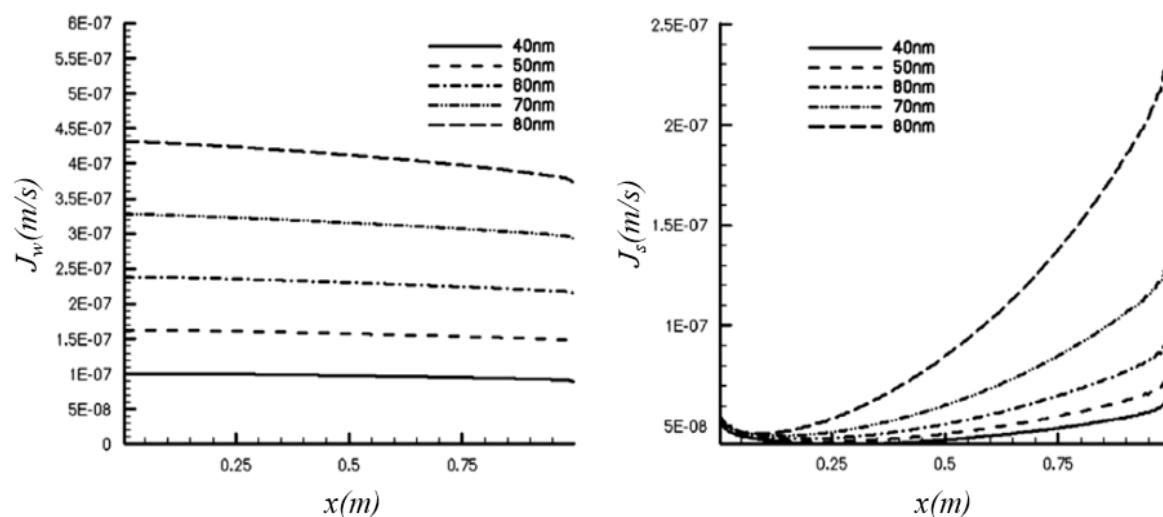
Analisando o potencial elétrico na superfície de uma parede dentro do poro como negligenciável, a molécula de soluto como esférico e considerando a força estérica, a Equação 2.45 pode ser tratada em função de razão entre os raios do soluto e do poro (ANDERSON; MALONE, 1974; LU; LU, 2010).

$$\sigma = (1 - (1 - \lambda)^2)^2 \quad (2.46)$$

Lu e Lu (2010) utilizaram essa equação de Anderson nas suas simulações, juntamente com as equação K-K para descrever o comportamento de uma membrana ultrafiltração numa

aplicação de hemodiálise. A Figura 2.32 mostra um dos resultados obtidos pelos autores nas suas simulações, onde os gráficos mostram os perfis dos fluxos do soluto (J_s) e do solvente (J_w) ao longo da membrana, onde eles variaram os diâmetros dos poros.

Figura 2.32 – Perfil dos fluxos ao longo da membrana



Fonte: (LU; LU, 2010).

Na Figura 2.32 percebe-se que quanto maior o tamanho dos poros da membrana porosa, maior é a velocidade de filtração para os dois fluxos (LU; LU, 2010). Os autores complementam dizendo que suas simulações conseguiram replicar os fenômenos físicos de processo de estudo escolhido (hemodiálise) possibilitando que os engenheiros possam usar seu modelo para otimizar tal processo.

É possível perceber que a equação de Anderson consegue interagir com as outras equações utilizadas para caracterizar o processo de separação por membrana, no qual, nos resultados apresentados por Lu e Lu (2010), é perceptível que a Equação 2.46 tem uma influência no modelo, conseguindo alterar os valores dos fluxos de forma sensível, principalmente no fluxo do soluto, conforme mostrada na Figura 2.32. Isso mostra a importância de ter uma boa correlação do coeficiente de reflexão no processo alvo para obtenção de modelos computacionais mais robustos, o que conduz a resultados mais consistentes com os experimentais.

Como foi visto, a maioria dos modelos citados necessitam informações do soluto e do meio em que ele se locomove, principalmente suas informações geométricas. Para o processo de dessalinização por membrana via osmose reversa, os solutos que atravessam a membrana

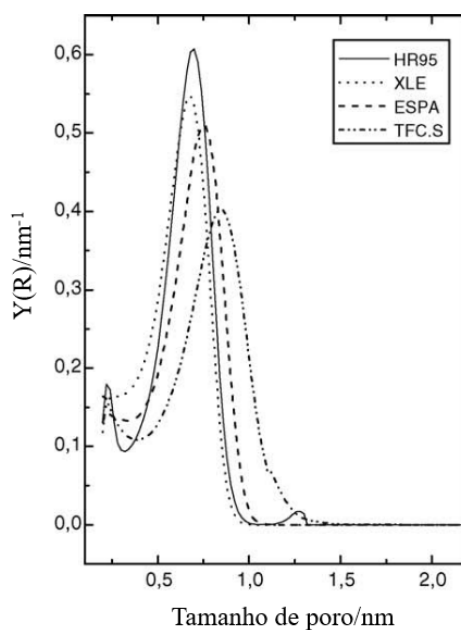
são considerados com geometrias esféricas e representam os íons Na^+ e Cl^- , advindo dos sais, que devido à alta pressão no canal de alimentação, permite ocorrer o processo de dissociação do sal em íons, formando junto as moléculas da água, os chamados íons hidratados. Esse processo é relatado com detalhe nos trabalhos de Aas et al. (2017), Gregor e Gregor (1978) e Oren e Biesheuvel (2018).

Os raios dos íons (soluto) podem ser encontrados através da equação de Stokes-Einstein (DACH, 2009; DEEN, 1987; RENKIN, 1954; NIGHTINGALE, 1959; VOLKOV; PAULA; DEAMER, 1997). Além disso, esses autores apresentaram um conjunto de valores para os raios de diversos íons hidratados, inclusive para Na^+ e Cl^- , com valores dos raios iguais a 3,58 Å e 3,32 Å, respectivamente.

Em relação ao meio para locomoção, se leva em consideração também os raios equivalentes dos volumes vazios (poros) encontrados na membrana. Existe uma gama de valores para esse parâmetro e que é característico de cada membrana, variando de acordo com a sua natureza (Acetato de Celulose (CA), Poliamida Aromáticas (PA), Compósito com Camada fina de Poliamida (TFC) e *Polyureas*), polimerização, formas de fabricação, processo de sintetização, entre outros fatores. Assim, as membranas de osmose reversa fabricadas por acetato de celulose (CA) possuem tamanhos médios de poros de 5 - 20 unidades de Angstrom (WANG et al., 2011). Košutić, Dolar e Kunst (2006) obtiveram através dos seus resultados que as membranas TFC tinham diâmetros de poros variando entre 6,6 Å a 7,8 Å.

Na Figura 2.33 está representado alguns dos resultados de Košutić, Dolar e Kunst (2006), no qual apresenta a curva de distribuição dos tamanhos dos poros (PSD) das membranas utilizadas, onde é possível observar que os maiores picos estão justamente, entre a faixa citada anteriormente (6,6 Å a 7,8 Å), caracterizando que na distribuição de poros na membrana, há em sua maioria poros com diâmetros dentro desse intervalo. Kurihara e Sasaki (2017) relatou que as membranas SWRO (*Seawater Reverse Osmosis*) apresentaram curvas de PSD com picos entre os range 5,6 Å a 7,0 Å para os tamanho dos poros. Além disso, esses autores utilizaram uma outra metodologia para determinação desses diâmetros, denotado de cálculos de superfície Connolly, e obtiveram valores entre 6 Å e 8 Å, sendo considerados próximos a outra faixa obtida.

Com esses parâmetros e os modelos citados permitirão determinar do coeficiente de reflexão em função da morfologia da membrana e do soluto, sendo possível auxiliar na robustez do modelo de transporte do permeado e assim ter resultados mais condizentes com a física do processo.

Figura 2.33 – Distribuições do tamanho dos poros das amostras de membrana a 8×10^5 Pa (8 bar)

Fonte: Košutić, Dolar e Kunst (2006).

2.15 Considerações Finais

Neste capítulo foram apresentados conceitos fundamentais para o entendimento dos fenômenos que ocorrem num processo de dessalinização, em especial ao que envolve membranas por osmose reversa, foco desse trabalho. Foi realizado um resumo sistemático da literatura, fenômenos presentes (polarização de concentração, incrustação, Solomon-Hill effect), fatores limitantes do processo, técnicas para minimização desses fatores e modelos matemáticos desenvolvidos com objetivos em caracterizar cada efeito presente no processo, como modelos para descrição dos fluxos dos canais e dos que atravessam a membrana, teoria do filme para modelar a polarização de concentração, modelos para descrição da rejeição dos solutos e equações para definir o coeficiente de reflexão. Essa revisão sistemática foi empregada com o objetivo de apresentar uma visão geral do funcionamento dos processos e dos modelos matemáticos, de forma que auxilie o pesquisador durante o desenvolvimento de novas modelagens numéricas para realização de simulações que possa prever o comportamento do processo e assim, otimiza-lo.

É notável que grande parte das pesquisas na área PSM tem sido direcionado em descrever o desempenho e o transporte do fluxo na membrana, de tal forma a alcançar a compreensão da sua seletividade. Essa incessante busca é devido a presença de um alto grau de complexidade nos fenômenos envolvidos nesse meio e falta de métodos eficientes para sua caracterização. Além disso, foi possível compreender a natureza dos modelos matemáticos usados nesta área de estudo, construindo, assim, uma gama de opções para modelagem numérica a ser desenvolvida nesse trabalho. Assim, no próximo capítulo será discutido a metodologia numérica a ser empregada, apresentando o problema estudado, junto com as equações, condições e hipóteses utilizadas.

Capítulo 3

METODOLOGIA NUMÉRICA

No capítulo anterior foi apresentado diversos modelos matemáticos capazes de prever e caracterizar os fenômenos presentes no processo de separação por membrana de osmose reversa, assim como uma revisão da literatura para um melhor entendimento dos mecanismos de transportes e dos fatores que limitam o processo. Essa revisão bibliográfica serviu de alicerces para o desenvolvimento da modelagem numérica proposto neste trabalho, que tem como intuito em otimizar o processo com a diminuição dos efeitos nocivos, como as que são produzidas pela polarização de concentração e incrustação, e, conseqüentemente, aumentar a produção do fluxo permeado. Neste capítulo 3 é apresentado a metodologia, hipóteses, condições, modelos matemáticos utilizados, tratamento de solução e parâmetros utilizados na modelagem numérica desenvolvida. Essas modelagens tiveram o auxílio das ferramentas de Dinâmica de Fluidos Computacional em conjunto com o uso do software ANSYS FLUENT 15.07 e foram realizadas simulações em 2D e 3D com e sem a presença de promotores de turbulência para diversas geometrias propostas a serem analisadas. O intuito é avaliar o comportamento dos fluxos nessas situações e a distribuição mássica do soluto nos canais, de tal modo a entender os efeitos de cada condição e assim, determinar a melhor forma de otimizar o processo.

3.1 Considerações iniciais

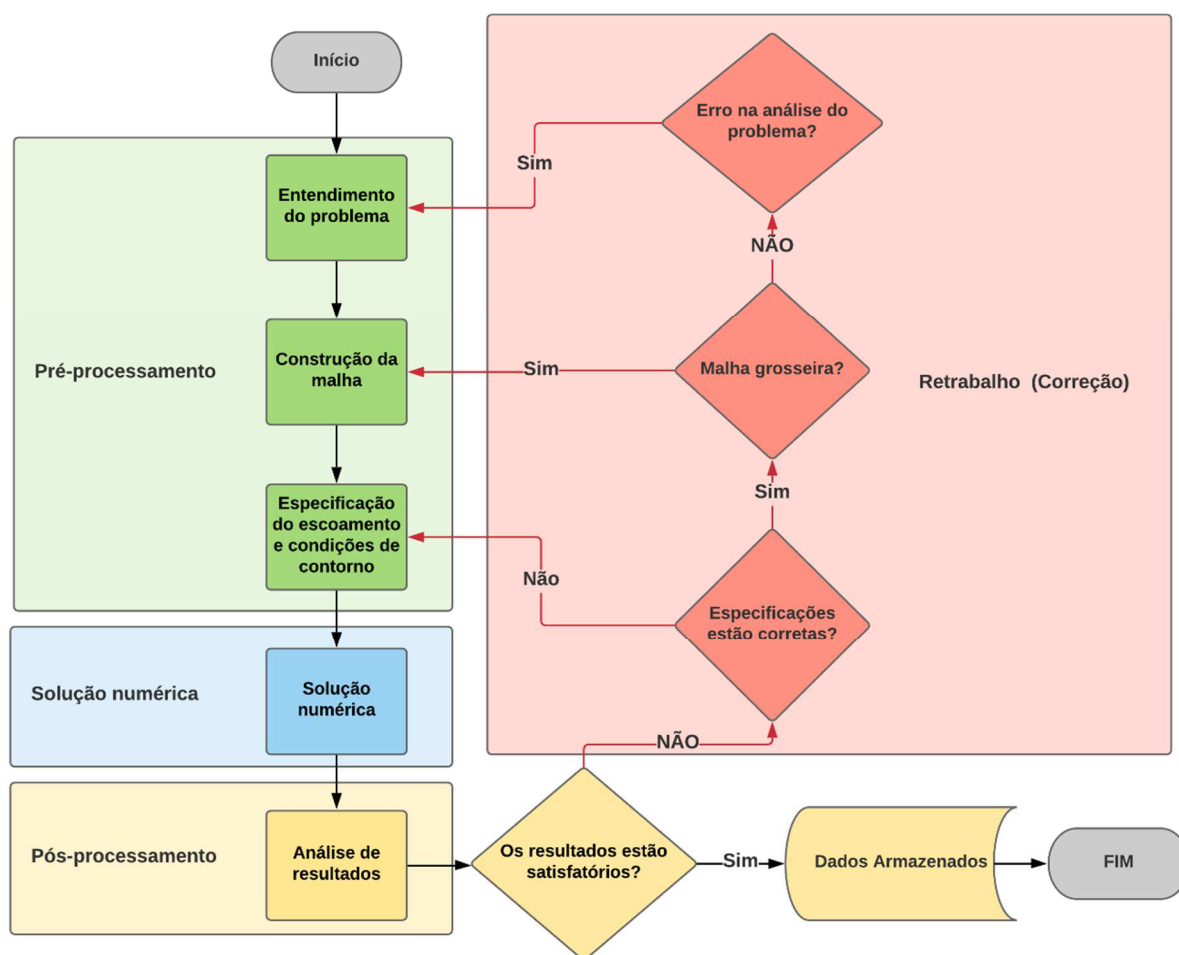
Uma das preocupações e dificuldades encontradas na ciência é com o alto investimento financeiro necessário para realizações de experimentos referente à aquisição de equipamentos, compras de insumos, instalações e mão de obra. Nos dias atuais, com o grande avanço tecnológico, a modelagem numérica tornou-se uma alternativa bastante interessante, pois reduz de maneira drástica os custos, o tempo e os riscos nas operações dos experimentos repetidos. Uma das técnicas numéricas mais utilizados para análise dos perfis de escoamento do fluxo e seu comportamento hidrodinâmico é o modelo denotado de CFD (*Computational Fluid Dynamic*).

Nos tempos recentes, as pesquisas e as novas tecnologias de dessalinização com

membranas vêm conseguindo um grande avanço devido a esse suporte dado pela área de computação, como ferramenta de auxílio para predição do comportamento dos fenômenos presentes nesse processo. Com o uso de ferramentas de CFD, é possível obter soluções rápidas de modelos matemáticos e assim avaliar diversos efeitos existentes no processo de separação por membranas via osmose reversa, como perfis de escoamento do fluido na membrana, desempenho da camada limite de polarização por concentração e transferência de massa.

Assim, para o emprego do CFD no desenvolvimento da pesquisa desta tese, se faz necessário realizar algumas atividades exibidas no fluxograma da Figura 3.1, em que destaca-se a formação de 3 subgrupos, divididos em: antes da solução numérica (pré-processamento), solução numérica (processamento) e depois desta (pós-processamento).

Figura 3.1 – Fluxograma com as etapas necessárias para uso do CFD



Fonte: Própria do autor.

A pesquisa deste trabalho é vinculada a modelagem e simulação de um domínio de estudo que possa representar os fenômenos físicos ocorridos num módulo de permeação com membrana de osmose reversa. Os softwares escolhidos foram *ANSYS ICEM CFD*, para construção dos domínios e suas malhas, e o *ANSYS FLUENT*, para solução numérica dos modelos e análise de resultados. Essa pesquisa foi desenvolvida no Laboratório de Pesquisa em Fluidodinâmica e Imagem (LPFI), pertencente a Universidade Federal de Campina Grande, em parceria com a Universidade Federal Rural do Semi-árido (UFERSA), no qual ofereceram suporte técnico e intelectual para o desenvolvimento deste trabalho.

3.2 Formulação do problema físico

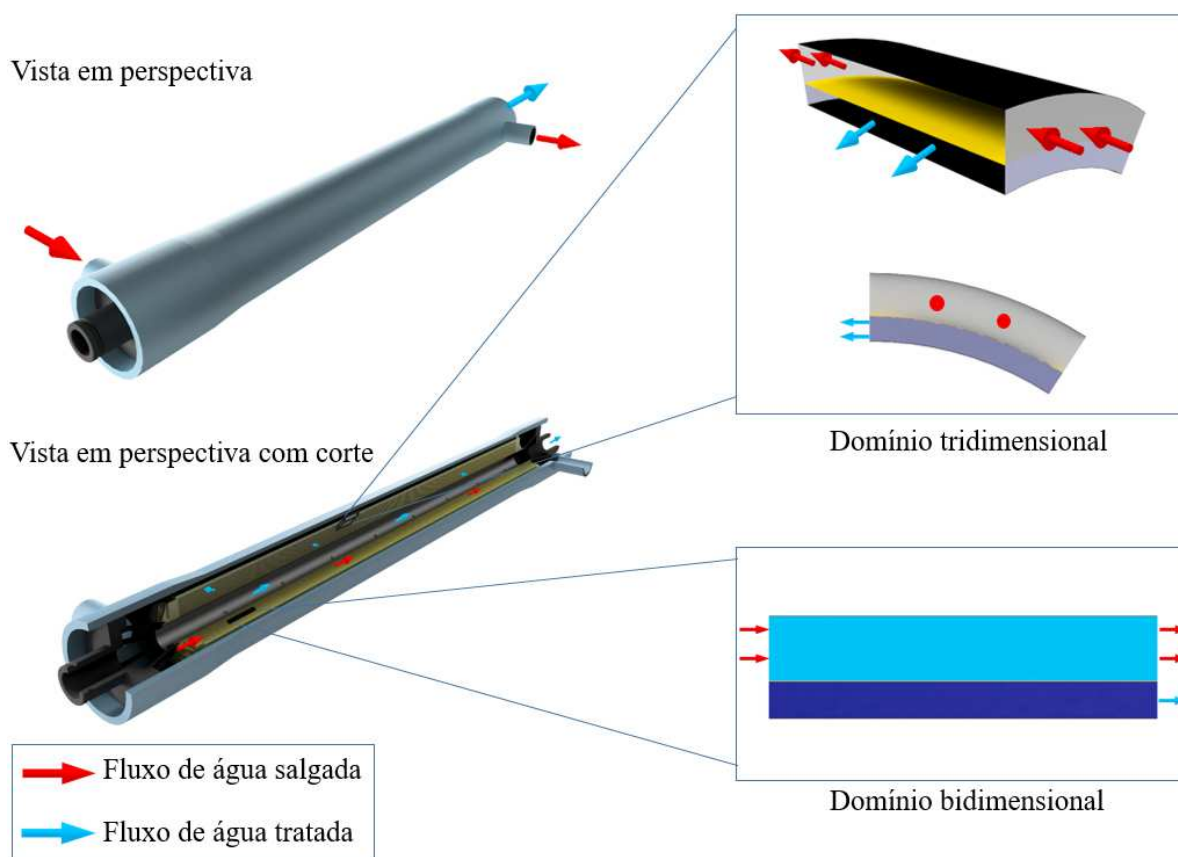
A proposta física para o estudo consiste na análise do processo de separação por membrana de osmose reversa, cujo objeto de estudo é um módulo de permeação do tipo espiral que possui uma membrana de compósito contendo uma camada fina de poliamida (TFC). Tal escolha do objeto de estudo é justificada por ser o componente mais utilizado e o mais dominante no mercado, tanto quanto a forma como o tipo de material da membrana (ISMAIL; KHULBE; MATSUURA, 2018; OREN; BIESHEUVEL, 2018). Mai (2014) ainda enfatiza afirmando que a membrana espiral TFC domina o mercado com 91% das vendas. A Figura 3.2 mostra esse objeto de estudo escolhido, onde, na escala industrial, vários desses componentes ficam alocados numa unidade de dessalinização (vide Figura 2.5).

Igualmente representado na Figura 3.2, estão os domínios de estudos bidimensionais e tridimensionais utilizados para simplificar o problema a ser analisado. Esses domínios representam uma região delimitada do problema (célula unitária), em que permite analisar os fenômenos ocorridos sem ter o ônus referente a perda de efeitos, pois são regiões que apresentam periodicidades de comportamentos. Outros autores como Alexiadis et al. (2007), Ghidossi, Veyret e Moulin (2006), Kim e Hoek (2005) e aqueles relatados no tópico 2.10 utilizaram esse artifício com a prerrogativa de obter a melhor relação entre o custo computacional e resultados robustos.

Essas simplificações permitiram acoplar desses domínios no software *ANSYS FLUENT 15.07*, em que na entrada (*inlet*) foi imposto um fluxo de uma solução binária composta por água e por sais sob alta pressão. Além da entrada, há duas saídas (*outlet*) nos

domínios (vide Figura 3.2) que são responsáveis para a retirada do fluxo concentrado e do permeado. Essas informações e outras condições serão discutidas a seguir.

Figura 3.2 – Objeto de estudo



Fonte: Própria do autor.

As geometrias dos domínios computacionais utilizados apresentam algumas particularidades em relação a maioria da literatura, como por exemplo a utilização do canal do permeado no domínio, o que permitiu adicionar o seu efeito na simulação. A maioria dos autores, como Ahmad e Lau (2007), Amokrane et al. (2016) e Foo, Liang e Weihs (2020), estão mais preocupados com a hidrodinâmica e a natureza da camada limite polarizada do canal de alimentação, eles desconsideram o canal do permeado para que assim obtenha aquela relação de custo computacional otimizada e consiga diminuir a complexidade do problema.

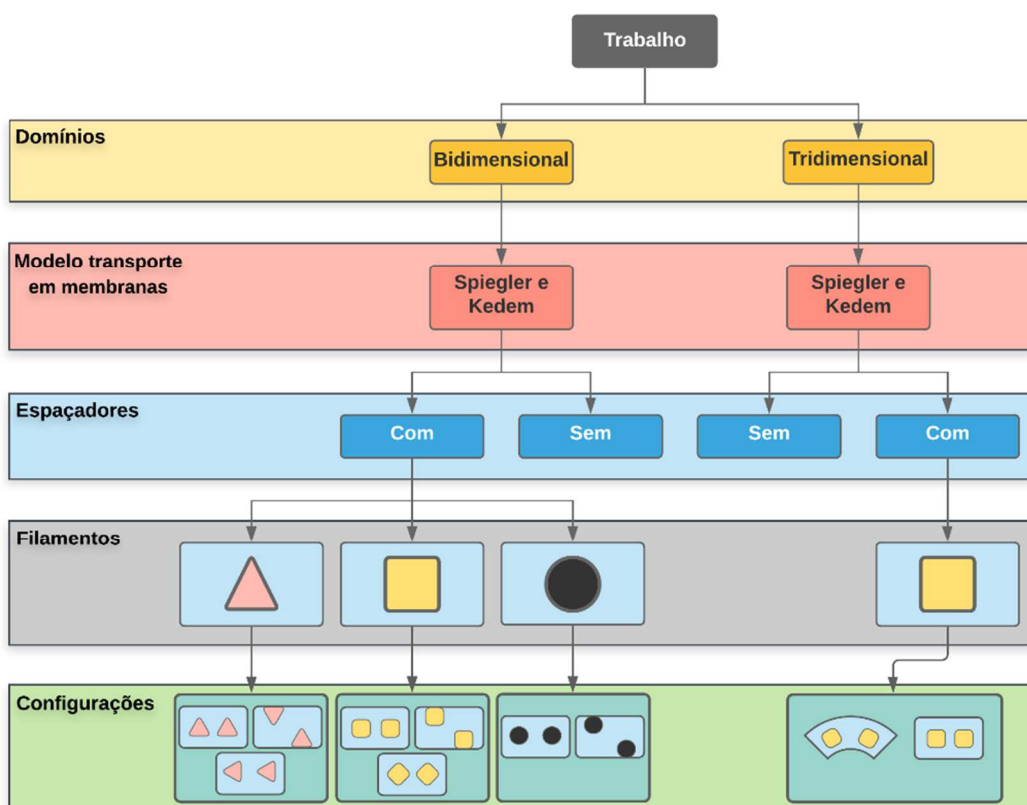
Outra peculiaridade está no tridimensional, em que se optou em trabalhar, em alguns casos, o domínio com o efeito geométrico espiral e com os fluxos dos canais perpendiculares, tentando aproximar ainda mais do problema físico. Gu, Adjiman e Xu (2017) e Koutsou,

Karabelas e Kostoglou (2018), citados no tópico 2.10, utilizaram domínios tridimensionais com geometria apenas do canal de alimentação e trabalhando com o formato em paralelepípedo.

3.3 Estudos propostos

Este trabalho está dividido em alguns estudos propostos baseados nos domínios bidimensional e tridimensional. A Figura 3.3 ilustra um fluxograma esquemático do procedimento adotado neste trabalho, apresentando as ramificações propostas com suas características peculiares de cada simulação. Esse fluxograma permite compreender e identificar as interações entre os estudos, destacando-se as diretrizes de comparação entre eles.

Figura 3.3 – Fluxograma dos estudos proposto



Fonte: Própria do autor.

Além dos estudos mostrados na Figura 3.3, também foi proposto estudar o efeito do arredondamento dos vértices para os espaçadores quadráticos e triangulares em 2D, analisando

com e sem arredondamento e, para os espaçadores circulares, estudou-se o efeito da mudança dos seus diâmetros no processo. Assim, foram contabilizados 22 grupos de simulações variando o tipo de domínio, geometria do espaçador e disposição do promotor no canal.

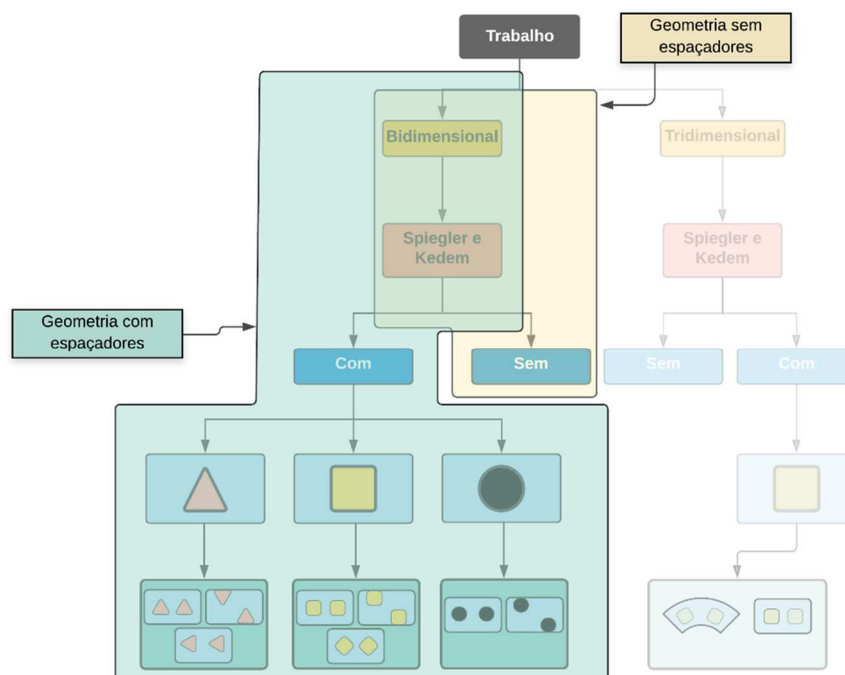
3.4 Geometria dos domínios

As geometrias adotadas nos domínios foram construídas através do *software* ANSYS ICEM CFD, onde pode-se desenhar, dimensionar os domínios de estudo e caracterizar cada região ou zona de interesse, como canal de alimentação, membrana e canal do permeado, para que assim seja possível a criação de “subzonas (subdomínios)” de interface.

3.4.1 Geometria do domínio bidimensional

Foram construídas dezoito geometrias diferenciadas pelo tipo de espaçador e sua disposição no canal e uma geometria sem espaçador, como estão destacadas na Figura 3.4.

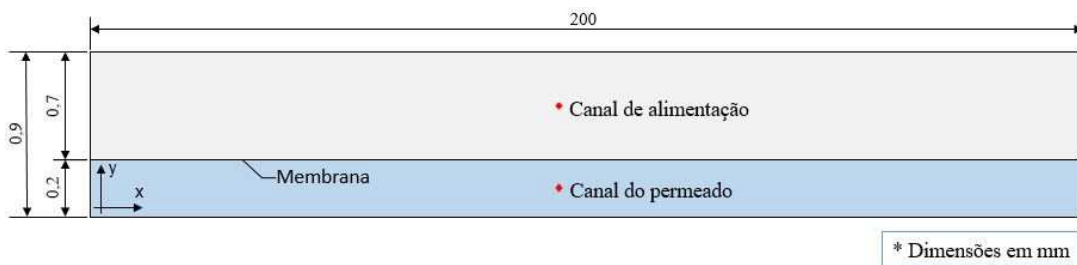
Figura 3.4 – Identificação da quantidade de geometrias necessárias



Fonte: Própria do autor.

A geometria sem espaçadores possui dimensões de 200 mm de comprimento e 0,9 mm de altura, sendo composto por uma interface, contendo o efeito da membrana, e duas regiões onde há o escoamento do fluido, caracterizando os canais de alimentação e do permeado, conforme ilustrado na Figura 3.5. As dimensões adotadas foram baseadas nos trabalhos de Ahmad et al. (2005a) e De Pinho; Semião; Geraldes (2002).

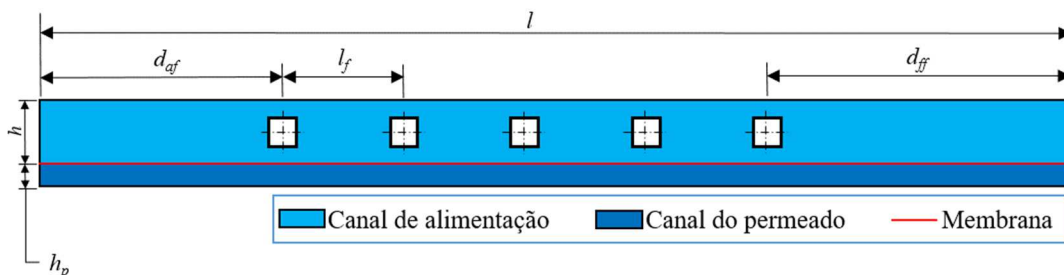
Figura 3.5 – Geometria sem espaçador utilizado



Fonte: Própria do autor.

Referente a todas as geometrias com espaçadores, foram propostas as suas construções baseadas em relações adimensionais entre os valores do tamanho dos canais com as dimensões do espaçador. Tais relações são encontradas nos trabalhos de Amokrane et al. (2016), Keir (2012), Schwinge, Wiley e Fletcher (2002) e Fimbres-Weihs, Wiley e Fletcher (2006). As dimensões principais são de 69 mm comprimento (l), 2 mm de altura do canal de alimentação (h) e 0,6 mm canal do permeado (h^p). Baseado nas dimensões principais e nas relações ($d_f^6/h = 0,5$; $l_f/h = 4$; $d_{af}^7 = 12.d_f$, $d_{ff}^8 = 25.d_f$) foram obtidas as outras dimensões, vide Figura 3.6.

Figura 3.6 – Geometria com espaçadores quadrado no arranjo submerso



Fonte: Própria do autor.

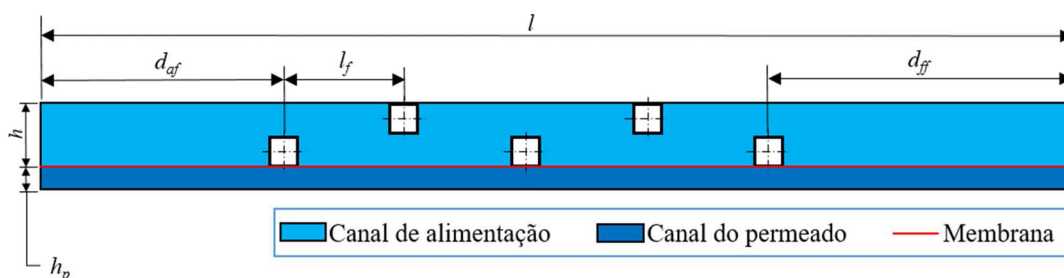
⁶ d_f é o diâmetro ou altura do filamento.

⁷ d_{af} é a distância entre o início do canal da alimentação e o centroide do primeiro filamento.

⁸ d_{ff} é a distância entre o centroide do último filamento e o fim do canal da alimentação.

Além do arranjo em submerso (Figura 3.6), foram desenvolvidas geometrias com espaçadores dispostos com arranjo do tipo zigue-zague, em que foram mantidas as mesmas dimensões do arranjo submerso, conforme é visto na Figura 3.7 para uma geometria contendo espaçador quadrático. Ambos arranjos são compostos por cinco filamentos no canal de alimentação e nenhum no canal do permeado.

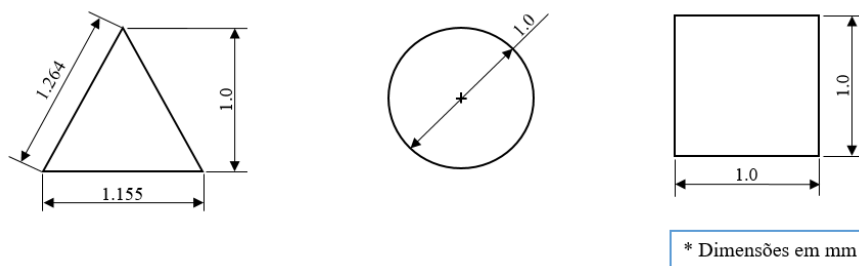
Figura 3.7 – Geometria com espaçadores quadrado no arranjo zigue-zague



Fonte: Própria do autor.

Os três tipos de espaçadores utilizados possuem formas de triângulo isósceles, quadrado e círculo, no qual suas dimensões da área seccional pode ser verificados na Figura 3.8.

Figura 3.8 – Geometria dos espaçadores propostos



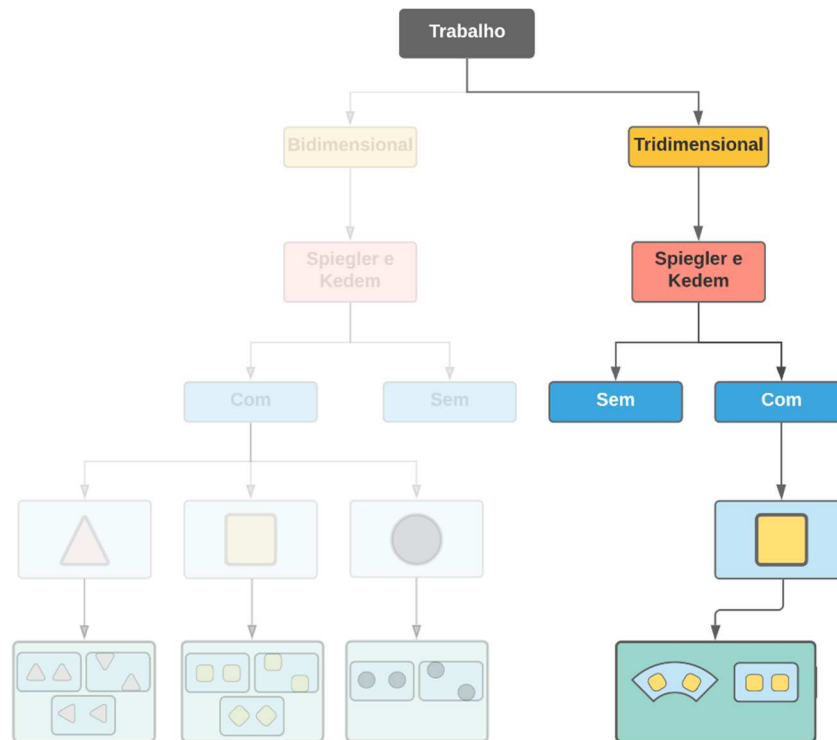
Fonte: Própria do autor.

3.4.2 Geometria do domínio tridimensional

Para domínio tridimensional foi identificado a necessidade de construção de três geometrias diferentes para realização das simulações tridimensionais, conforme em destaque na Figura 3.9, nos quais foram: geometria de canais planos sem promotores e geometrias com espaçadores, sendo uma com canais planos e o outro com canais que representam um fragmento

de uma espiral. Percebe-se que foi selecionado apenas o espaçador do tipo quadrado para análise, devido ao alto custo computacional que estas simulações tridimensionais necessitam para obtenção de resultados. Além disso, foi escolhido a disposição do tipo submerso para posicionar os espaçadores perante o canal de alimentação.

Figura 3.9 – Identificação da simulação 3D

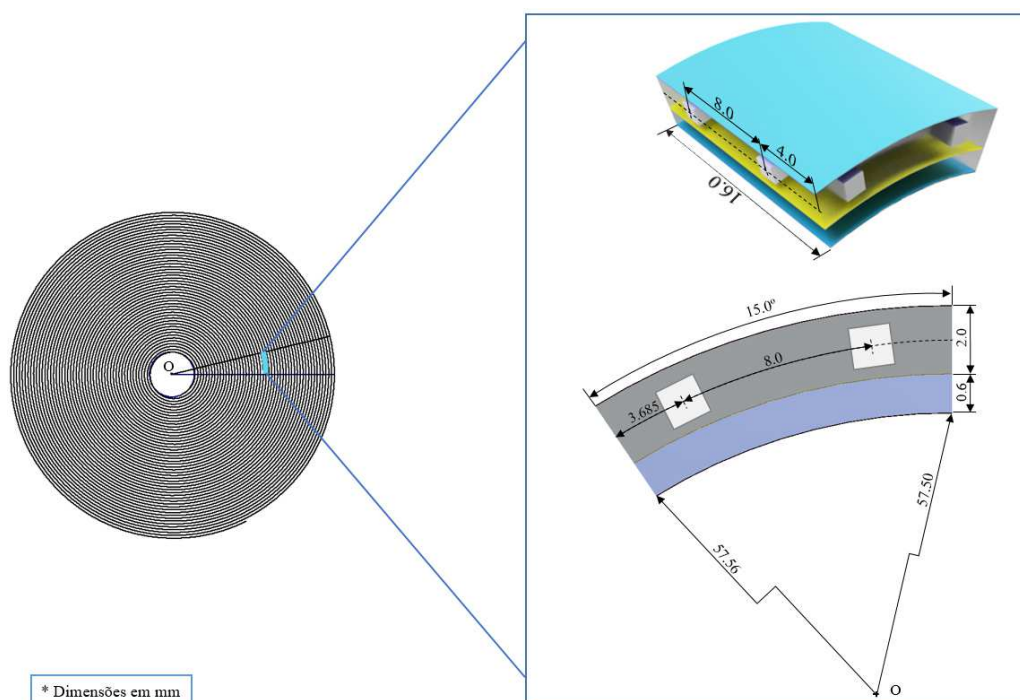


Fonte: Própria do autor.

Mediante a essas premissas, a geometria arqueada foi baseada nas dimensões de um módulo espiral de osmose reversa da empresa *Dupont Water Solution*, identificado por *BW30-440i*. Esse módulo possui um diâmetro máximo de 201 mm, diâmetro do tubo do permeado 29 mm e comprimento de 1029 mm.

Para a construção virtual da geometria em espiral foi utilizada a equação de Arquimedes, em que permitiu ter uma geometria semelhante a real. Após essa etapa, foi utilizada a técnica da célula unitária para ter um menor custo computacional sem ônus nos resultados, conforme dito na seção 3.2 e, assim, foi selecionado uma região localizada no raio médio do módulo. Essa região é ilustrado na Figura 3.10 e também são apresentadas as demais dimensões da célula unitária escolhida. As geometrias com canais planos foram construídas baseando-se nas dimensões da geometria com o segmento da espiral.

Figura 3.10 – Geometria domínio 3D e suas dimensões



Fonte: Própria do autor.

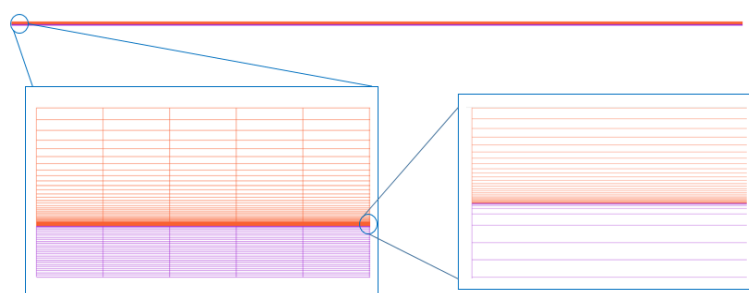
3.5 Metodologia de geração das malhas numéricas

Devido a forma de discretização escolhida, volumes finitos, para a solução das equações governantes do problema físico, faz-se necessário a construção de uma malha numérica para cada domínio computacional estudado, conforme discutido na seção 2.11, onde mostra as etapas necessárias para o uso das ferramentas CFD. Assim, foram construídas as malhas numéricas para os domínios computacionais estudados, empregando o software *ANSYS ICEM CFD 15.0*, que, após criar a geometria com as dimensões especificadas, foram definidas as regiões de permeado e concentrado, zonas de entrada, saída, paredes e interface com condição de membrana e, por fim, foi feita a blocagem, pré-meshs e conversão da malha em arquivo para o *ANSYS FLUENT*. Na construção de malha, o domínio de estudo foi dividido em pequenas células, onde houve a necessidade de um aumento de densidade de células próximas a superfície da membrana, devido à presença de fenômenos, como polarização de concentração, o que causa um maior gradiente das variáveis constituintes do processo, como fração mássica do soluto e fluxo permeado, em uma pequena região na direção perpendicular a membrana. Esse fato de

refinamento próximo a superfície da membrana foi relatado nos trabalhos de Ahmad et al. (2005b), Amokrane, Sadaoui e Dudeck (2015) e Keir (2012). Ahmad; Lau (2007) sugerem que a altura da primeira célula adjacente a superfície da membrana deve possuir magnitudes inferiores a $2,5 \times 10^{-7}$ m, tal valor foi encontrado com estudo de dependência de malha perante a convergência dos resultados. Assim, na construção das malhas dos domínios estudados, foi adotado este valor de $2,5 \times 10^{-7}$ m para altura das células adjacentes à membrana e utilizou-se o critério *quality* (disponível no ICFM CFD) para analisar a qualidade das malhas, sendo aceitos malhas que possuíssem valores acima de 0,8 para esse critério.

Para geometria bidimensional sem espaçadores, a sua malha numérica é apresentada na Figura 3.11, em que destaca-se duas regiões distintas, representando os canais, e o refinamento da malha nas regiões adjacentes próximas a zona onde foi modelado o efeito da membrana.

Figura 3.11 – Malha numérica do domínio 2D sem espaçadores



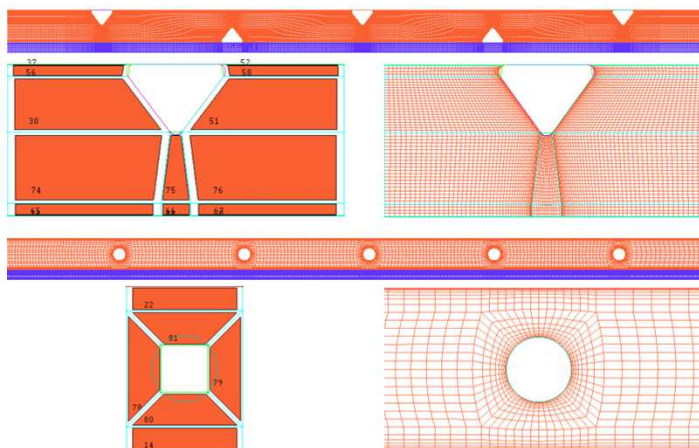
Fonte: Própria do autor.

Essa malha numérica possui uma configuração de 50 x 100 células para o canal de alimentação (laranja) e 30 x 100 células para o do permeado, com ambos os lados da membrana com células adjacentes de altura $2,5 \times 10^{-7}$ m. A malha desse domínio tem um total de 8.000 células.

Para as dezoito geometrias com espaçadores, foram feitas as construções de malha seguindo os requisitos citados anteriormente, que é referente ao refinamento da malha nas proximidades da membrana e possuir o parâmetro *quality* superior a 0,8. Além disso, as regiões próximas as superfícies dos espaçadores também foram refinados, como pode ser visto na Figura 3.12 para as geometrias com espaçadores triangulares com vértices arredondados e dispostos no padrão zigue-zague e uma outra geometria com promotores circulares em arranjo submerso. Nessas geometrias da Figura 3.12, devido à complexidade das geometrias e a necessidade de cumprir todos requisitos citados anteriormente, foram necessários gerar 94 blocos e uma malha com 82.947 células para o domínio com espaçadores triangulares e para a

outra geometria gerou-se 59 blocos e uma malha contendo 37.294 células. Todo o processo foi feito no software ICEM CFD.

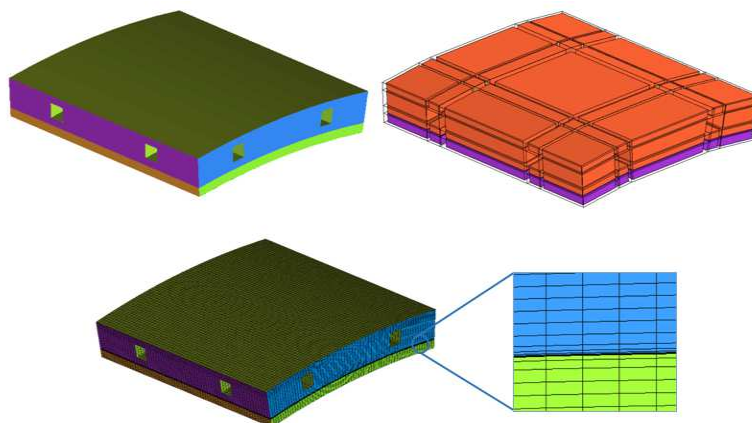
Figura 3.12 – Refinamento e blocagem nas regiões próximas ao espaçador



Fonte: Própria do autor.

Para a geometria tridimensional, seguiu-se as mesmas configurações e premissas adotadas nas geometrias 2D, haja visto a similaridade da geometria quando se analisa no plano longitudinal da célula. A malha foi composta por células hexaédricas com um refinamento nas regiões próximas a zona que possui a condição de membrana. A Figura 3.13 ilustra a geometria, a forma de blocagem e a malha finalizada para a geometria tridimensional com espaçador, o qual possui 81 blocos e uma malha de 213.241 elementos hexaédricos.

Figura 3.13 – Geometria tridimensional com espaçador utilizado no trabalho



Fonte: Própria do autor.

3.6 Modelagem matemática

A modelagem computacional foi implementada no software ANSYS FLUENT 15.07, no qual os modelos que descrevem o comportamento da membrana e a condição de contorno aplicado na entrada do canal de alimentação foram implementadas por meio de rotinas computacionais construídas em linguagem C (UDF) e depois acoplada ao software FLUENT. Os modelos matemáticos utilizados foram detalhados no Capítulo 2 e nesta seção é mostrado como eles são implementados e acoplados nos domínios escolhidos.

A modelagem numérica de todos os casos estudados foi baseada na pressão e foi desprezado o efeito da gravidade. O fluxo do fluido e da transferência de massa ao longo dos canais foram definidos e baseados em algumas hipóteses, tais como: consideração do tipo de domínio dimensional pertencente, o problema é dito como isotérmico, a dissipação viscosa e os efeitos de compressibilidade são definidos como desprezíveis e o problema está em regime de escoamento laminar.

Apesar de haver casos de estudos neste trabalho com espaçadores e esses serem frequentemente referidos pelo termo "promotores de turbulência", os autores Haidari, Heijman e Van Der Meer (2018a), Fimbres-Weihs e Wiley (2010), Wang, He e Zhu (2016), Yakhot e Orszag (1986) citam que não se faz necessário a aplicação de uma modelagem específica para turbulência, pois a aplicação de modelos turbulência existentes é mais adequado apenas para números altos de Reynolds ($Re > 30.000$), em que a turbulência pode ser assumida como isotrópica e totalmente desenvolvida. Os números de Reynolds geralmente utilizados na indústria para os módulos em espiral com membrana de osmose reversa possuem faixa de valores que não excedem a 1000 (KOUTSOU; YIANTSIOS; KARABELAS, 2004).

No trabalho Fimbres-Weihs e Wiley (2010), os autores fazem uma citação de Schwinge, Wiley e Fletcher (2003) afirmando que as variações temporais das condições de fluxo encontradas nos casos de domínios com espaçadores e membrana são de natureza laminar, pois não apresentam as variações caóticas, comumente associadas à turbulência. Nesse mesmo trabalho de Fimbres-Weihs e Wiley (2010) apresentam uma tabela com as maiores contribuições nessa área de simulação, no qual consta dez trabalhos, com nove trabalhos que caracterizam o escoamento no regime laminar e apenas o trabalho de Ranade e Kumar (2006) utilizou o modelo $k-\epsilon$ para turbulência, sendo que em algumas simulações utilizou também a hipótese de regime laminar. Em suma, sob essas hipóteses citadas anteriormente, o escoamento

do fluido dentro dos canais deste trabalho é descrita pelas equações de Navier-Stokes (2.4 - 2.8) citadas na seção 2.11, considerando a transferência de massa em termos mássico.

Os domínios sem espaçadores foram tratados em regime permanente, já os casos com espaçadores, devido as regiões de recirculações, optou-se, inicialmente, por simular em regime permanente até 10000 iterações e usar o resultado obtido dessa simulação como condição inicial em uma simulação transiente com passo de tempo definido por uma UDF (Apêndice A - IV), possibilitando variar, de forma automática, o passo de tempo em valores de 1×10^{-3} e 1×10^{-2} s. Nas simulações em regime transiente foram adotadas um tempo de 60 segundos de processo, em que o valor foi necessário para que pudesse alcançar resultados sem variações no tempo (regime permanente), ou seja foi suficiente para garantir ter um regime estacionário na camada de polarização por concentração ao longo da membrana e na hidrodinâmica dos canais, pois é a situação de interesse deste trabalho. Essa estratégia é semelhante a utilizada por Amokrane et al. (2015) e foi essencial devido à dificuldade de obter os critérios de convergências exigidas para as simulações estudadas, que foram valores residuais escalonados da ordem de 1×10^{-8} para as variáveis calculadas na modelagem numérica usada no ANSYS FLUENT. Esses critérios de convergência utilizados foram citados em alguns trabalhos, como Ahmad et al. (2005b), e também foi feita uma pré-análise dos possíveis valores de convergência, variando entre 1×10^{-3} a 1×10^{-12} , no qual definiu-se que o critério de 1×10^{-8} como o menor valor alcançado, pois não apresentou maiores variações de resultados quando comparados com os resultados obtidos para outros critérios menores ao valor escolhido. Além disso, esse critério de 1×10^{-8} proporcionou bons resultados capazes de descrever os fenômenos e as suas relações intrínsecas com os parâmetros de processo.

Nas simulações em regime permanente, as condições iniciais utilizadas na solução foram configuradas de forma diferente em cada canal dos domínios, sendo adotados, para células da zona de alimentação, valores iniciais de velocidade idênticos a da zona *inlet* e fração mássica do NaCl com valor referente a zero. Com relação ao canal de permeado, foram escolhidos valores iniciais iguais a zero para todos as velocidades e fração mássica do soluto.

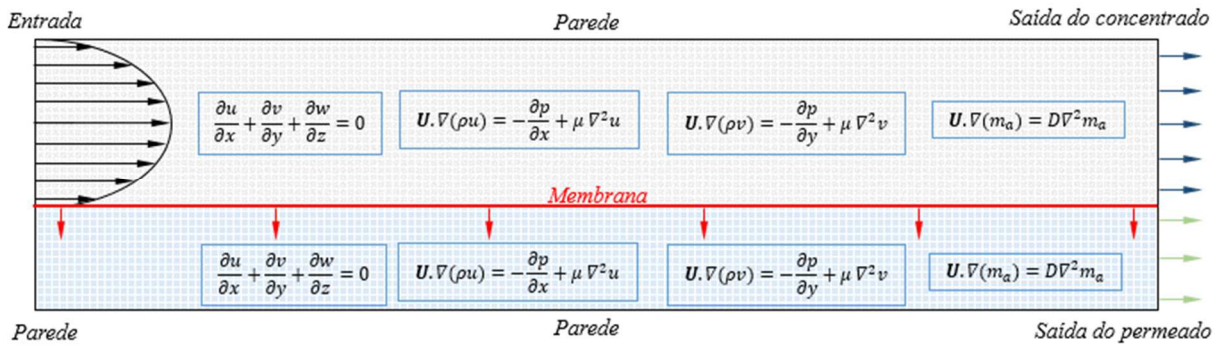
As simulações foram realizadas em computadores que possuem processador INTEL CORE I5 – 4440 CPU @ 3.10 GHz, memória RAM de 8 GB e sistema operacional Windows 10 x64, o que permitiram ter, como tempo de simulações, em torno de 30 minutos para simulações sem espaçadores e uma média de 36 horas para simulações 2D com espaçadores, sendo o promotor triangular o que teve um maior tempo, em torno de 48 horas de simulação. Referente as geometrias 3D, o caso sem espaçadores teve 7 horas de simulação, enquanto os casos com espaçadores foram o que tiveram o maior tempo, em torno de 102 horas simuladas.

3.6.1 Modelagem das condições de contornos

As condições de contornos ou de fronteiras foram modeladas para cada zona dos domínios de estudos, baseando nas condições comumente encontradas no processo de dessalinização águas e na forma que os domínios foram delimitados, visto na seção 3.2.

As condições de fronteiras e os modelos usados no domínio da geometria sem espaçador estão especificadas na Figura 3.14, bem como as identificações das zonas com as condições de entrada e saída, paredes e membrana.

Figura 3.14 – Identificação das zonas para aplicação das condições de contorno e modelos



Fonte: Própria do autor.

A condição de entrada (*inlet*) é caracterizada pela entrada de um escoamento totalmente desenvolvido e com uma determinada fração mássica do NaCl, m_a^{inlet} (Equação 3.1).

$$Entrada \begin{cases} u = 6\bar{u} \frac{y}{h} \left(1 - \frac{y}{h}\right) \\ v = 0 \\ m_a = m_a^{inlet} \end{cases} \quad (3.1)$$

onde \bar{u} é a velocidade média da entrada dado pelo número de Reynolds na fronteira *inlet*. Como a densidade e a viscosidade são calculados pelas Equações 3.10 e 3.11, o número de Reynolds é expresso pela Equação 3.2.

$$Re = \frac{\bar{u} \times h \times 997,1(1,0 + 0,696m_a^{inlet})}{0,89(1 + 1,63m_a^{inlet}) \times 10^{-3}} \quad (3.2)$$

As fronteiras de saídas foram especificadas com a condição de *pressure outlet*, onde foi aplicada uma pressão (p_a^{outlet}) na saída do concentrado, que é maior que a pressão atmosférica aplicada na saída do permeado. Essa pressão p_a^{outlet} permite pressurizar o canal de alimentação em relação a do permeado, originando a pressão transmembrana, Δp . Essa condição *pressure outlet* considera o escoamento do fluxo totalmente desenvolvido assim como a distribuição da fração mássica. Dessa forma, as condições das zonas de saída são dadas pela Equação 3.3.

$$\text{Saída do concentrado e permeado} \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial m_a}{\partial x} = 0 \\ p = p_a^{outlet} \\ p = p_{atm} \end{array} \right. \quad (3.3)$$

Para as fronteiras com condição de paredes, considera-se que não há deslizamento (*no slip*) e que é impermeável, ou seja, não há fluxo através dela. A Equação 3.4 representa a condição parede.

$$\text{Parede} \left\{ \begin{array}{l} u = 0 \\ v = 0 \\ \frac{\partial m_a}{\partial y} = 0 \end{array} \right. \quad (3.4)$$

A membrana, para esses estudos de casos, é modelada nas duas interfaces do domínio (vide Figura 3.14) e são acoplados as equações de fluxo permeado e da fração mássica do soluto que deverá passar nessa fronteira. Assim, a membrana foi especificada como uma parede semipermeável, sem deslizamento e baseou-se na modelagem apresentada por Ahmad e Lau (2007). As equações utilizadas para descrever os efeitos das membranas foram do modelo de Spiegler e Kedem e da teoria do filme. A escolha do modelo de Spiegler e Kedem foi determinada devido alguns fatores, como: formulação que mais está sendo empregada para

caracterizar o problema físico escolhido, como foi dito no tópico 2.12.1; possuem na literatura uma gama de parâmetros que podem alimentar o modelo, haja visto que é amplamente utilizado nos principais trabalhos recentes; tem uma certa facilidade de acoplamento com o software empregado (ANSYS FLUENT); é o modelo adotado por Ahmad e Lau (2007) e tem uma natureza do equacionamento, visto no tópico 2.12.1, que é apropriada para utilização de variáveis locais do domínio, como pressão e fração mássica dos sais, permitindo aproximar ainda mais do problema físico e analisar os fenômenos de forma localizada. Essa estratégia de utilizar variáveis locais só é possível devido ao uso das rotinas criadas em linguagem C (UDFs) que funcionam como artifícios de acoplamento no software, o que permite diferenciar de outros trabalhos que usam valores médios para alimentar o modelo do fluxo permeado.

Assim, a condição de membrana utilizado nas interfaces dos canais é regida pela Equação 3.5.

$$\text{Membrana} \begin{cases} u = 0 \\ J_w = \pm \frac{P_w}{\Delta x} (\Delta p - \sigma [805,1 m_a^{sm} \times 10^5 - 805,1 m_a^{sp} \times 10^5]) \\ m_a = m_a^{sp} \end{cases} \quad (3.5)$$

onde m_a^{sp} e m_a^{sm} referem-se as frações mássicas do permeado e da superfície da membrana do lado do canal de alimentação. Nessa modelagem, a razão entre a permeabilidade local da solução pela espessura da membrana foi baseada na Equação 3.6.

$$\frac{P_w}{\Delta x} = \frac{1}{R_m \mu} \quad (3.6)$$

sendo R_m é a resistência da membrana.

Para determinação de m_a^{sp} utilizou-se a teoria do filme, no qual foi feito procedimentos e condições semelhantes descritos na seção 2.13, no entanto em termos de fração mássica. Assim, isolando e rearranjando as variáveis, a Equação 3.7 é apresentada da seguinte forma.

$$m_a^{sp} = \frac{e^{\left(\frac{J_w \delta_c}{D}\right)}}{\frac{1}{R'} + e^{\left(\frac{J_w \delta_c}{D}\right)} - 1} m_a^c \quad (3.7)$$

onde m_a^c e δ_c refere-se a célula adjacente da superfície da membrana no canal de alimentação, no qual significa a fração mássica do soluto naquela célula e a sua distância do centro para a membrana.

O parâmetro R' é definida em função do coeficiente de rejeição (R) e é dado pela Equação 3.8.

$$R' = 1 - \left(1 - \frac{1 - \sigma}{1 - \sigma e^{-\frac{(1-\sigma)J_w}{P_s}}} \right) \quad (3.8)$$

onde o termo em parênteses é o coeficiente de rejeição dado pela Equação 2.17.

Para o cálculo do coeficiente de reflexão que é empregado nas equações do fluxo e na equação do coeficiente de rejeição, foram implementados no ANSYS FLUENT os modelos propostos por Anderson e Malone (1974), Guell (1991) e Shu et al. (2016) na modelagem desenvolvida, logo após foi comparado os seus resultados. Para as outras simulações, foi utilizado o modelo de Anderson e Malone (1974). O resumo das equações é apresentada no quadro 3.1.

Quadro 3.1 – Resumo das equações para determinação do coeficiente de reflexão

Coeficiente de reflexão (σ)		
Modelo	Autores	Equação proposta*
1	Anderson e Malone (1974)	$\sigma = (1 - (1 - \lambda)^2)^2$
2	Guell (1991)	$\sigma = 1,8\lambda^2 - 0,8\lambda^3$
3	Shu et al. (2016)	$\sigma_0 = \begin{cases} \lambda^3 & 0 < d_m \leq d \\ 1 & d_m > d \end{cases}$ $\sigma_s = \begin{cases} \lambda^2 & 0 < d_m \leq d \\ 1 & d_m > d \end{cases}$

$$* \lambda = r_s/r_p$$

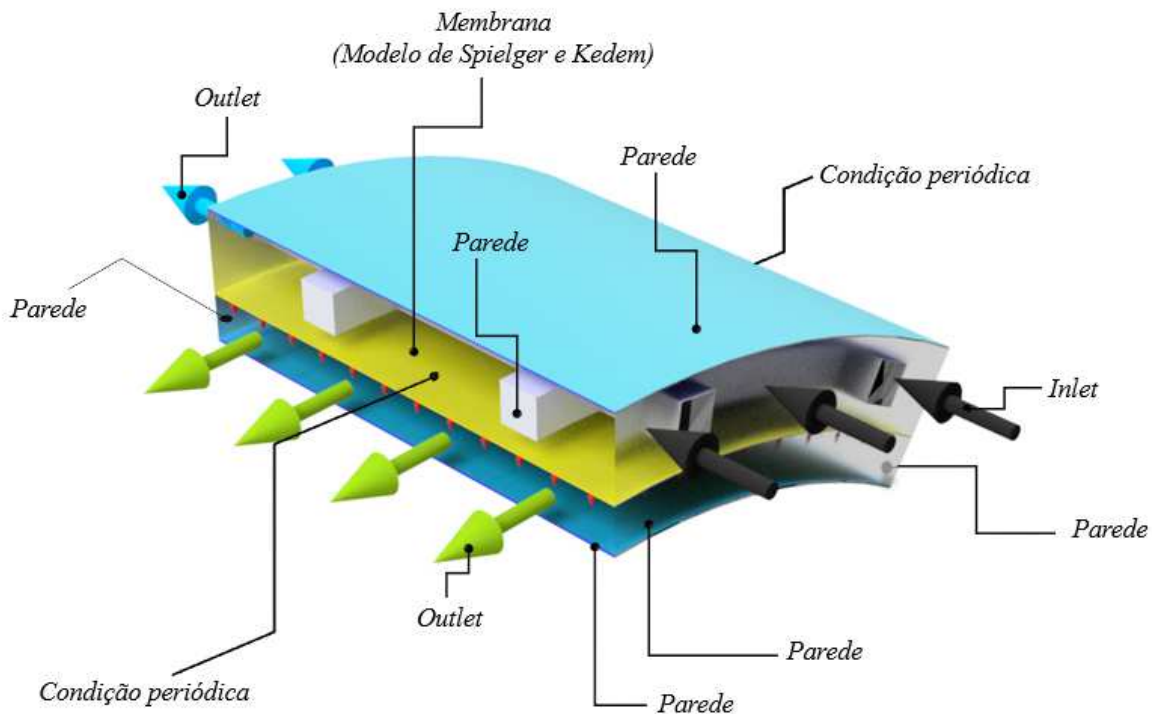
Fonte: Própria do autor.

Para os casos com o uso da geometria com espaçador, as condições também foram idênticas a da geometria sem espaçador, com adição da condição nas superfícies dos espaçadores (Equação 3.9), que foi modelado como sendo impermeável e sem deslizamento, semelhante a condição de parede.

$$\text{Espaçador} \begin{cases} u = 0 \\ v = 0 \\ \frac{\partial m_a}{\partial y} = 0 \end{cases} \quad (3.9)$$

Referente a geometria tridimensional, as condições seguiram-se os mesmos procedimentos adotado nos referidos domínios bidimensionais. No entanto, como há mais uma direção, foi adicionado o termo referente a direção z nas equações utilizadas no domínio. As condições e o modelo aplicados estão ilustradas na Figura 3.15.

Figura 3.15 – Condições de contorno e equações aplicadas na geometria tridimensional



Fonte: Própria do autor.

3.6.2 Modelagem das propriedades físicas da solução

Neste trabalho, a solução que flui nos canais e na membrana, é composta pela água pura e pelo soluto (cloreto de sódio - NaCl) que foi considerado como fluido newtoniano incompressível. As propriedades físicas desse tipo de solução aquosa variam em função da fração mássica do soluto (m_a) a uma temperatura de $25 \pm 0,5$ °C. Dessa forma, Geraldês, Semião e De Pinho (2001) propuseram funções polinomiais (Equações 3.10 - 3.13) que descrevem a densidade (ρ), viscosidade (μ), difusividade (D) e pressão osmótica (π) da solução aquosa para uma fração mássica do NaCl de no máximo de 0,09 kg/kg. Tais valores encontrados nessas equações são dados em unidade SI.

$$\rho = 997,1(1,0 + 0,696m_a) \quad (3.10)$$

$$\mu = 0,89(1 + 1,63m_a) \times 10^{-3} \quad (3.11)$$

$$D = \begin{cases} 1,61(1 - 14m_a) \times 10^{-9}, & m_a < 0,006 \\ 1,45 \times 10^{-9}, & m_a > 0,006 \end{cases} \quad (3.12)$$

$$\pi = 805,1m_a \times 10^5 \quad (3.13)$$

Para implementação dessas propriedades físicas no software ANSYS FLUENT, foi necessário construir rotinas em linguagem C, denotas de *User Defined Function* (UDF), para cada propriedade física da solução e, depois acoplar essas rotinas a modelagem de estudo no software.

As rotinas estão expostas no Apêndice A e são detalhadas seu funcionamento nos próximos tópicos.

3.7 Estrutura e método de simulação

Muitas das condições citadas anteriormente foram implementadas no software ANSYS FLUENT empregando rotinas definidas pelo usuário (*User Defined Function* - UDF) programadas em linguagem C, no qual o ANSYS permite esse uso como forma de liberar mais

recursos e aumentar a gama de aplicações do software. Assim, essa técnica é carregada de forma dinâmica pelo solucionador o que permite alterar as mais variadas condições numéricas pré-estabelecidas pelo software, tais como: condições de contorno, propriedades do material, termos fontes para o seu regime de fluxo, parâmetros personalizados de modelo, formas de inicializar uma solução e até mesmo métodos de aprimorar o pós-processamento. Assim, nas próximas seções apresentam as características dessas UDFs e como são acopladas na estrutura de solução das modelagens desenvolvidas. Além disso, apresenta-se a forma de acoplamento pressão-velocidade utilizada no processo numérico de solução.

3.7.1 *User Defined Function (UDFs)*

O *software* ANSYS FLUENT possui limitações referente a implementação de equações para caracterização de alguma ação no solucionador, como por exemplo o uso de um equacionamento para descrição das propriedades físicas de um fluido. Diante dessas limitações encontradas, foi necessário ter um entendimento de como as UDFs são acopladas no solucionador e como desenvolvê-las, haja visto que sua estrutura de código é específica para a arquitetura do ANSYS FLUENT, sendo obrigatório o uso comum de linhas de comandos específicos, como “*#include udf.h*” que determina a abertura e carregamento da biblioteca chamada de *udf.h*, encontrada na pasta raiz do software.

Cada caso proposto possui pelo menos um arquivo de cabeçalho e nove UDFs, que foram acoplados ao solucionador de tal forma que permita alimentar os modelos com variáveis locais, sendo possível caracterizar, localmente, fenômenos presentes no problema físico, sem a necessidade de utilizar variáveis com valores médios, como hipótese. Esse arquivo de cabeçalho, chamado de *extern_cells*, tem a função de trabalhar como elo de ligação entre as UDFs, responsável por transladar informações de variáveis e de *arrays* com identificadores de determinadas células da malha do domínio. O uso desse cabeçalho e da UDF chamada de *membrana_hor* foi uma estratégia adotada para otimização o tempo de processamento, visto que essa UDF é carregada apenas no momento de inicialização do processo de solução e, assim, todo tipo de cálculo ou processo de programação numérica que não tenha alteração durante o processamento do *solver* pode ser realizado nesse instante e deixado carregado para uso das outras UDFs no arquivo de cabeçalho. Essa estratégia elimina, para cada iteração do processo de solução, a necessidade de execução de cálculos e de linhas de comandos que estariam presentes nas outras UDFs. Isso tem como consequência a diminuição do tempo computacional exigido.

As UDFs utilizadas podem ser classificadas em quatro grupos perante a suas funções comuns entre si. Os grupos são: inicialização, passo de tempo, propriedades e condições de fronteiras e membrana (CFM).

O grupo inicialização é composta por uma UDF e por um arquivo de cabeçalho. A função dessa UDF é encontrar variáveis como distância entre a célula adjacente e a membrana (δ_c), posição em x e y da primeira célula adjacente, quantidade de células, constantes e contadores (variáveis computacionais), assim como construção de *arrays* dinâmicos com os identificadores (ponteiros) das células próximas a superfície da membrana, em ambos os lados. Essas variáveis são declaradas como parâmetros externos e são direcionadas para o arquivo de cabeçalho (*extern_cells*), que tem a função de conectar ao grupo de condições de fronteiras e zonas.

O grupo de passo de tempo é utilizado nos casos que utilizaram a estratégia do regime transiente para obtenção dos critérios de convergências necessários e essa UDF determina o valor admissível do passo de tempo que o software deverá utilizar para avançar no tempo.

O grupo de propriedades são compostas por três UDFs para descrição da densidade, viscosidade e difusividade, baseados nas equações apresentadas na seção 3.6.2. No processamento do solucionador, essas UDFs são chamadas a cada iteração de cada célula pertencente a malha, onde carregam as variáveis calculadas da célula, ficando disponíveis para uso. Cada UDF entrega ao solucionador o valor da variável que ficou responsável de calcular. Essas UDFs estão expostas no Apêndice A.

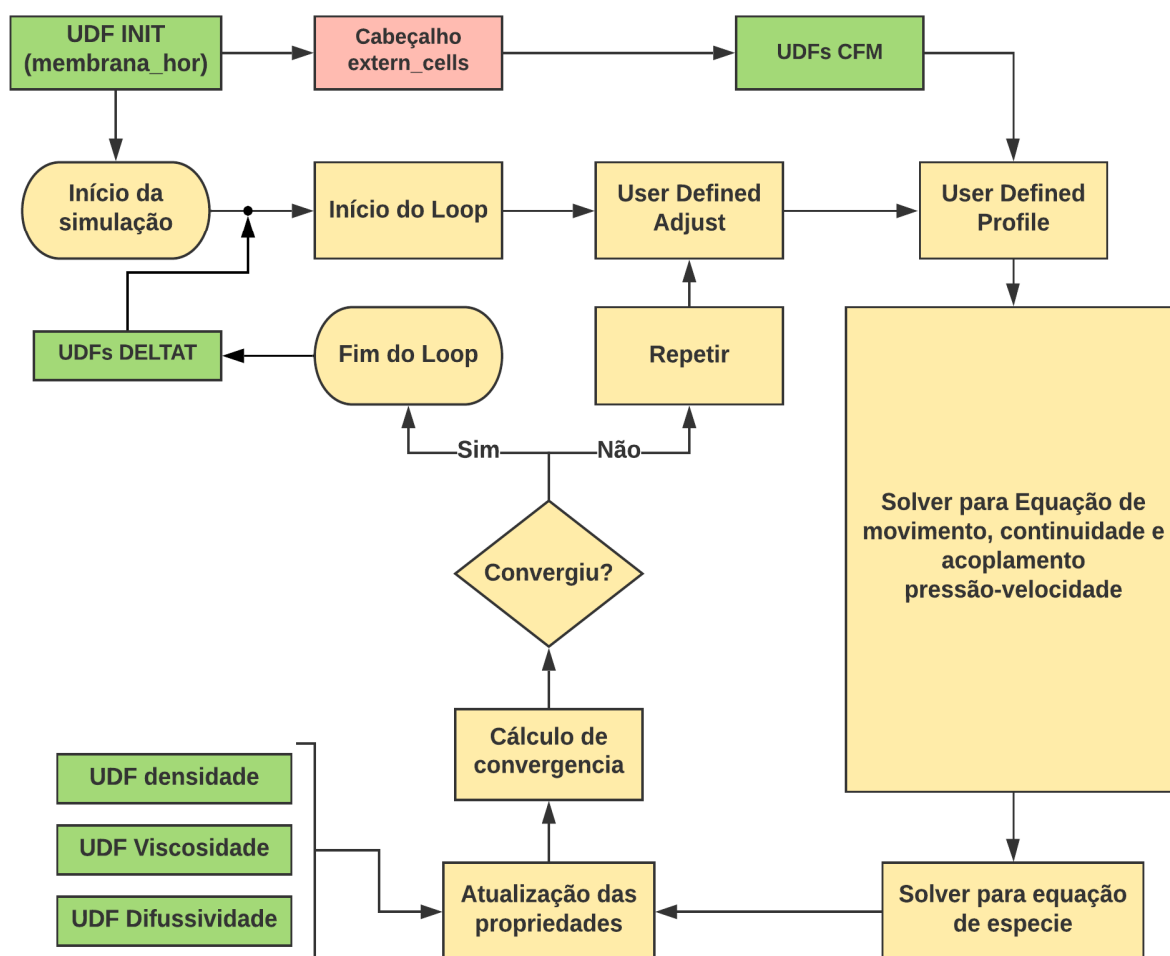
O último grupo denotado de condições de fronteira e membrana (CFM), são UDFs responsáveis por aplicar as condições de contornos na fronteira *inlet* nos domínios e por modelar os efeitos da membrana. Essas UDFs criadas agem em determinadas regiões dos domínios, aplicando as equações das zonas citadas na seção 3.6.

As UDFs construídas foram desenvolvidas para cada abordagem de processamento: em série e em paralelo. Existe uma diferença de programação entre elas, devido a partição que é feito na malha e a forma com que os núcleos do processador trabalham, assim como a comunicação necessária entre os núcleos. Assim, sendo indispensável determinados comandos de programação para a transferência de dados calculados de um núcleo para outro e para algumas operações que é só feita pelo core Host ou node 0, devido a arquitetura em paralelo do ANSYS FLUENT. As UDFs são expostas no Apêndice A.

3.7.2 Estrutura do solver com as UDFs

A estrutura e sequência de modelagem adotado é apresentado no fluxograma mostrado na Figura 3.1, que são os procedimentos necessários para a obtenção de resultados via volumes finitos. Na etapa de solução numérica, exposto nessa Figura 3.1, o software escolhido realiza uma sequência de etapas que está apresentada no fluxograma da Figura 3.16.

Figura 3.16 – Fluxograma dos procedimentos de solução acoplados com as UDFs



Fonte: Própria do autor.

O fluxograma da Figura 3.16 além de expor os procedimentos de solução para o solucionador segregado baseado em pressão (em amarelo), também apresenta onde cada UDFs criados (em verde) são acoplados. Esse fluxograma auxilia no entendimento de como as UDFs

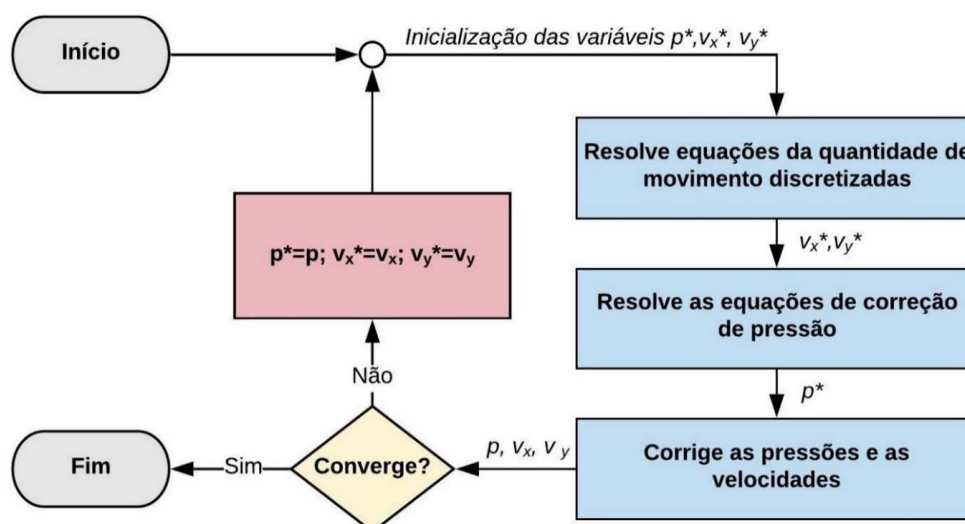
influenciam na solução e como eles são tratados pelo solucionador, assim como ajuda a entender a estrutura que a UDF deve ser programada.

Essa estrutura apresentada no fluxograma da Figura 3.16 foi empregado em todos os casos proposto desse trabalho, o que permitiu-se acoplar os efeitos e fenômenos desejados a ser descritos do problema físico.

3.7.3 Solução numérica

Os métodos de solução numérica adotados nos estudos propostos foram: os métodos *Least Squares Cell-Based* para discretização espacial, o método *Upwind* de primeira ordem para determinação do gradiente e o método *Upwind* de segunda ordem para discretização das equações de pressão, momento e de espécie. Referente ao algoritmo utilizado para o acoplamento pressão-velocidade, selecionou-se o algoritmo SIMPLE, em que trabalha na etapa referente ao solver das equações do movimento e da equação de acoplamento, vide Figura 3.16 e seus procedimentos são descritos na Figura 3.17. Os métodos de solução escolhidos foram também adotados por Ahmad et al. (2005a), Sousa (2013) e Amokrane et al. (2015) para problemas de dessalinização de águas com membranas, semelhantes a deste trabalho de tese.

Figura 3.17 – Algoritmo SIMPLE



Fonte: (SOUSA, 2013).

3.8 Propriedades físicas e parâmetros utilizadas nas simulações

As propriedades físicas e parâmetros utilizados nas simulações realizadas são descritas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Parâmetros usados nas simulações

Parâmetros	Valores	Unid	Fonte
R_m	$1,562 \times 10^{14}$	m^{-l}	Amokrane et al. (2015)
r_s	$3,58 \times 10^{-10}$	m	Oren e Biesheuvel (2018)
r_p	$3,8 \times 10^{-10}$	m	Oren e Biesheuvel (2018)
P_s	$4,36 \times 10^{-9}$	m/s	Zouhri et al. (2018)
δ_c	$2,5 \times 10^{-7}$	m	Ahmad et al. (2005b)
m_a^{inlet}	0,0002	kg/kg	De Pinho, Semião e Geraldês (2002)

Fonte: Própria do autor.

3.9 Parâmetros avaliados

Além da variação dos casos estudados, essa pesquisa propõe estudar os efeitos de alguns parâmetros de processo e averiguar a sensibilidade e robustez do modelo desenvolvido, afim de estudar os fenômenos presentes no problema físico e propor otimizações no processo.

Os parâmetros de processo alterados foram o número de Reynolds no *inlet* e a pressão aplicada na saída do canal de alimentação para os domínios utilizados, vide Quadro 3.2. A faixa de Reynolds utilizada foi baseada em condições tipicamente encontradas nas plantas industriais de dessalinização, conforme dito por Haidari, Heijman e Van Der Meer (2018b), Amokrane et al. (2015) e Li, Bui e Chao (2016) e nos trabalhos de Ahmad et al. (2005b) e De Pinho, Semião e Geraldês (2002).

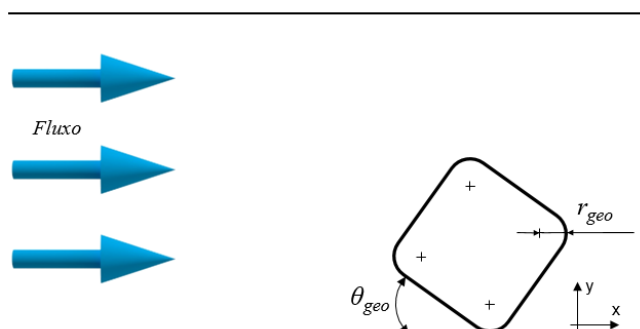
Quadro 3.2 – Parâmetros de processo a ser analisado em cada caso estudado

Domínio	Número de Reynolds								Pressão aplicada na saída do concentrado (MPa)		
	50	100	150	200	300	500	1000	1500	1	2	3
Geometria 2D sem espaçadores	■	■				■	■	■	■	■	■
Geometria 3D sem espaçadores		■		■	■					■	
Geometria 2D com espaçadores	■	■	■	■	■				■	■	
Geometria 3D com espaçadores		■							■	■	

Fonte: Própria do autor.




Também é feito uma ramificação de estudo nos parâmetros geométricos dos promotores e na angulação da geometria perante ao seu arranjo. A Figura 3.18 e Tabela 3.2 apresentam a configuração da geometria, indicando o ângulo, o raio do arredondamento estudado e os valores utilizados para os casos nesse domínio. Como esses parâmetros são geometricamente impossíveis para caso de espaçador circular, foi proposto, para essa geometria, estudo de caso que varia o seu diâmetro sem modificar-se a posição do centro do círculo.

Figura 3.18 – Parâmetros a ser estudados



Fonte: Própria do autor.

Tabela 3.2 – Geometria e valores de parâmetros estudados

Sub-casos	Geometria	r_{geo} (mm)	θ_{geo} (°)	d_f/h
1		0,1	90	
2		0,1	0	
3		0	90	—
4		0	0	
5		0,1	45	
6		0,1	0	
7		0	45	—
8		0	0	
9				
10		—	—	0,5
11				0,4

Fonte: Própria do autor.

O Quadro 5.1 do Apêndice B - I apresenta todas os casos simulados neste trabalho, exibindo informação da geometria e das condições de operações estudadas.

Foi empregado métricas para analisar o desempenho dos arranjos e das geometrias dos espaçadores. Pode-se citar como métrica: média do fator de concentração de polarização, SPMP (Razão de Performance do Espaçador), fluxo de permeado médio por área de membrana e perda de pressão por unidade de comprimento.

3.10 Considerações finais

Durante a pesquisa, pode-se compreender que havia inúmeros trabalhos na literatura com uso de vários modelos diferentes para simulações que representasse o processo de separação por membrana via osmose reversa e isso criou dúvidas no entendimento das equações empregadas, pois apresentavam variáveis diferentes, no entanto, a estrutura das equações era semelhante. Após o estudo aprofundado sobre os modelos, criou-se a percepção da diferença entre eles e percebeu-se que os trabalhos mais recentes apresentam esse conflito

de entendimento, mas ao buscar os trabalhos que desenvolveram os modelos, conseguiu-se ter essa compreensão.

Um fato positivo foi a percepção, após consulta ao referencial bibliográfico, de que simulações na área PSM é algo ainda recente, em torno de no máximo de duas décadas, isso é perceptível pela falta de vários estudos de parâmetros, carência de concordância pelos pares referente as afirmações sobre os melhores modelos matemáticos e, por fim, construção de conflitos nas explicações de alguns fenômenos presentes no processo.

Outro ponto a destacar foi o aprendizado de uma nova linguagem de programação em C e uma boa noção da ferramenta UDF para uso no ANSYS FLUENT. Esses dois aprendizados capacitaram abrir uma gama de aplicações de simulação no software, pois permite implementar qualquer modelo existente sem ter limitações de uso. Futuramente, isso será benéfico para realização de vários estudos na área PSM e de outras que venha a ser desenvolvido por meio desse software.

Capítulo 4

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados das simulações numéricas obtidos durante o desenvolvimento desta tese. As simulações realizadas seguiram-se a metodologia exposta no capítulo anterior. Inicialmente, foram realizados estudos para análise dos critérios de convergência e dos modelos de coeficiente de rejeição a serem adotados nos casos, sendo apresentado também um procedimento de avaliação da qualidade de malha. Além disso, foi feito um comparativo entre o modelo com geometria bidimensional sem espaçadores com resultados obtidos na literatura que utilizam problema físico semelhante, assim como são apresentados os resultados com variações dos parâmetros de operação e computacional, mostrando o grau de sensibilidade do modelo proposto. Posteriormente, são analisados os efeitos dos espaçadores no desempenho da membrana no processo de osmose reversa, buscando parametrizar seus efeitos através de métricas que sejam capazes de caracterizar a eficiência de cada espaçador no processo. Por fim, é apresentado os resultados obtidos em um domínio com geometria tridimensional, mostrando a influência geométrica da espiral e dos espaçadores 3D no comportamento hidrodinâmico nos canais e na produção e qualidade do produto final do processo.

4.1 Geometria bidimensional sem espaçador

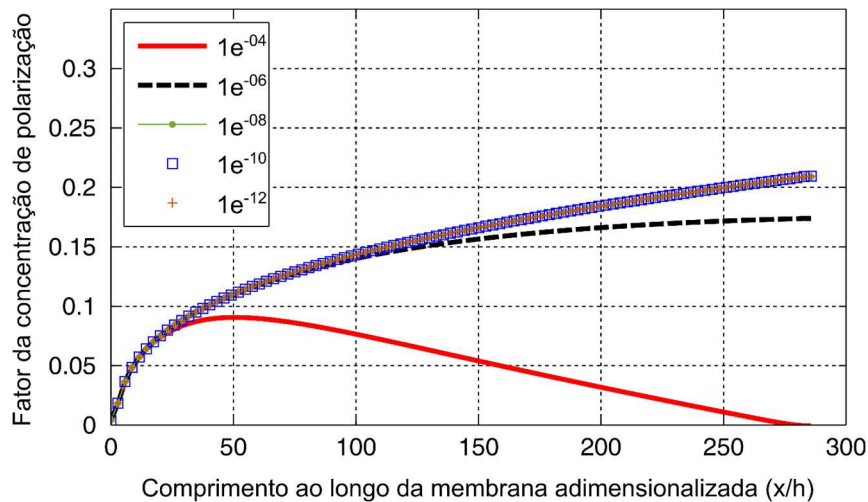
Nesta seção trata-se dos resultados obtidos com o domínio para a geometria bidimensional sem espaçadores e que utiliza o modelo Spiegler e Kedem para caracterização da membrana presente no processo. Esse caso foi escolhido como a referência para análise de estudo comparativo com os demais casos propostos citados no capítulo anterior. Assim, propõe-se apresentar os resultados desse caso de forma a caracterizar e validar o modelo, como também determinar alguns parâmetros a serem utilizados nos outros casos, tais como o estudo do critério de convergência e a escolha do modelo de rejeição citado no Quadro 3.1.

4.1.1 Escolha do critério de convergência e modelo de rejeição

Com intuito de otimizar a relação entre custo computacional e resultados robustos, foi feito o estudo para determinação do maior valor para os critérios de convergências para as variáveis de continuidade, momento e de massa. Para tal, foram feitas simulações sob mesmas condições, no qual diferenciava o critério de convergência posto em cada caso. Esses critérios foram variados de 1×10^{-4} a 1×10^{-12} e foi adotado os mesmos valores para as variáveis utilizadas. A Figura 4.1 apresentam a evolução do fator da concentração de polarização (Γ), (Equação 4.1), ao longo da membrana sobre a influência do critério de convergência escolhido.

$$\Gamma = \frac{m_{sm} - m_a^{inlet}}{m_a^{inlet}} \quad (4.1)$$

Figura 4.1 – Evolução do fator de concentração para vários critérios de convergências



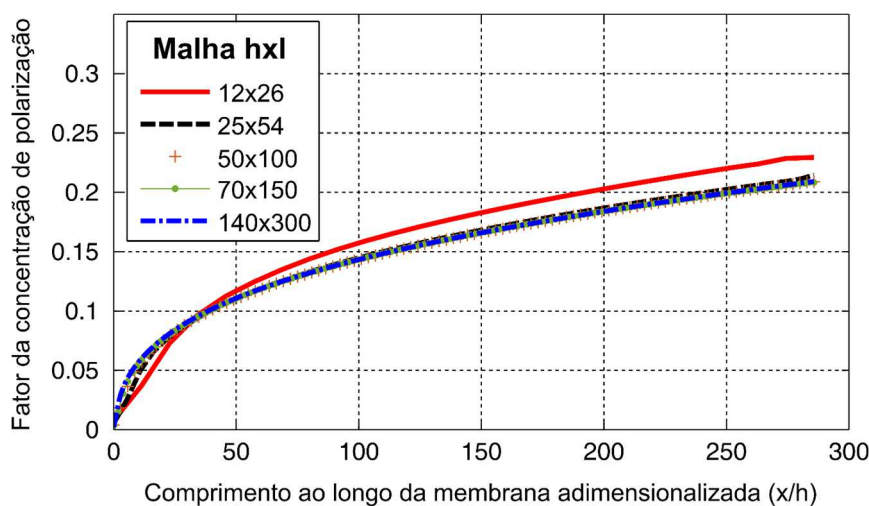
Fonte: Própria do autor.

Pode-se constatar que para valores menores que 1×10^{-8} praticamente não houve variações significativas entre as curvas ao longo da membrana. Isso significa que há influência dos valores de critério nos resultados, quando forem superiores a 1×10^{-6} . Sendo assim, baseado na boa relação entre custo e resultados, adotou-se o critério de convergência de 1×10^{-8} para os casos estudados.

Para garantir que os resultados obtidos não tenham sido influenciados pela malha utilizada, foi feito estudo de convergência de malha, comparando o comportamento do fator Γ em função do comprimento da superfície da membrana para malhas com diferentes

refinamentos, conforme Figura 4.2. A variação entre as malhas foi feita alterando a quantidade de células na altura (h) e comprimento (l) do canal de alimentação, mas seguindo as condições de menor altura de célula adjacente a membrana e do parâmetro de *quality* citadas na metodologia da malha, conforme a seção 3.5.

Figura 4.2 – Evolução do fator de concentração para diferentes malhas



Fonte: Própria do autor.

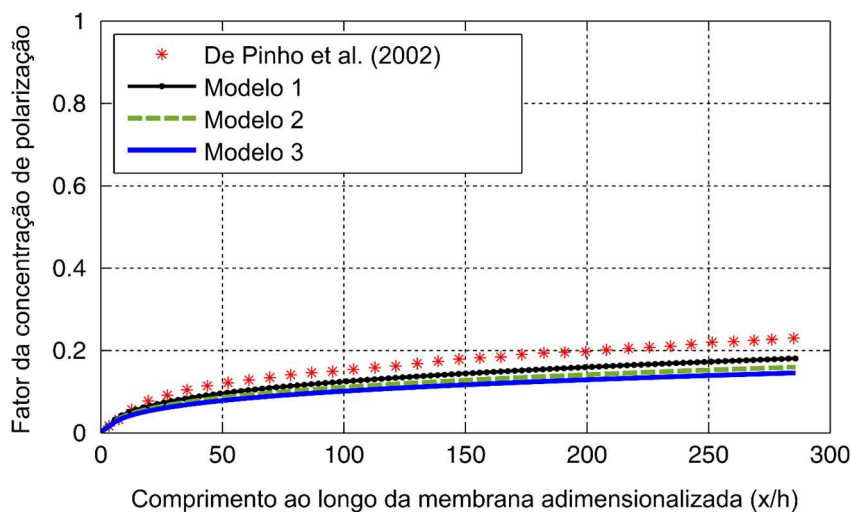
Na Figura 4.2, foi observado para malhas com refinamentos superiores a 50×100 que não houve variações significativas no fator Γ ao longo da membrana e, buscando uma boa relação entre resultados robustos e custo computacional, foi escolhida a malha 50×100 para simulações que possuem características geométricas semelhantes. Ao comparar todas as curvas, é visto que as condições impostas para construção das malhas permitem ter resultados com comportamentos semelhantes. A malha mais grosseira (12×26) apresenta diferenças maiores devido ao maior valor de comprimento da célula entre as malhas, que diminui a sua sensibilidade de captar grandes variações dos parâmetros calculados ao longo da membrana.

Com a necessidade de escolher o modelo para determinação do coeficiente de reflexão (σ), foram realizadas simulações utilizando as equações citadas no Quadro 3.1 e desenvolvidas por Anderson e Malone (1974), Guell (1991) e Shu et al. (2016).

Para análise, foram plotadas curvas da evolução do fator de concentração de polarização ao longo da membrana para cada modelo e comparado com a curva obtida por De Pinho, Semião e Geraldês (2002), que utilizaram seus dados experimentais nas condições de contorno do seu modelo computacional, que tem a finalidade de prever a distribuição de soluto na face da membrana. As simulações foram realizadas em regime permanente com velocidade constante

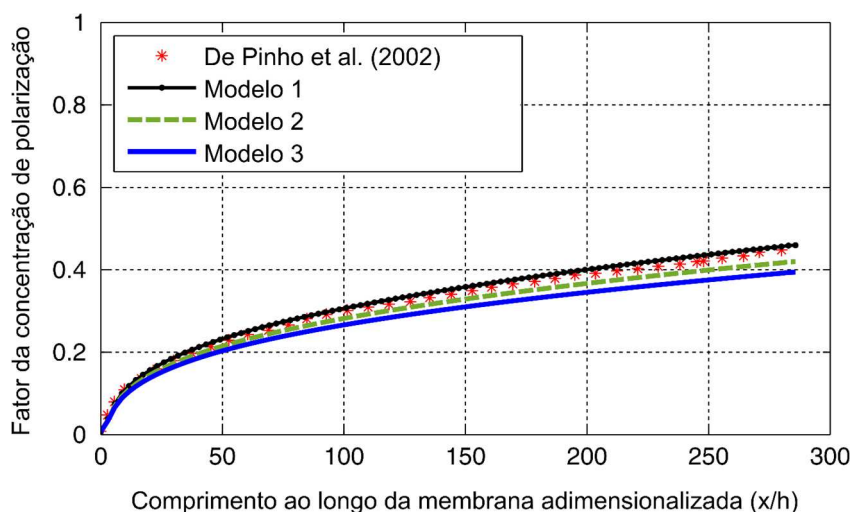
de entrada que corresponde ao número de Reynolds de 1300 e pressões aplicadas no canal de alimentação variando de 1, 2 e 3 MPa, semelhante aos parâmetros adotados por De Pinho, Semião e Geraldês (2002) e apresentados nas Figuras 4.3, 4.4 e 4.5, respectivamente.

Figura 4.3 – Comparação entre os resultados obtidos com modelos citados no Quadro 3.1 e os dados de De Pinho, Semião e Geraldês (2002), na pressão de 1 MPa na saída



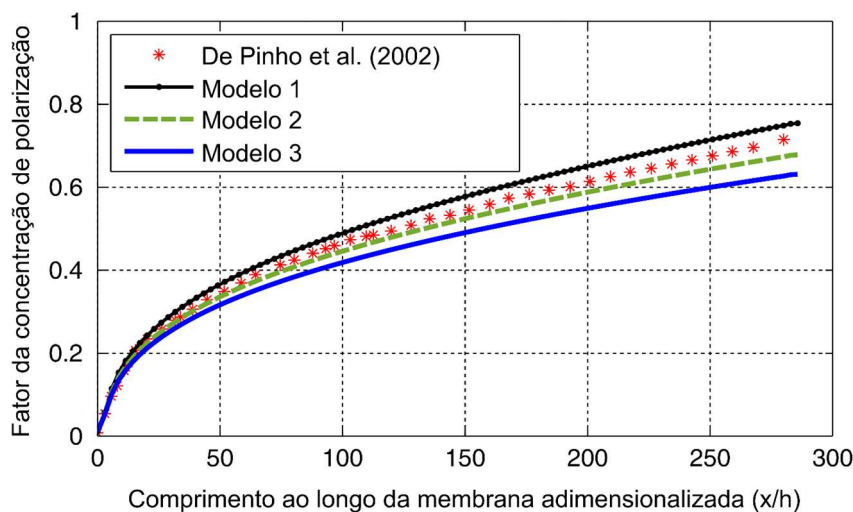
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.4 – Comparação entre os resultados obtidos com modelos citados no Quadro 3.1 e os dados de De Pinho, Semião e Geraldês (2002), na pressão de 2 MPa na saída



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.5 – Comparação entre os resultados obtidos com modelos citados no Quadro 3.1 e os dados de De Pinho, Semião e Geraldles (2002), na pressão de 3 MPa na saída



Fonte: Própria do autor.

As Figuras 4.3, 4.4 e 4.5 apresentam semelhança no comportamento dos perfis do fator de concentração de polarização ao longo da membrana, tanto quando se varia os modelos como nas pressões aplicadas. No entanto, ao se avaliar quantitativamente, verifica-se que há um descolamento entre curvas na medida que se distancia da entrada do domínio, havendo uma maior diferenciação no final da membrana (valor aproximadamente a $x/h = 280$). A Tabela 4.1 apresenta os valores da diferença entre as curvas de cada modelo com os dados De Pinho, Semião e Geraldles (2002) para o fator de concentração de polarização referente a $x/h = 280$.

Tabela 4.1 – Comparação dos maiores erros relativos de cada modelo e cada pressão analisada em função das curvas obtidas por De Pinho, Semião e Geraldles (2002)

Modelos	Diferença do fator CP			Diferença média
	1 MPa	2 MPa	3 MPa	
1	0,049	0,008	0,034	0,030
2	0,070	0,031	0,042	0,048
3	0,084	0,057	0,088	0,076

Fonte: Própria do autor.

Os resultados da Tabela 4.1 e das Figuras 4.3, 4.4 e 4.5, indicam que o modelo desenvolvido por Anderson e Malone (1974) foi o que teve a menor diferença em relação aos resultados obtidos por dados experimentais por De Pinho, Semião e Geraldles (2002),

principalmente nas pressões de 1 e 2 MPa, justificando a escolha do modelo 1 para utilização dos outros casos estudados.

4.1.2 Validação do modelo proposto

A Tabela 4.2 apresenta um estudo comparativo entre os dados experimentais do fluxo e da fração mássica do permeado do trabalho de De Pinho, Semião e Geraldês (2002) com os resultados da média dos valores calculados na zona que representa a membrana, utilizando o modelo proposto da tese com o uso do Modelo 1 (Quadro 3.1) na rotina computacional (UDF) acoplada no ANSYS FLUENT. As simulações foram realizadas com velocidade constante na entrada correspondente ao número de Reynolds de 1300 e pressões aplicadas na saída do canal de alimentação de 1, 2 e 3 MPa, análogo aos parâmetros adotados por De Pinho, Semião e Geraldês (2002).

Tabela 4.2 – Resultados de fluxo e fração mássica obtidos nas simulações realizadas em comparação com os dados experimentais De Pinho, Semião e Geraldês, (2002)

Resultado	Variáveis	Pressão aplicada		
		1 MPa	2 MPa	3 MPa
De Pinho, Semião e Geraldês, (2002)	J_v (10^{-5} m/s)	0,730	1,360	1,990
	m_a^{sp} (10^{-6} kg/kg)	54,000	37,000	29,000
Resultado simulado	J_v (10^{-5} m/s)	0,694	1,390	2,090
	m_a^{sp} (10^{-6} kg/kg)	50,400	35,400	31,000
Erro relativo (%)	J_v	4,932	2,206	5,025
	m_a^{sp}	6,667	4,324	6,897

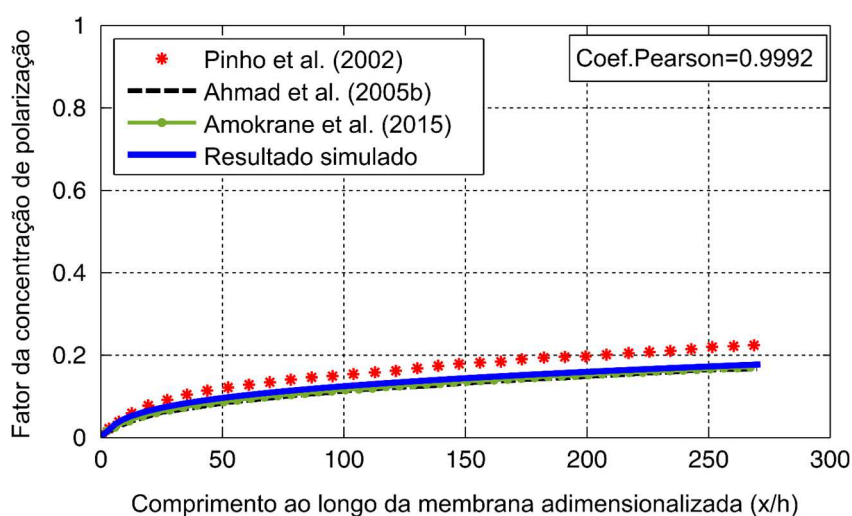
Fonte: Própria do autor.

Baseado nas informações expostas na Tabela 4.2, percebe-se que os resultados obtidos das simulações reproduzem com boa similaridade com os dados experimentais de De Pinho, Semião e Geraldês, (2002). Os valores dos erros relativos confirmam essa boa concordância apresentando um erro máximo de 5,025% no fluxo permeado e 6,897% na fração mássica, ambas pertencentes a simulação com 3 MPa de pressão aplicada. Resultados com erros relativos (experimentais versus simulados) dessa ordem podem ser encontrados nos trabalhos de Weihs

e Wiley (2014) e Koutsou, Yiantsios e Karabelas (2009). Algumas premissas podem ser dado como justificativas para os desvios entre os resultados e as de cunho computacional, como as simplificações dos modelos utilizados, parâmetros de entradas mais realísticos, valores residuais das simulações e, também, as de cunho experimental, conforme citado por Chen, Li e Elimelech (2004) que associa aos erros de medição e de sensibilidade das técnicas e dos instrumentos de medição.

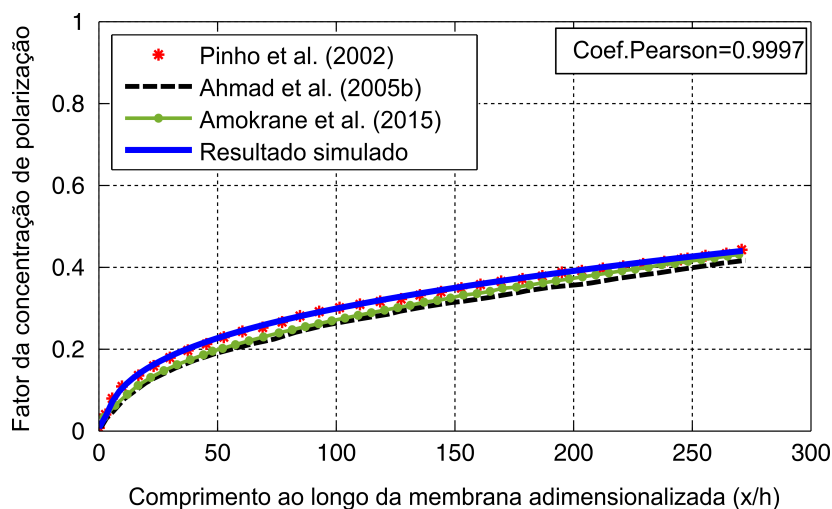
As Figuras 4.6, 4.7 e 4.8 ilustram as curvas do fator de concentração de polarização ao longo do comprimento da membrana obtidas pelo modelo proposto e extraídas nos trabalhos de De Pinho, Semião e Geraldles (2002), Ahmad et al. (2005b) e Amokrane et al. (2015). As curvas foram obtidas por simulações que possuíam as mesmas condições de processo ($Re = 1300$ na entrada com velocidade constante e variação da pressão aplicada em 1 MPa (Figura 4.6), 2 MPa (Figura 4.7) e 3 MPa (Figura 4.8)) e semelhança nas geometrias do domínio, com a exceção do trabalho proposto desta tese que adicionou o canal do permeado no domínio estudado. Assim como Ahmad et al. (2005b) e Amokrane et al. (2015), a validação do modelo proposto foi feita comparando as curvas com as de De Pinho, Semião e Geraldles (2002), escolhido como curvas de referências e que utilizou os dados experimentais de fluxo permeado e fração mássica como dados de entrada no modelo numérico para determinação das frações mássicas na superfície da membrana e, conseqüentemente a evolução do fator F .

Figura 4.6 – Comparação entre os resultados simulados e os obtidos por De Pinho, Semião e Geraldles (2002), Ahmad et al. (2005b) e Amokrane et al. (2015), para pressão de 1 MPa



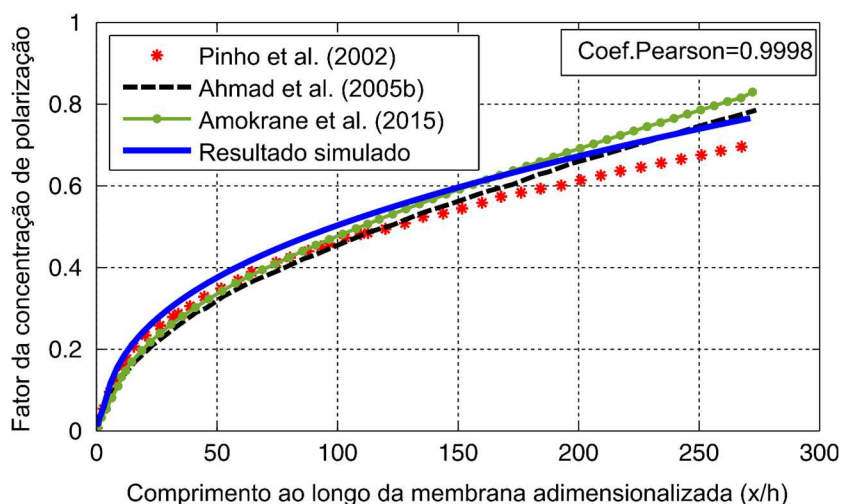
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.7 – Comparação entre os resultados simulados e os obtidos por De Pinho, Semião e Geraldes (2002), Ahmad et al. (2005b) e Amokrane et al. (2015), para pressão de 2 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.8 – Comparação entre os resultados simulados e os obtidos por De Pinho, Semião e Geraldes (2002), Ahmad et al. (2005b) e Amokrane et al. (2015), para pressão de 3 MPa



Fonte: Própria do autor.

Ao comparar as curvas com os resultados de De Pinho, Semião e Geraldes (2002), é possível observar, para cada pressão aplicada, que a curva que mais se ajusta com o gráfico feito por De Pinho, Semião e Geraldes (2002) é o resultado obtido pelo modelo proposto neste trabalho. Isso pode-se ser atribuído a aplicação de um modelo para caracterização do coeficiente de rejeição (R) com uso do coeficiente de reflexão (σ) calculado pelo modelo 1 desenvolvido por Anderson e Malone (1974) e o emprego das variáveis locais para alimentação das equações que descrevem as características do perfil hidrodinâmico do fluxo permeado e da seletividade

da membrana. Uma explicação para diferenças entre as curvas pode estar relacionada a ausência do efeito hidrodinâmico do fluxo permeado nos modelos usados por Ahmad et al. (2005b) e Amokrane et al. (2015) e na forma com que o modelo desta tese modela o coeficiente de reflexão e essa hidrodinâmica, o que fez com que as curvas tivessem um descolamento da curva de referência (De Pinho, Semião e Geraldês (2002)) e ter uma ligeira mudança no comportamento da curva (maior inclinação) em maiores pressões aplicadas na saída do concentrado, comportamento semelhante ao observado por Ahmad et al. (2005b).

Ao se comparar os resultados das simulações com os dados obtidos De Pinho, Semião e Geraldês (2002), percebe-se que seus comportamentos tem boa similaridade entre elas, no entanto há uma pequena variação taxa de crescimento das curvas (mais perceptível na pressão de 3 MPa aplicada na saída do concentrado) que pode ser atribuído ao uso de variáveis locais do domínio, como fluxo permeado, pressão e fração mássica do soluto que foram calculados em cada célula vizinha ao longo da membrana, enquanto que De Pinho, Semião e Geraldês (2002), no seu modelo, assumiram esses valores constantes para toda membrana.

Para quantificar a relação de correlação entre a curva de De Pinho, Semião e Geraldês (2002) e a do modelo proposto (resultado simulado), foi utilizado a correlação de Pearson⁹, que estão nas Figura 4.6, 4.7 e 4.8. Percebe-se que o coeficiente de Pearson para as três pressões analisadas está bem próximo da unidade, o que caracteriza uma forte correlação entre as duas curvas.

Assim, baseando a validação do modelo por meio da comparação da curva do fator de concentração de polarização ao longo da membrana de De Pinho, Semião e Geraldês (2002), pode-se afirmar que o modelo proposto apresentou uma boa similaridade no comportamento das curvas para as três pressões utilizadas para a análise, assim como foram obtidos pelos outros autores Ahmad et al. (2005b) e Amokrane et al. (2015).

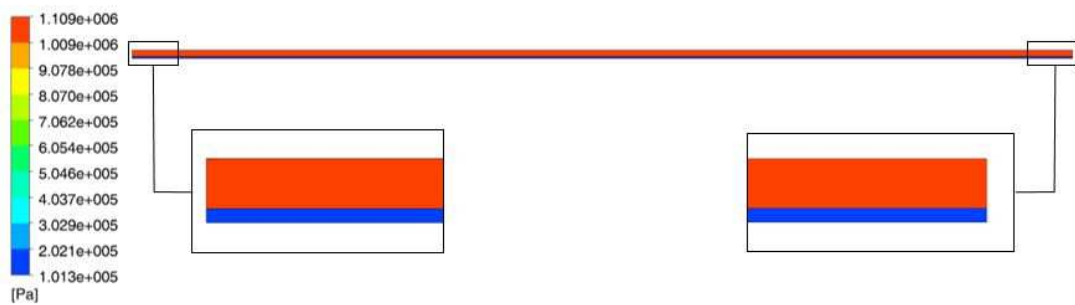
4.1.3 Análise da hidrodinâmica e da fração mássica do soluto

Foram realizadas simulações com o domínio 2D sem espaçador com os parâmetros de processos citados no Quadro 3.2 da seção 3.9. A Figura 4.9 ilustra o perfil de pressão absoluta nos canais de alimentação e permeado com parâmetros de processo de Re 500 e pressão aplicada

⁹ Coeficiente de Pearson é um parâmetro que varia num intervalo entre -1 e 1, em que mede grau de relacionamento entre duas variáveis, sendo que valores dos coeficientes calculados próximos de |1|, pode-se afirmar que variáveis tem uma fortemente correlação. A análise baseada no Coeficiente de Correlação de Pearson permite identificar, através de métodos matemáticos, qual o grau de influência ou de similaridade no comportamento entre duas variáveis (ARAÚJO; CARAN; SOUZA, 2016).

de 1 MPa na saída do concentrado. Nota-se que as pressões praticamente se mantêm constante ao longo do canal, sendo que o canal de alimentação está pressurizado com a pressão de 1,109 MPa e a do canal do permeado está a pressão atmosférica. Essa diferença nos canais caracteriza a pressão transmembrana, usada na equação do fluxo permeado do modelo de Spiegler e Kedem e é responsável, como força motriz, pela permeação no processo de osmose reversa.

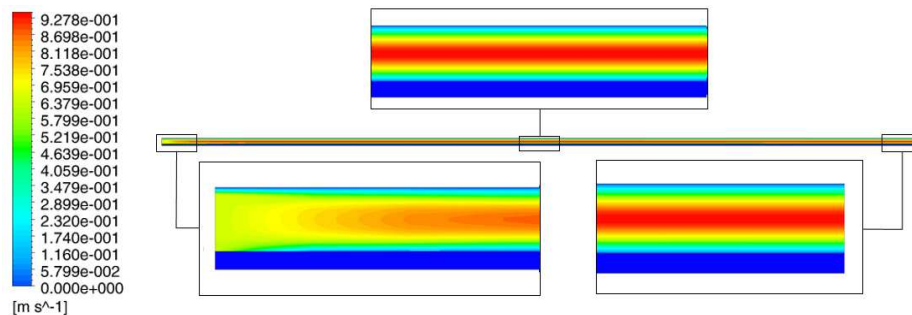
Figura 4.9 – Distribuição de pressão no domínio 2D (Pressão de 1 MPa na saída do concentrado e Re 500)



Fonte: Própria do autor.

A distribuição de velocidades dos canais para essa simulação está representada na Figura 4.10, verifica-se que as maiores velocidades estão no centro do canal de alimentação e que devido aos efeitos viscosos, as condições de velocidades nulas nas superfícies e a seção de entrada (velocidade constante com Re 500), o perfil de velocidade apresentam variações ao longo do canal e se estabiliza a medida que se afasta da seção de entrada, atingindo o perfil totalmente desenvolvido, como pode ser observado nas três regiões em destaque na Figura 4.10 (entrada, região a 0,1 m e no final do canal).

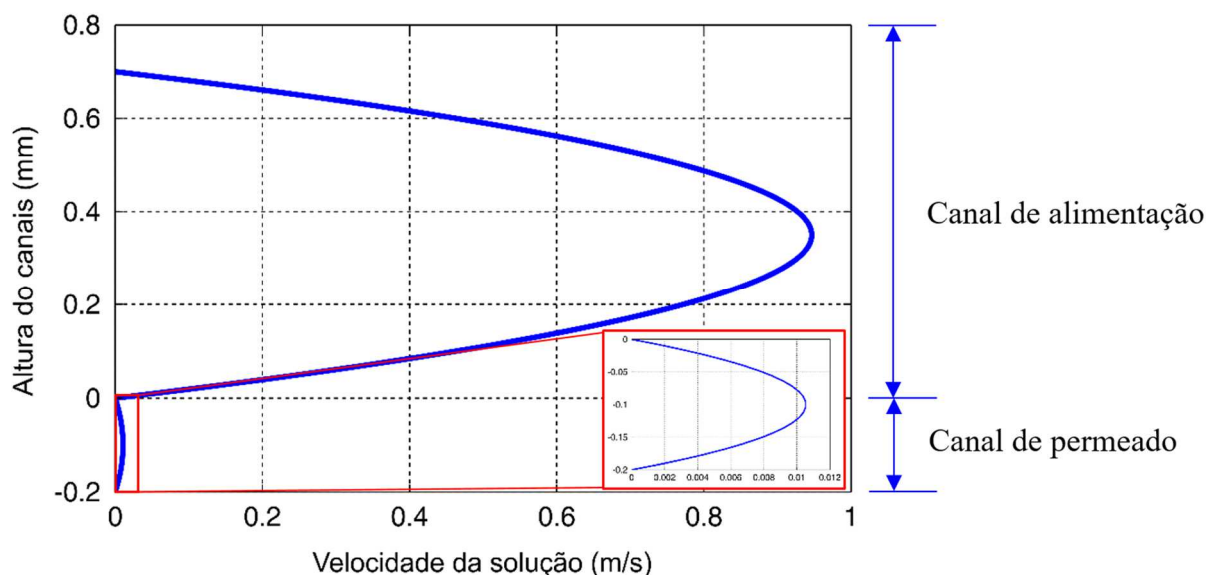
Figura 4.10 – Distribuição da velocidade no domínio 2D (Pressão de 1 MPa e Re 500)



Fonte: Própria do autor.

Na Figura 4.11 apresenta o perfil de velocidade em função da seção de saída dos dois canais, com a superfície da membrana em $y = 0$.

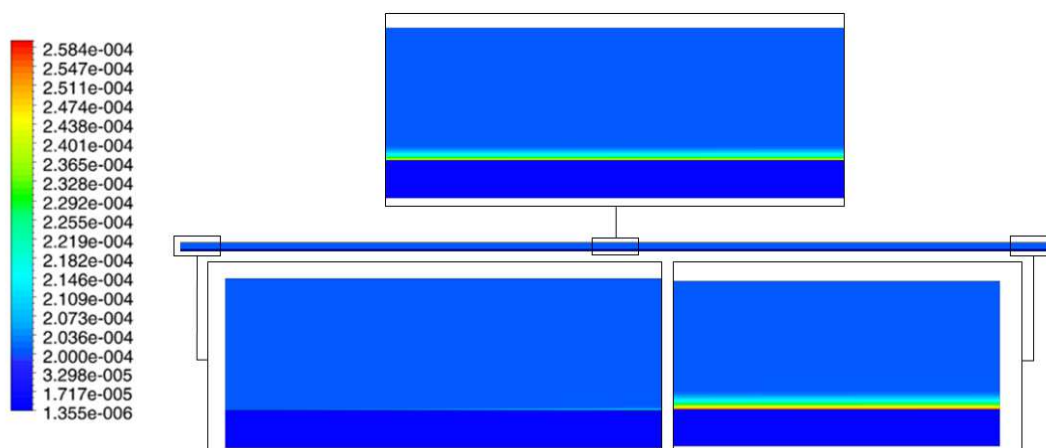
Figura 4.11 – Perfil da velocidade axial na região de saída dos canais



Fonte: Própria do autor.

A Figura 4.11 apresenta duas regiões em destaque, a primeira parte, correspondente entre $y = 0$ a $y = 0,7$ mm, representa o perfil de velocidade do canal de alimentação ou concentrado e a outra parte representa o escoamento o canal do permeado ($-0,2 < y < 0$). Ambas as curvas apresentam um comportamento parabólico com características de perfil de velocidade laminar clássico sob efeitos viscosos das paredes e o perfil praticamente não foi distorcido devido à presença fluxo transversal permeado quando comparado com eixo simétrico do canal, possivelmente isto ocorreu devido a valores baixos do fluxo permeado em comparação aos que foram encontrados nos canais e a não aplicação da gravidade na simulação, tal fato igualmente reportado por Fletcher e Wiley (2004), obtendo curvas semelhantes a Figura 4.11.

Na Figura 4.12 é ilustrada a fração mássica do soluto no domínio 2D sem espaçador e com pressão aplicada de 1 MPa na saída do canal de alimentação e escoamento na entrada de Re 500 com fração mássica do soluto equivalente a 0,0002. Além disso, há três imagens com destaques nas regiões de entrada, saída e no meio ($y = 0,1$ m) para permitir uma melhor exibição da distribuição da fração mássica.

Figura 4.12 – Distribuição da fração mássica do soluto no domínio (Pressão de 1 MPa e Re 500)

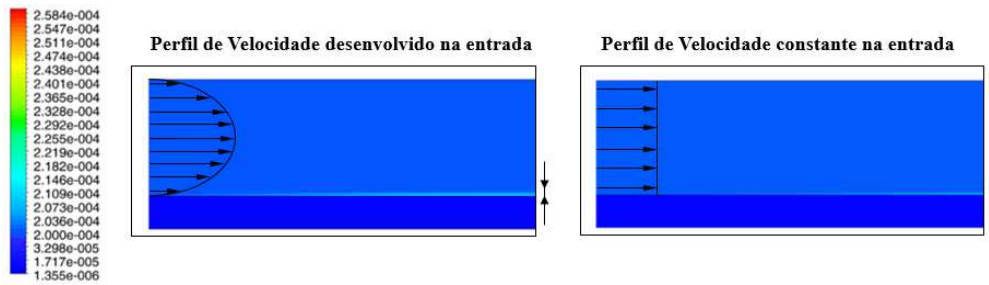
Fonte: Própria do autor.

Na Figura 4.12 é possível observar maior variação de fração mássica do soluto nas proximidades das células adjacentes à zona que caracteriza a membrana, definindo a formação da camada de polarização de concentração devido à presença seletiva dessa membrana na região. Resultados semelhantes foram obtidos experimentalmente por Salcedo-Díaz et al. (2014) e numericamente por Keir (2012) e Lira (2020).

Baseado nas três imagens destacadas, em cada região, percebe-se um aumento mais rápido do acúmulo do soluto na região de entrada e, logo depois, tem um desenvolvimento mais lento da camada polarizada à medida que vem se aproximando da região de saída, com pode ser visto comparando as imagens destacadas do meio e final do canal. Esse comportamento da camada polarizada está diretamente ligado ao balanço de fluxo convectivo e difusivo do soluto e ao comportamento hidrodinâmico do escoamento no canal, que, ao se alterar o tipo de perfil de velocidade na seção de entrada, tem-se uma variação no gradiente de fração mássica no soluto no início do canal próximo a membrana. Esta influência fica evidente ao observar a Figura 4.13, onde são representados os campos de fração mássica do soluto sobre a membrana para condições de seção de entrada com perfil parabólico de velocidade desenvolvida e com o perfil de velocidade constante, ambos com a mesma escala na legenda para auxiliar na comparação.

Outro ponto a observar nas Figuras 4.12 e 4.13 é que o menor valor de fração mássica do soluto está localizado na região do canal do permeado e que apresentou constância no valor ao longo do canal, tal constatação é verificada no processo quando é dito que o permeado apresenta baixíssima quantidade de soluto em comparação com o concentrado e com a solução que passa pela seção de entrada.

Figura 4.13 – Efeito do perfil de velocidade na seção de entrada sobre o comportamento da camada de concentração de polarização

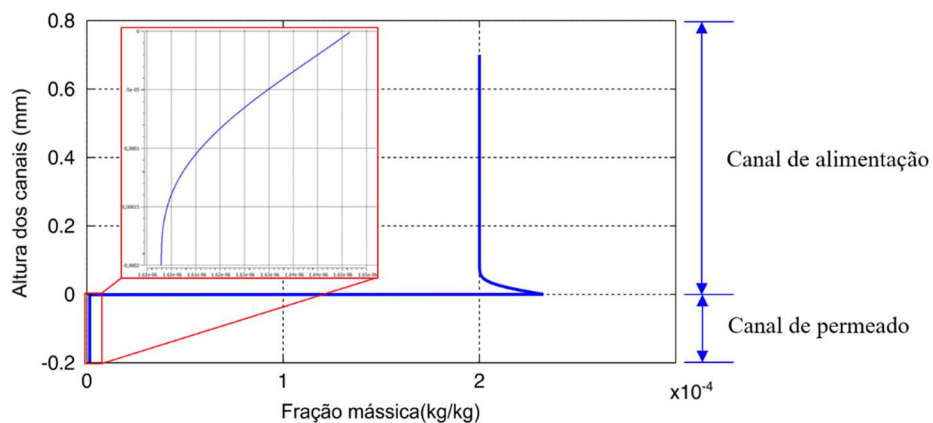


Fonte: Própria do autor.

Conforme os resultados apresentados na Figura 4.12, foram calculados os valores médios para fração mássica do soluto na zona de saída do canal do permeado e da entrada do fluido no domínio e pode-se obter um coeficiente de Rejeição calculado de 99,1% por meio da Equação 2.2 comumente utilizada para obtenção desse coeficiente. Tal valor se encontra dentro da faixa de 96,6 - 99,8% citados nos trabalhos de Oren e Biesheuvel (2018) e Dominguez-Tagle, Romero-Ternero e Delgado-Torres (2011) para um processo de dessalinização via osmose reversa com membrana de compósito com camada fina de poliamida (TFC), sendo esta a mesma membrana utilizada nas simulações neste trabalho.

Com a proposta de caracterizar a membrana, as Figura 4.14 e Figura 4.15 ilustram curvas da fração mássica do NaCl e do fluxo permeado na superfície da membrana no canal de alimentação, respectivamente. A Figura 4.14 exhibe a variação da fração mássica do soluto em função da altura do canal de alimentação e permeado, localizada a 0,1 m da entrada (no meio do canal), onde $y = 0$ é a posição da zona que representa a membrana.

Figura 4.14 – Curva da fração mássica na região $y = 0,1$ m

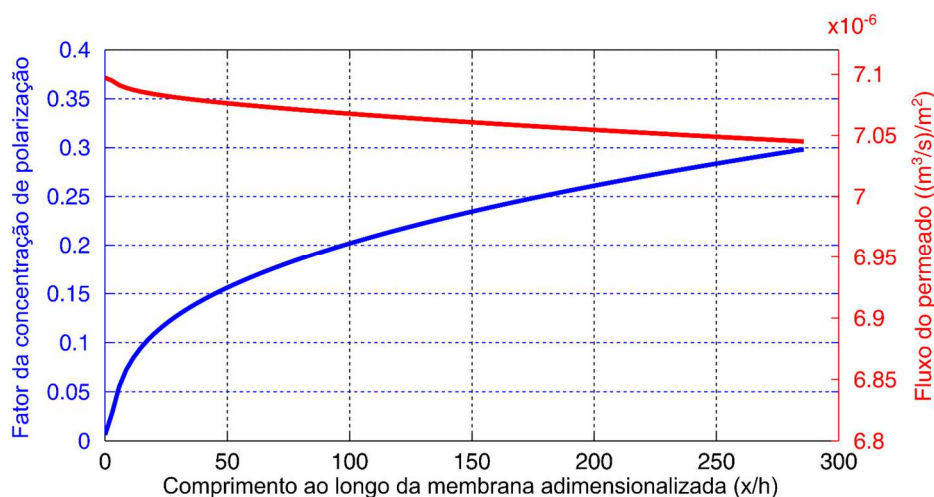


Fonte: Própria do autor.

A curva da Figura 4.14 possui um comportamento semelhante a reportada por Li et al. (2017), como ilustrado na Figura 2.15 e por Lira (2020). Nota-se na Figura 4.14 uma região com valor constante e igual a fração mássica do soluto na entrada e a medida que se aproxima da membrana, observa-se aumento progressivo da fração mássica do NaCl atingindo um valor máximo na superfície da membrana. Este comportamento foi observado experimentalmente por Salcedo-Díaz et al. (2014), onde caracterizaram este fenômeno como sendo polarização de concentração comumente encontrada nos processos de separação. Observa-se, ainda, na Figura 4.14 que a curva possui uma queda abrupta causada pela seletividade da membrana e, logo depois, no canal do permeado tem-se um diminuição da fração mássica do sal à medida que se afasta da superfície da membrana, como visto no detalhe da Figura 4.14.

Na Figura 4.15 estão representados o fluxo do permeado e o fator de concentração de polarização ao longo da superfície da membrana para o caso em que foi considerado a velocidade na entrada constante com Re de 500 e pressão de 1 MPa na saída do concentrado. Nota-se que a curva do fator da camada limite de concentração se desenvolve rapidamente na seção inicial do canal e fica cada vez mais lento ao se aproximar do final do canal, comportamento semelhante foi observado por Ahmad et al. (2005b), Li et al. (2019) e Weihs e Wiley (2014). Ainda, observa-se que, com o aumento do fator da concentração de polarização, há, numa análise local, um menor fluxo de permeado que passa pela membrana, concluindo que as variáveis têm um comportamento contrário entre si. Isso é ocasionado pelo o incremento da resistência do escoamento devido ao aumento da quantidade de sais na superfície da membrana, o que eleva a pressão osmótica e, portanto, dificulta a passagem do fluxo na membrana.

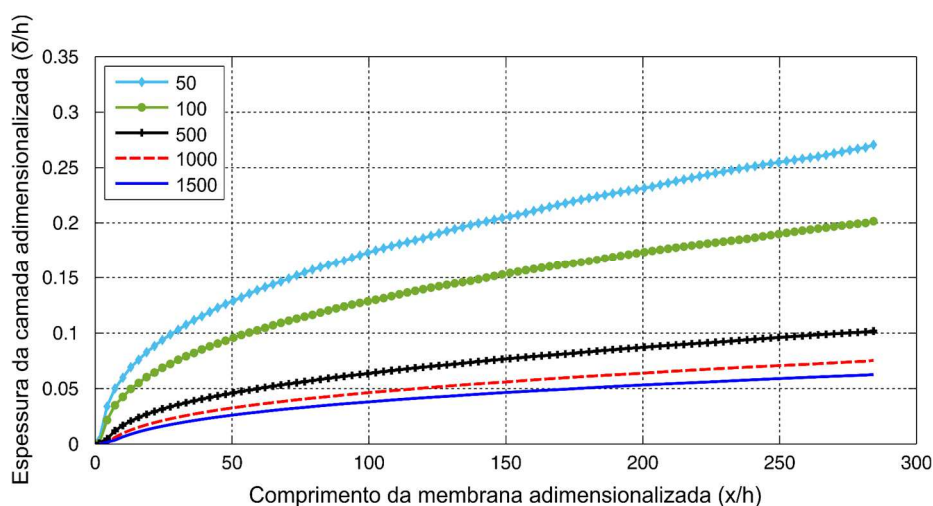
Figura 4.15 – Fluxo do permeado e o fator CP na superfície da membrana



Fonte: Própria do autor.

Na Figura 4.16 estão representadas as camada de concentração polarizada adimensionalizada (δ/h) em função do comprimento adimensional da membrana para diferentes números de Reynolds. As curvas foram geradas baseado nos dados obtidos de uma varredura de cada célula do concentrado utilizando uma rotina especialmente desenvolvida neste trabalho (UDF *curva_altura_cp*, vide ao Apêndice A - V).

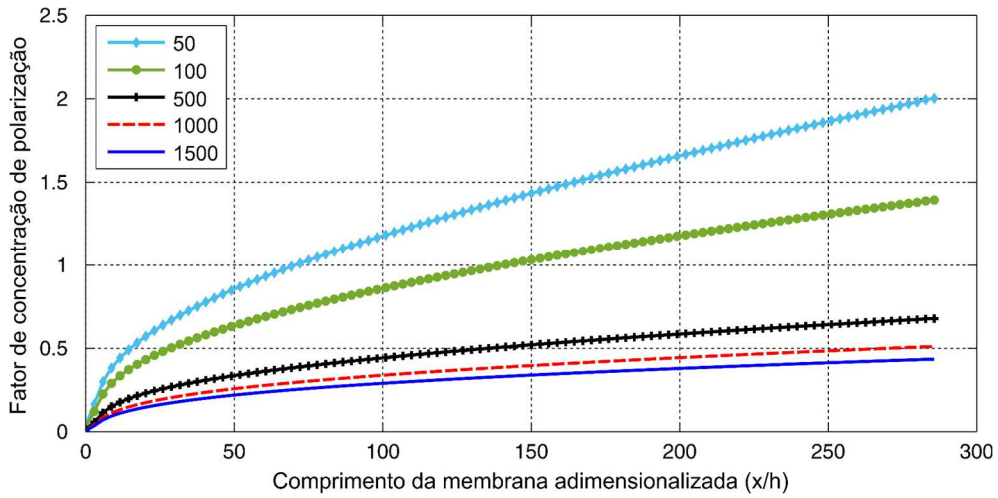
Figura 4.16 – Espessura da camada polarizada para diferentes Números de Reynolds



Fonte: Própria do autor.

As curvas da Figura 4.16 mostram que a espessura da camada de concentração de polarização é influenciada diretamente pela fluidodinâmica do escoamento, em que, com o aumento da velocidade do canal, ou seja, do número de Reynolds, há um achatamento da camada polarizada. Isso se dá pelo fato de que o aumento do número de Reynolds dos escoamentos proporciona um aumento da pressão próxima a superfície da membrana e um aumento do fluxo de permeado. Além deste fato, tem-se um aumento da velocidade tangencial na membrana o que proporciona um arraste do soluto e, conseqüentemente uma diminuição da espessura da camada. Outro ponto a ser destacado, igualmente observado por Ahmad et al. (2005b), é que maiores números de Reynolds proporciona maior efeito de limpeza da superfície da membrana minimizando, assim, a formação da camada polarizada. Além disso, para maiores valores de Reynolds não só induz uma espessura de camada limite de concentração mais fina, mas também causa um menor valor do fator de concentração de polarização, como pode ser visto na Figura 4.17 para os resultados obtidos a uma pressão de 2 MPa e velocidade da entrada constante variando o número de Reynolds de 50, 100, 500, 1000 e 1500. Esses resultados da Figura 4.17 ratificam os resultados de Li et al. (2019).

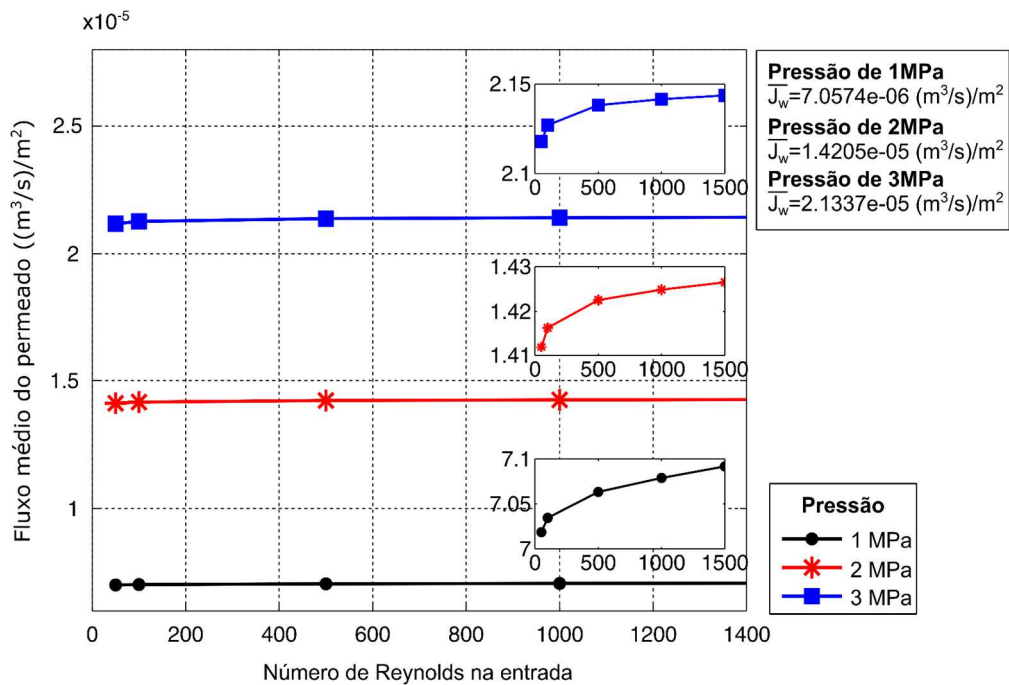
Figura 4.17 – Evolução do fator de concentração para diferentes números de Reynolds



Fonte: Própria do autor.

A Figura 4.18 apresenta os resultados do fluxo médio do permeado (\bar{J}_w) em função do número de Reynolds para pressões de 1, 2, 3 MPa na saída do canal de alimentação.

Figura 4.18 – Evolução do fluxo permeado calculado em função do número de Reynolds para diferentes pressões aplicadas



Fonte: Própria do autor.

Comparando as curvas, pode-se observar que o fluxo permeado aumenta com a pressão aplicada e com número de Reynolds, sendo que a pressão apresenta uma maior influência sobre

o fluxo de permeado do que o efeito do número de Reynolds da seção de entrada. Tal fato, é característico do processo, pois como a força motriz do escoamento do permeado é a pressão aplicada no canal de alimentação e, por isso, esta variável está presente diretamente na equação de fluxo permeado do modelo de Spiegler e Kedem. Com relação a número de Reynolds a sua influência está vinculado ao comportamento da camada de concentração de polarização, como foi visto na Figura 4.16, que com o aumento do número de Reynolds tem-se uma diminuição dessa camada e conseqüentemente, um decréscimo no valor da fração mássica do soluto na superfície, que alterará no termo referente a pressão osmótica da equação de Spiegler e Kedem.

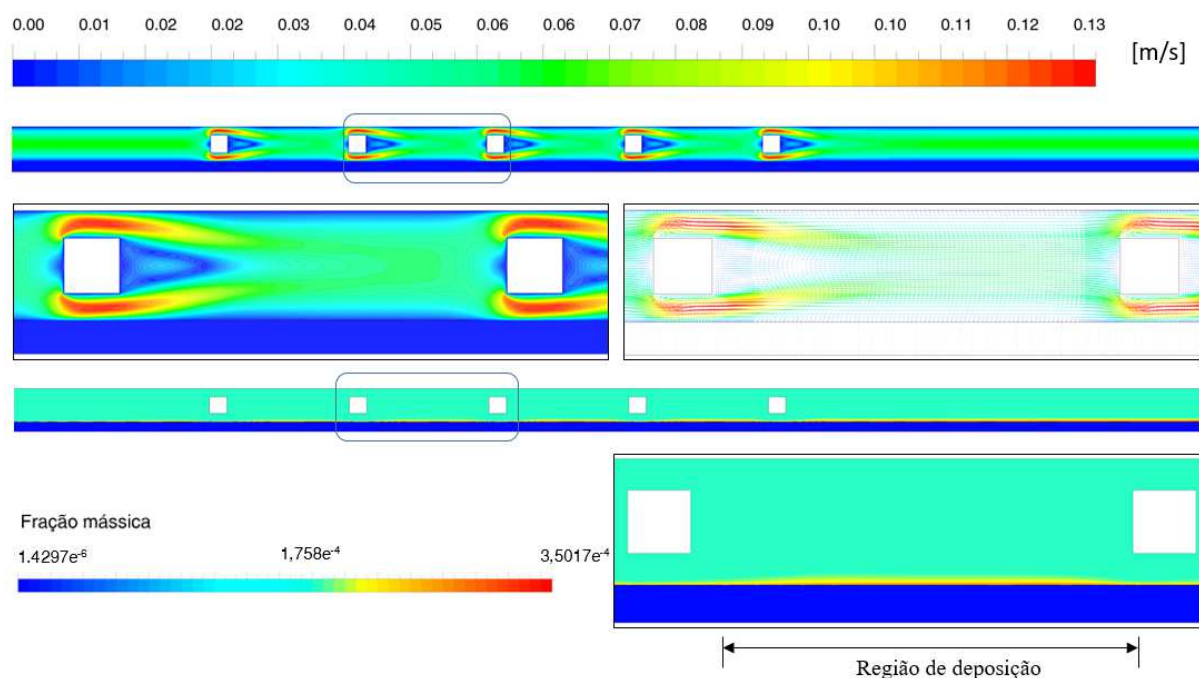
4.2 Geometria bidimensional com espaçadores

Os resultados desta seção foram conduzidos por meio de simulações que utilizaram o domínio bidimensional com espaçadores, assim como a modelagem numérica e os parâmetros citados na metodologia, vide capítulo 3. Nestas simulações foram empregadas, inicialmente, uma pressão variando entre 1 e 2 MPa na saída do concentrado e, na condição de entrada, aplicou-se um perfil parabólico plenamente desenvolvido de velocidade baseado na Equação 3.1 com número de Reynolds variando em 100, 200 e 300 e uma fração mássica de 0,0002. Assim, foi analisado o comportamento da camada de concentração de polarização no canal de alimentação e, também, do fluxo do permeado para um domínio com espaçadores de formatos quadrático, circular e triangular para os arranjos em zigue-zague e submerso. Logo depois, foram feitas análises do comportamento dos parâmetros médios de processo em função dos números de Reynolds de 50, 100, 150, 200 e 300 a uma pressão de 1 MPa. Os parâmetros escolhidos foram: fator e espessura da camada de polarização, fluxo permeado e pressão por unidade de comprimento.

4.2.1 Espaçador do tipo quadrado e com arranjo submerso

Para os casos com espaçador quadrático e arranjo submerso, são apresentados, na Figura 4.19, o campo de velocidade e fração mássica presentes nos canais do concentrado e do permeado para um Reynolds na entrada de 100 e uma pressão de 1 MPa. Para uma melhor análise, devido a escala do problema, uma região localizada entre o segundo e o terceiro filamento foi escolhido para um monitoramento do comportamento das variáveis de estudo.

Figura 4.19 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador quadrado e com arranjo submerso a $Re\ 100$ e pressão 1 MPa

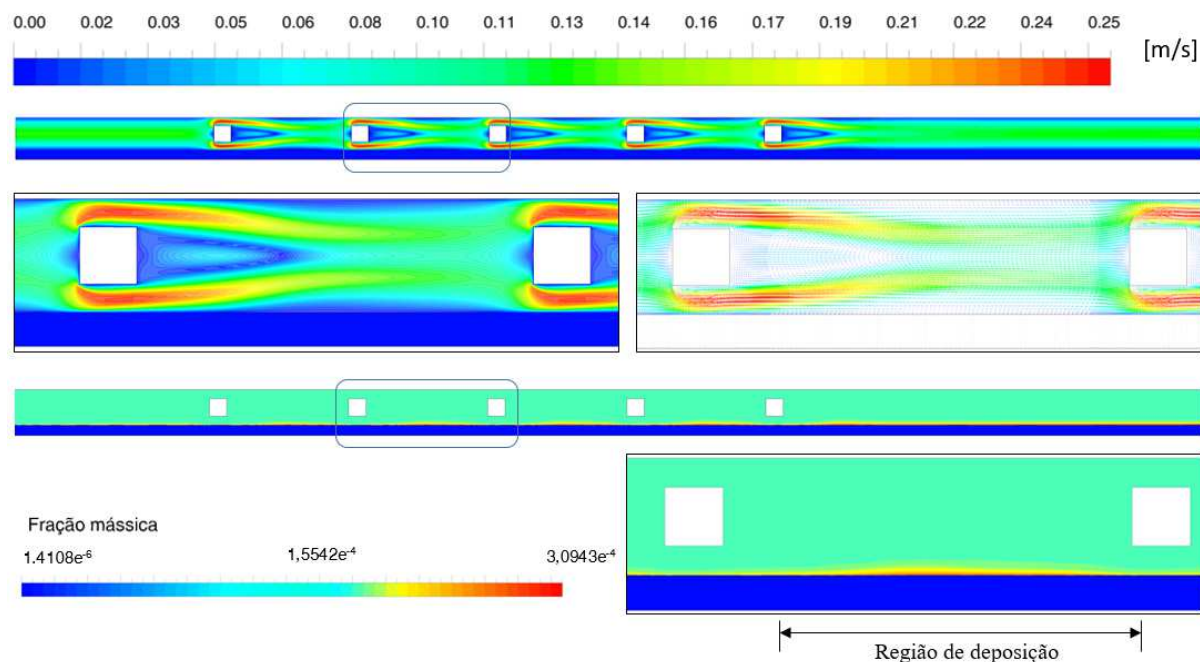


Fonte: Própria do autor.

A presença de espaçadores no domínio promove uma alteração no campo da velocidade e, conseqüentemente na distribuição da fração mássica do sal quando comparado com os resultados da distribuição para um canal sem espaçador, conforme visto na seção 4.1.3. A presença dos espaçadores força a condução do fluxo em direção da membrana e da parede do domínio, acarretando um campo local de alta velocidade que aumenta a força de arraste do soluto e, assim, a limpeza na parede da membrana. Estes resultados ratificam o comportamento observado por Ahmad, Lau e Abu Bakar (2005) onde o efeito de arrasto proporciona a aceleração e desaceleração do fluido nas proximidades da membrana e impede diretamente a formação de concentração de soluto na parede da membrana ou ocasiona a diminuição de sua espessura. Além disso, devido à baixa pressão e da esteira do escoamento formada logo após ao espaçador, o fluxo tende a se alinhar no meio do canal, diminuindo a sua velocidade e o efeito de arrasto próxima a membrana, o que promove um acúmulo do soluto na região subsequente, entre os filamentos, que em consequência aumenta a espessura da camada de concentração polarizada. Isso também foi observado por Anqi, Alkhamis e Oztekin (2015) e Ma, Kassinos e Fatta (2006).

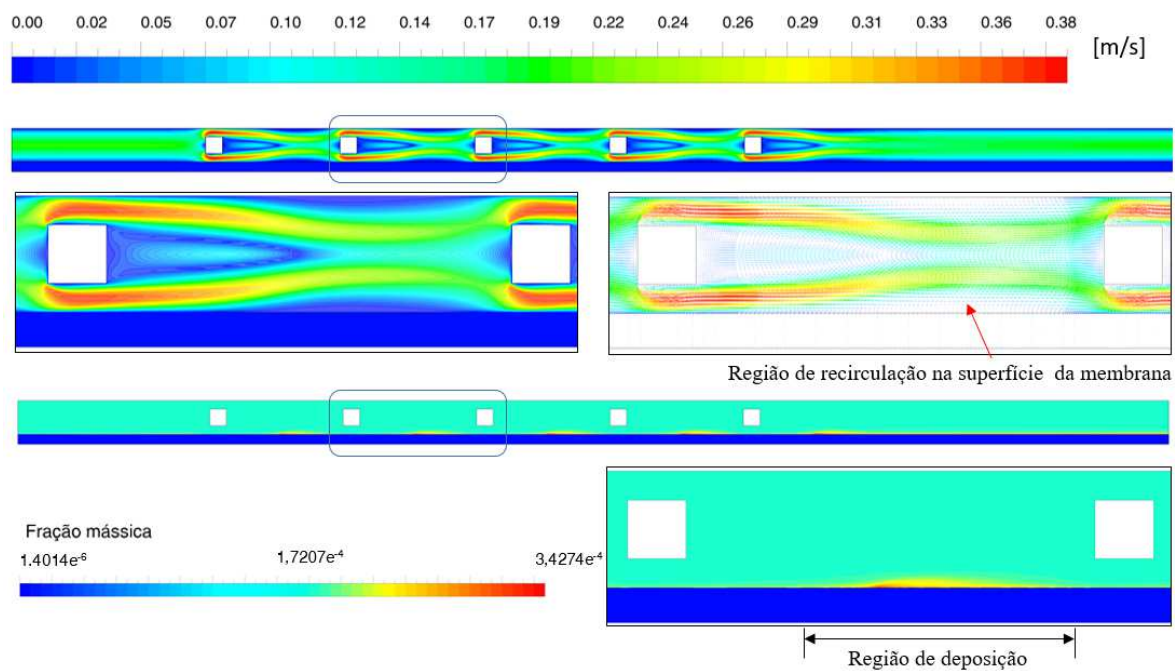
Os campos de velocidade e da fração mássica mantém-se a mesma tendência para número de Reynolds de 200 e 300, conforme visto Figura 4.20 e Figura 4.21, respectivamente.

Figura 4.20 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador quadrado e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.21 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador quadrado e com arranjo submerso a Re 300 e pressão 1 MPa

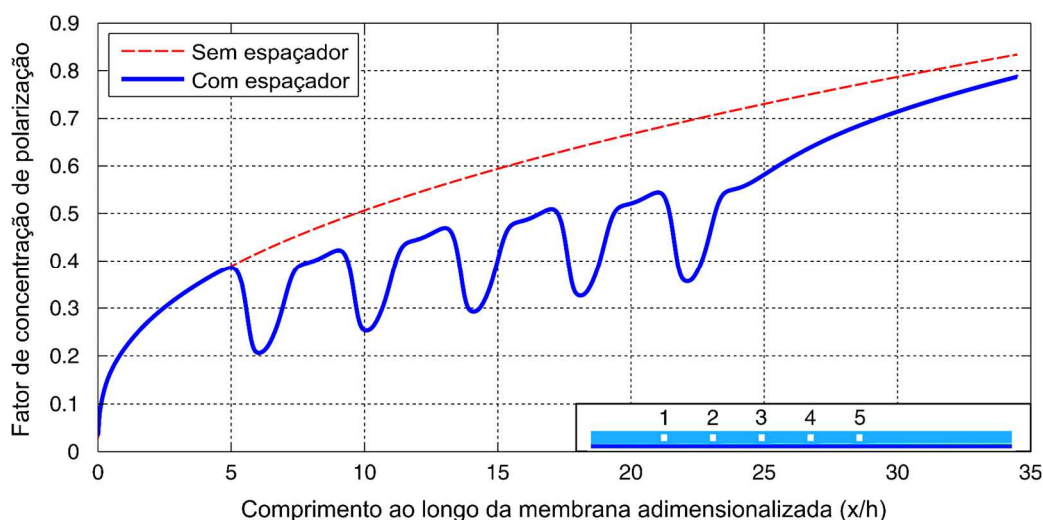


Fonte: Própria do autor.

Em comparação entre as distribuições de velocidade nos domínios, destaca-se uma tendência do alongamento da esteira e da elevação dos valores de velocidade nas regiões identificadas como de maiores velocidades (próximo do espaçador) quando há um aumento do número de Reynolds. Percebe-se que isso influencia na camada polarizada, no qual há uma tendência de deslocamento do soluto em direção do espaçador posterior, como consequência tem-se um maior aumento da espessura da camada mais próxima a região do outro espaçador. Isso é causado pelo aumento da força de arrasto motivada pela elevação da velocidade, o que disponibiliza uma maior energia para descolar do soluto da superfície da membrana ou da região que contém menores valores de velocidade, diferenciando, entre os resultados para Re 100, 200 e 300, a posição do local de deposição (em destaque nas imagens) e a espessura da camada neste local. Um ponto a destacar na Figura 4.21, ao observar o comportamento da fração mássica na membrana entre os dois filamentos, é que a região de deposição foi afetada pela presença do outro filamento, causando uma diminuição de sua espessura por causa do efeito de arrasto do espaçador subsequente e, assim transportando parte do soluto para a região seguinte.

A Figura 4.22 retrata o fator de concentração de polarização ao longo da superfície da membrana para o caso com pressão transmembrana de 1 MPa e número de Reynolds igual a 100. O gráfico apresenta duas curvas correspondentes a um domínio com espaçador e um outro domínio sem espaçador.

Figura 4.22 – Curvas do fator Γ para domínio com e sem espaçador (Re 100 e 1 MPa)



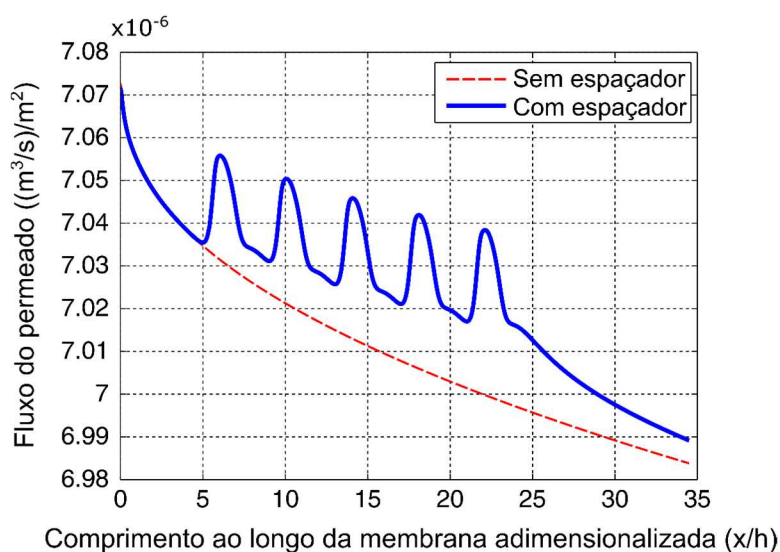
Fonte: Própria do autor.

Ao comparar as curvas, observa-se o efeito benéfico dos espaçadores no combate a camada polarizada, havendo uma diminuição dos valores ao se aproximar do primeiro

espaçador e expande para o resto da superfície da membrana. Baseado na métrica de média do fator (Γ), foi possível quantificar esse efeito, obtendo-se valores médios de 0,4953 e 0,5952 para as curvas com e sem espaçadores, respectivamente. Estes resultados indicam uma redução 16,78% nos valores de Γ ao longo da superfície com o uso de espaçador do tipo quadrado com arranjo submerso. No entanto, ao se comparar a perda de pressão por unidade de comprimento ($\Delta P/L$) devido à presença dos espaçadores tem um valor de 720,3 Pa/m, correspondente a um aumento de 5,06 vezes em relação a um canal sem espaçador.

Ao observar o comportamento da curva do fator de concentração de polarização da Figura 4.22, nota-se que, antes da corrente de fluidos atingir o primeiro espaçador, esse comportamento é idêntico ao da curva de um canal sem promotores. Ao alcançar os espaçadores há uma modificação do comportamento hidrodinâmico do escoamento, reduzindo-se, assim, o fator de concentração na superfície, auxiliando no processo remoção do soluto na membrana. Os vales apresentados na curva representam o efeito causado pelos cinco espaçadores presente no domínio. Após a passagem pelo último espaçador, a curva tende a apresentar um comportamento semelhante ao observado em um caso com ausência do espaçador, mas com uma redução de aproximadamente de 7,2%. Tais efeitos retratados possuem influências positivas no comportamento do fluxo permeado ao longo da membrana, conforme ilustrado na Figura 4.23.

Figura 4.23 – Perfis do fluxo permeado para domínio com e sem espaçador (Re 100 e 1 MPa)



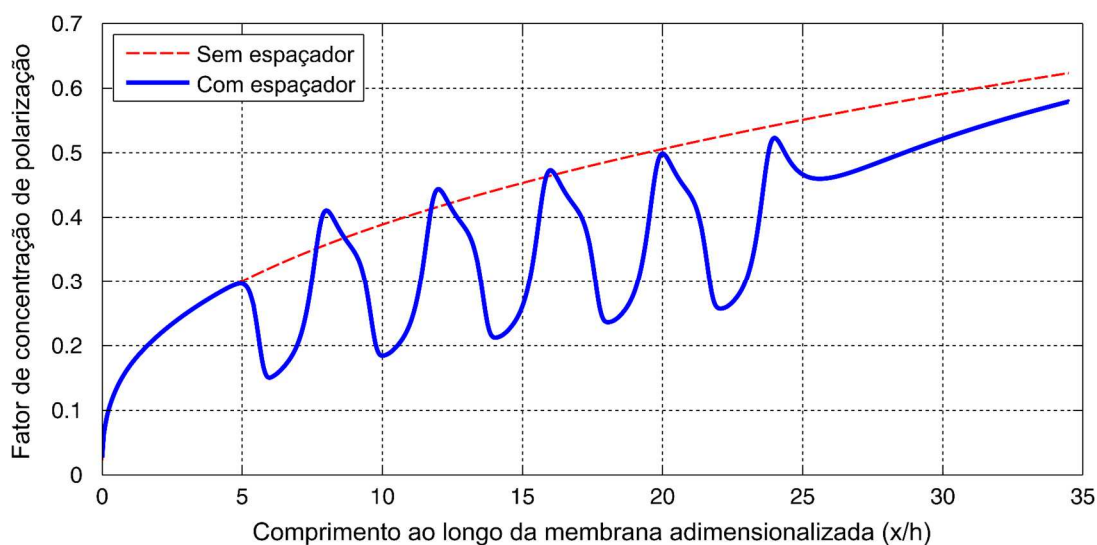
Fonte: Própria do autor.

Utilizando, novamente, a métrica da média para o fluxo permeado, foram obtidos valores correspondentes a $7,0112 \times 10^{-6} \text{ (m}^3/\text{s)/m}^2$ e $7,0227 \times 10^{-6} \text{ (m}^3/\text{s)/m}^2$ para as curvas sem e com espaçador, respectivamente, alcançando diferença de $0,0111 \times 10^{-6} \text{ (m}^3/\text{s)/m}^2$.

Estes resultados ressaltam uma importante constatação que a presença dos espaçadores conduz a um aumento do fluxo de permeado através da membrana. Além disso, os padrões de perfis de concentração de parede são refletidos de forma oposta na distribuição dos fluxos permeados (SONG; MA, 2005), análogo o que é visto nas curvas das Figura 4.22 e Figura 4.23.

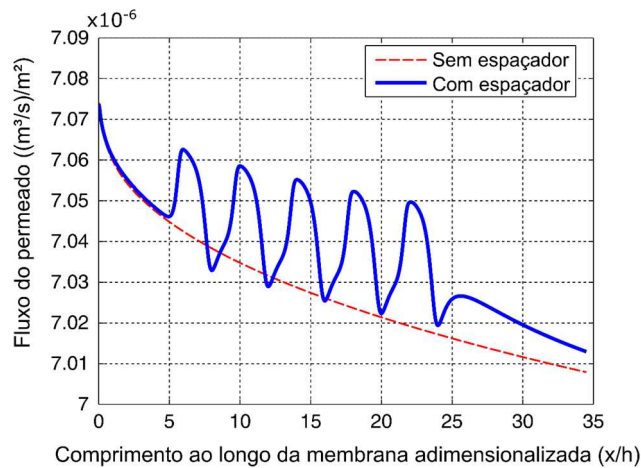
As Figura 4.24 e Figura 4.25 exibem o comportamento da variável fator de concentração de polarização e do fluxo permeado ao longo da superfície da membrana para o caso correspondente a $Re\ 200$, no qual também é notório capacidade dos espaçadores em promover a remoção do soluto nas regiões próximas a membrana. Além disso percebe-se nas curvas, comportamentos semelhantes às do caso de $Re\ 100$, principalmente quando se compara os gráficos de fluxo permeado. No entanto, o local entre os espaçadores tem uma diferenciação no comportamento da curva, em que para o caso de $Re\ 200$ existe uma tendência de formação de um pico que representa aquela região de disposição vista na Figura 4.20. A causa da formação do pico pode estar vinculada ao efeito hidrodinâmico causado pelo alongamento da esteira do escoamento e a distância entre espaçadores, o que não houve espaço para desenvolver um patamar conforme ilustrado na Figura 4.22.

Figura 4.24 – Curvas do fator Γ para domínio com e sem espaçador ($Re\ 200$ e $1\ \text{MPa}$)



Fonte: Própria do autor.

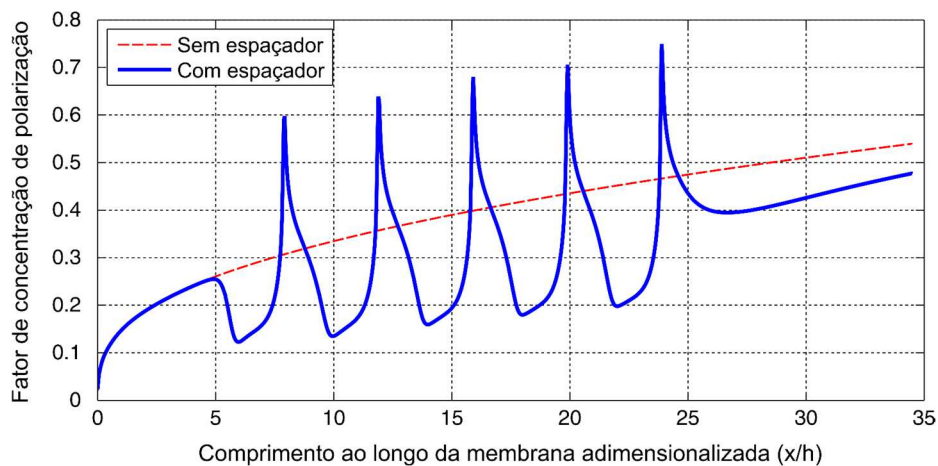
Figura 4.25 – Perfis do fluxo permeado para domínio com e sem espaçador (Re 200 e 1 MPa)



Fonte: Própria do autor.

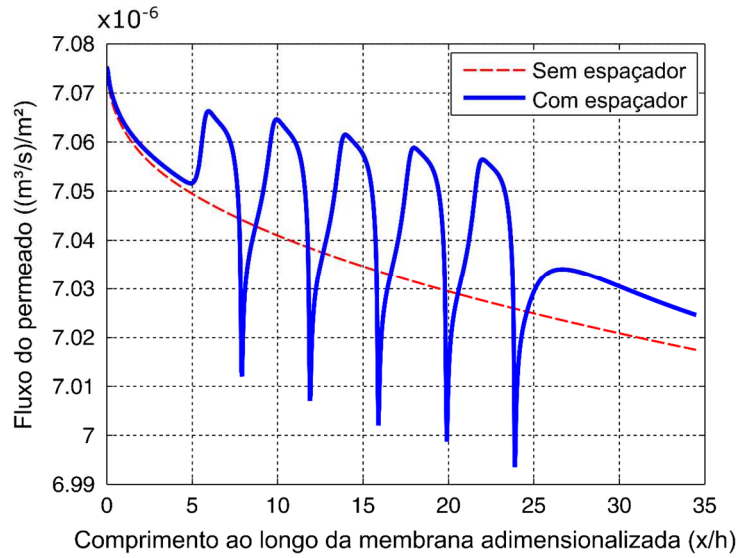
As Figura 4.26 e Figura 4.27 apresentam as curvas do fator Γ e do fluxo permeado para o caso de Re 300. Nas curvas, destaca-se os picos com maiores valores de fração mássica formados nas regiões entre os filamentos e os mesmos são refletidos de forma inversa na curva do fluxo permeado. Um dos fatores que contribui para a formação do pico de máxima concentração do soluto foi o surgimento de uma pequena zona de recirculação encontrada próximo ao espaçador seguinte (Figura 4.21), nos casos citados anteriormente, tal comportamento apenas apareceu nesse caso com maior número de Reynolds. Estes resultados ratificam o que Ahmad, Lau e Abu Bakar (2005) relatam, que esses comportamentos sejam causados por essas zonas de recirculação largas na área adjacente a membrana, em que destaca esse local como zona propícia ao aumento do fator de concentração.

Figura 4.26 – Curvas do fator Γ para domínio com e sem espaçador (Re 300 e 1 MPa)



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.27 – Perfis do fluxo permeado para domínio com e sem espaçador (Re 300 e 1 MPa)



Fonte: Própria do autor.

Com intuito de avaliar a influência dos vértices do espaçador quadrado, foram feitas simulações considerando um domínio bidimensional com espaçadores do tipo quadrado dispostos em submerso e vértices que possuem um arredondamento de raio igual a 0,1 mm, conforme detalhado no capítulo 3. A Figura 4.28 exibe o espaçador até então utilizado nesta seção e o espaçador com a proposta de arredondamento dos vértices. Esse estudo possui o intuito de aproximar da realidade encontrada na indústria de membrana que utilizam promotores de turbulência, uma vez que existem limitações do processo de fabricação da camada de espaçadores, tornando praticamente impossível ter um vértice sem um raio mínimo.

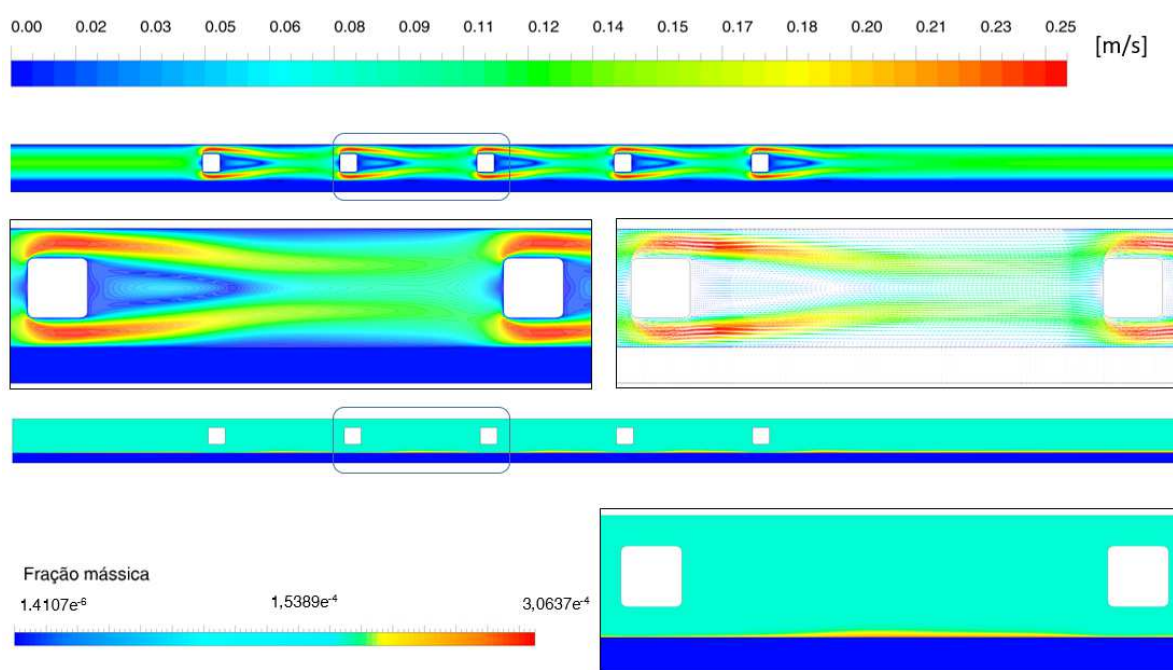
Figura 4.28 – Espaçador e Espaçador R01



Fonte: Própria do autor.

Os campos de velocidade e de fração mássica das simulações com os espaçadores R01 tiverem os mesmos comportamentos obtidos para os casos com espaçadores ilustrados nas Figura 4.19, Figura 4.20 e Figura 4.21. No entanto, quantitativamente, seus valores máximos e mínimos tiveram uma leve alteração no campo da velocidade, como pode ser visto na Figura 4.29 para o caso com parâmetros de número de Reynolds equivalente a 200 e pressão aplicada de 1 MPa.

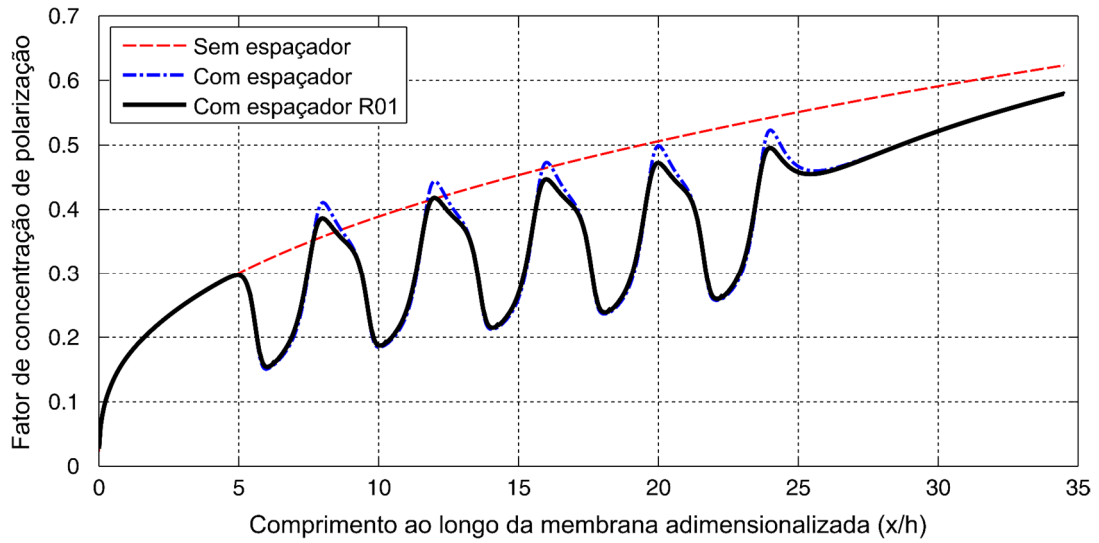
Figura 4.29 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador R01 e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

A Figura 4.30 apresenta três curvas do fator Γ ao longo do comprimento da membrana para o caso sem espaçador, com espaçador e com espaçador R01 todos com parâmetros de processo referente a Re 200 na zona de entrada e pressão aplicada de 1 MPa. Ao comparar as curvas que possuem espaçadores, percebe-se uma alteração na região dos picos com um achatamento do fator de concentração de polarização. Isso é causada pela forma com que o espaçador R01 altera o comportamento hidrodinâmico do escoamento, que, por possuir um vértice mais suave, foi capaz de direcionar e gerar uma maior energia cinética nas regiões após ao espaçador e adjacentes a membrana com o poder de descolar parte do soluto na camada, promovendo, assim, um achatamento.

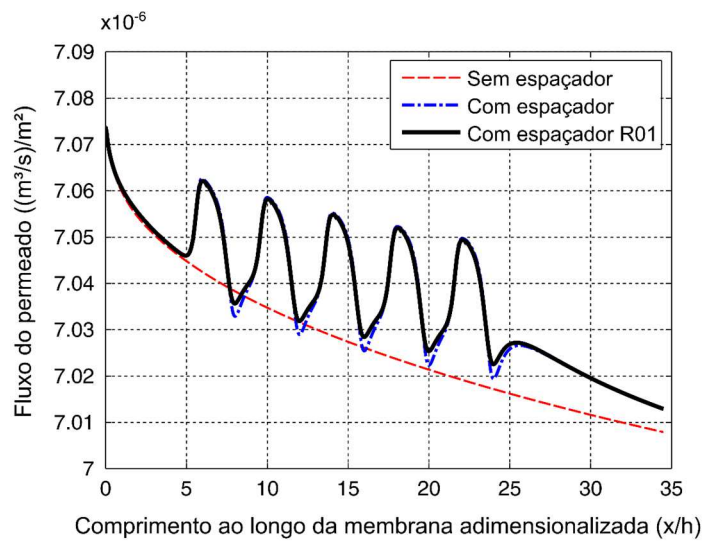
Figura 4.30 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 200 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

A Figura 4.31 ilustra a comparação do perfil do fluxo permeado entre as curvas para os três casos analisados. Assim como visto na Figura 4.30, houve uma alteração nos picos localizados entre os filamentos, que permitiu, através do uso da métrica da média do fluxo permeado, ter uma pequena diferença do fluxo médio de $7,0363 \times 10^{-6}$ (m³/s)/m², referente ao domínio com espaçador, para $7,0365 \times 10^{-6}$ (m³/s)/m² para o domínio com espaçador R01.

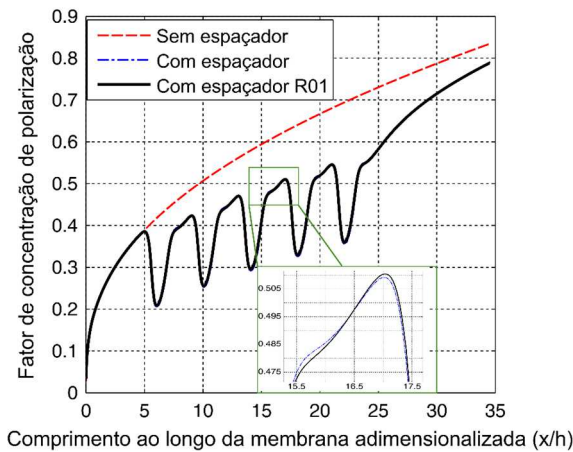
Figura 4.31 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

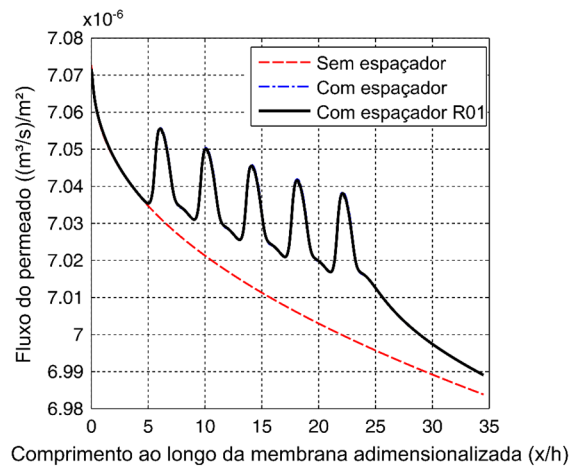
As Figuras 4.32 e 4.33 ilustram os resultados obtidos para o domínio com espaçador R01 sob Re 100 na entrada e pressão 1 MPa na saída do canal de alimentação. Devido aos valores de baixas velocidades presentes nesse caso, observa-se que os efeitos de arredondamento dos espaçadores foram praticamente nulos, pois não houve variações significativas nas curvas quando comparado para o outro caso com espaçador.

Figura 4.32 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 100 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

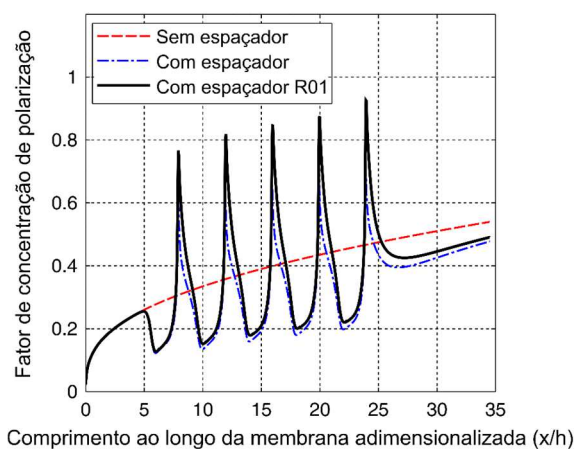
Figura 4.33 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

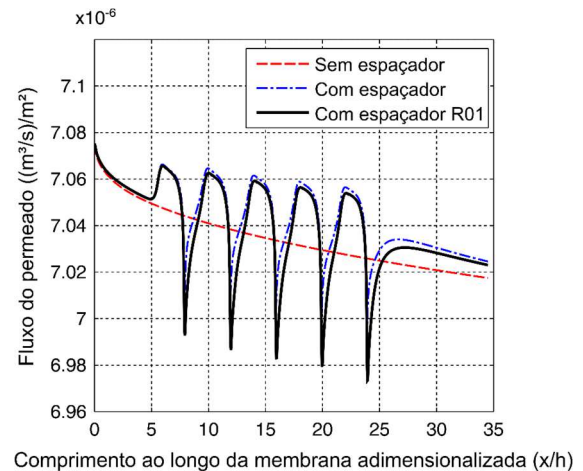
Os resultados obtidos na simulação com domínio com espaçador R01 sob Re 300 na entrada e pressão 1 MPa na saída do concentrado são ilustrados nas Figuras 4.34 e 4.35.

Figura 4.34 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

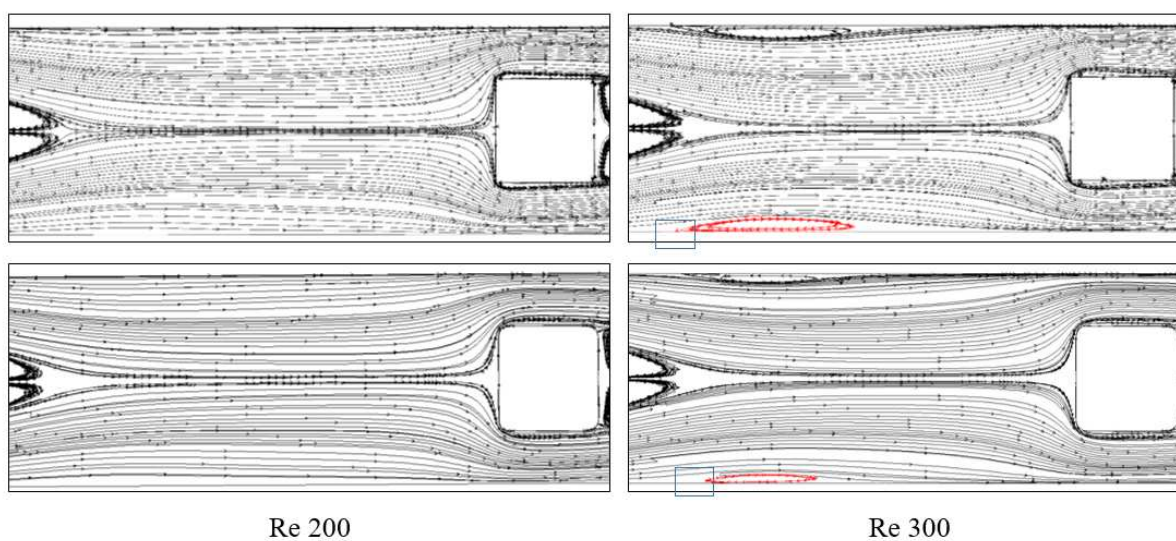
Figura 4.35 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Foi observado em ambos os gráficos das Figuras 4.34 e 4.35, um comportamento adverso com uso do arredondamento nos vértices do espaçador quando comparado com as demais curvas, possuindo um resultado contrário ao efeito benéfico visto com mais intensidade no caso com Reynolds na entrada igual a 200. Tal alteração é devido ao surgimento de zonas de recirculação nas proximidades da superfície da membrana (vide Figura 4.36), sendo mais proeminentes a geometria sem arredondamento. O comportamento também foi observado por Gao et al., (2013), onde eles relatam que as zonas de recirculação geram fluxo significativos normais a superfície da membrana e causa perturbações no comportamento do escoamento nas proximidades dos espaçadores. Outro ponto a ser destacados são os fluxos tangenciais impulsionados principalmente pelo movimento do fluido do canal de alimentação ou concentrado decorrentes das condições da seção de entrada. Seu desenvolvimento e distribuição espacial no canal são regidos principalmente pelas características geométrica e orientação do espaçador em relação ao canal. Assim, nos casos de Re 300 tem-se a predominância desses dois mecanismos, enquanto Re 200 apenas o mecanismo referente ao fluxo tangencial é presente de forma efetiva, pois esses espaçadores estudados precisam de altos valores de números de Reynolds para conseguir gerar zonas de recirculação efetiva próximos a superfície da membrana.

Figura 4.36 – Linhas de corrente do escoamento para os casos com espaçadores do tipo com e sem arredondamento nos vértices

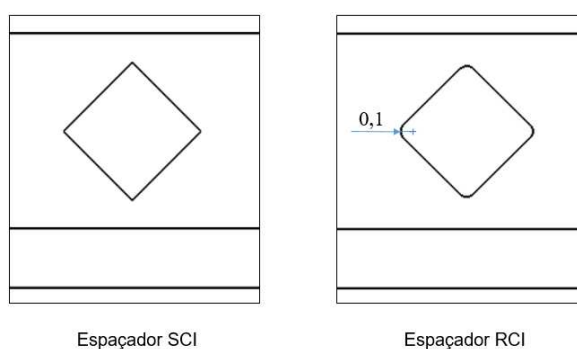


Fonte: Própria do autor.

Outro fato relevante que propicia o comportamento e o elevado valor dos picos ilustrado na Figura 4.34 está vinculado à região delimitada pelo retângulo na Figura 4.36, onde se encontram as correntes do fluxo tangencial e da zona de recirculação, que possuem direções opostas. Assim, além de formar uma zona de estagnação, essas correntes arrastam parte dos solutos das regiões adjacentes, em ambos os lados, para esse local, criando condições de depositar maiores quantidades de solutos quando comparado a outros locais do domínio. Referente à região de decaimento da Figura 4.34, logo após aos picos, pode-se afirmar que seus comportamentos estão relacionadas à intensidade e ao tamanho da zona de recirculação, o que pode explicar a presença de uma diferença nas curvas entre o espaçador sem arredondamento (maior zona de recirculação) e o espaçador R01 (menor zona de recirculação).

Com intuito de analisar o comportamento hidrodinâmico e a camada de polarização de concentração no canal de alimentação, foram dispostos os espaçadores quadráticos com e sem arredondamentos a 45 graus em relação à direção longitudinal do canal. Desse modo, foram realizadas simulações com geometrias bidimensionais, sob as condições de pressão aplicada equivalente à 1 MPa na saída do canal de alimentação e velocidade de entrada com perfil plenamente desenvolvido para três números de Reynolds de 100, 200 e 300. Na Figura 4.37 estão representados os formatos dos espaçadores e a disposição deles no canal de alimentação.

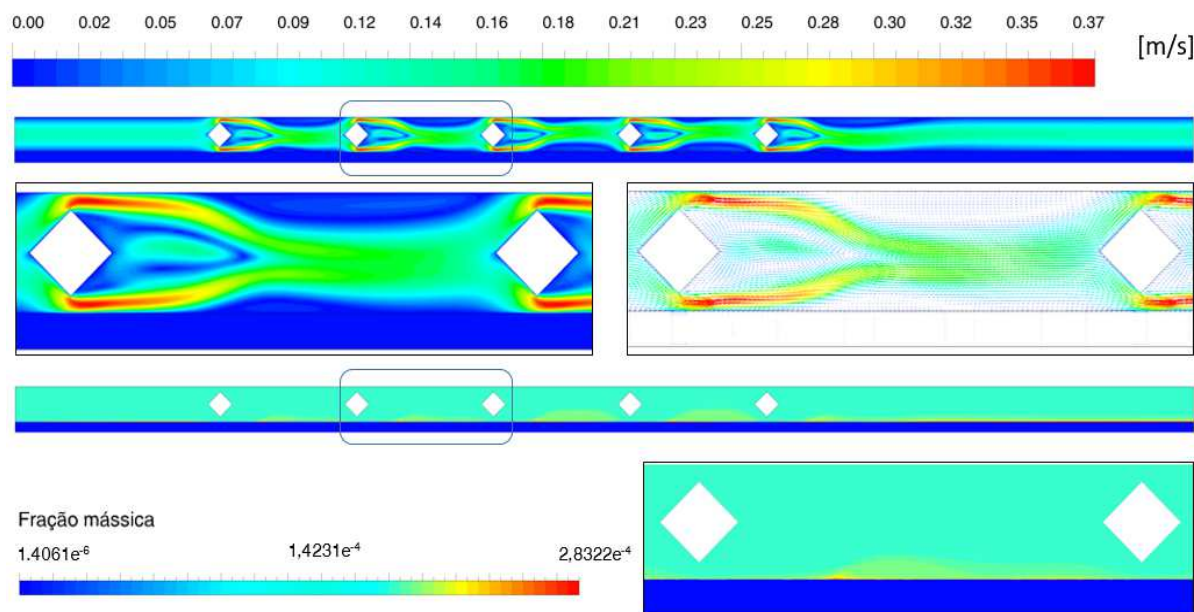
Figura 4.37 – Espaçadores SCI e RCI



Fonte: Própria do autor.

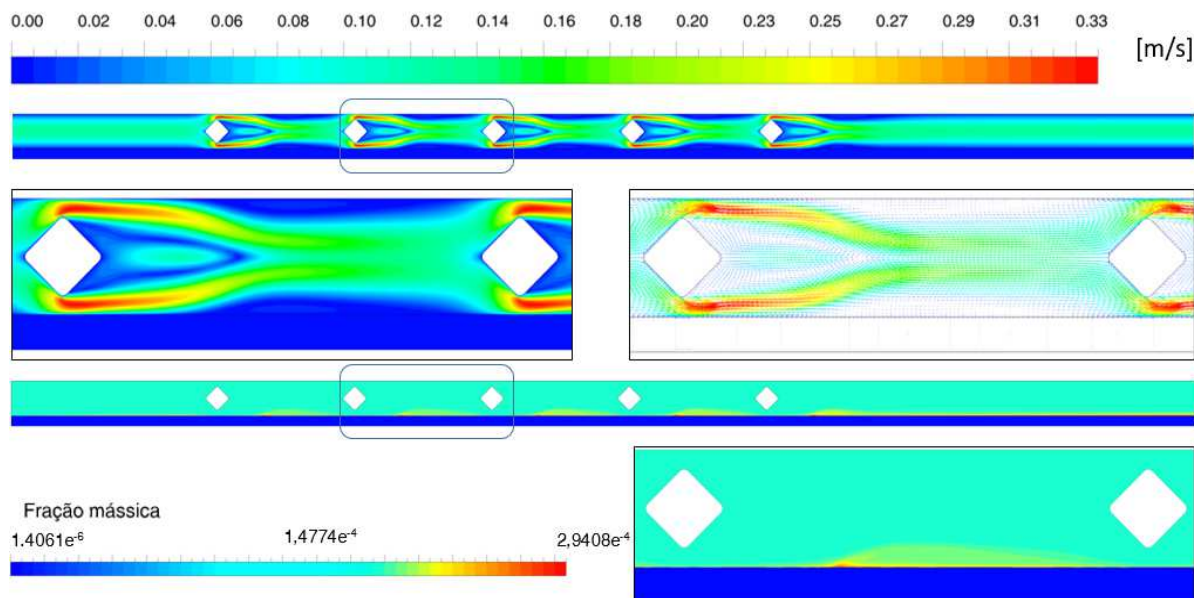
As Figuras 4.38 e 4.39 ilustram os campos de velocidades e a distribuição da fração mássica para as simulações com geometrias, que contêm os espaçadores apresentados na Figura 4.37, e condições de pressão e número de Reynolds na seção de entrada de 1 MPa e 200, respectivamente.

Figura 4.38 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador SCI e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.39 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador RCI e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa

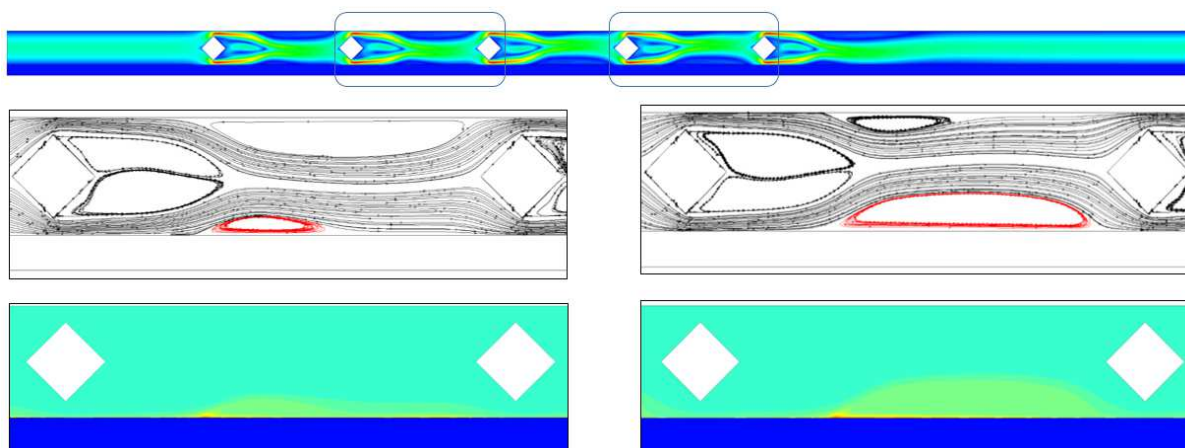


Fonte: Própria do autor.

Os perfis de velocidades expostos nas Figuras 4.38 e 4.39 apresentam características semelhantes aos outros perfis exibidos nesta seção, com o surgimento de esteiras após os promotores e formação de dois jatos de alta velocidade nas duas seções de constrição do fluxo acima e abaixo do espaçador. Nos casos das Figuras 4.38 e 4.39, tem-se uma intensificação dos efeitos desses jatos por possuir um efeito difusor no escoamento e por conter regiões de menor estreitamento. Ao comparar ambos os perfis de velocidades, percebe-se que, no caso com espaçador RCI o escoamento permanece simétrico e estável durante a passagem pelos espaçadores; já em relação ao espaçador SCI, há uma perda de simetria nos campos de velocidades ao longo do comprimento do canal em virtude do dano causado pelos vértices dos espaçadores, promovendo diferenças no formato das esteiras para cada promotor. Tal efeito pode ser característico de um fluxo com a tendência de instabilidade e isso é corroborado por Amokrane, Sadaoui e Dudeck (2015) e Koutsou, Yiantsios e Karabelas (2004).

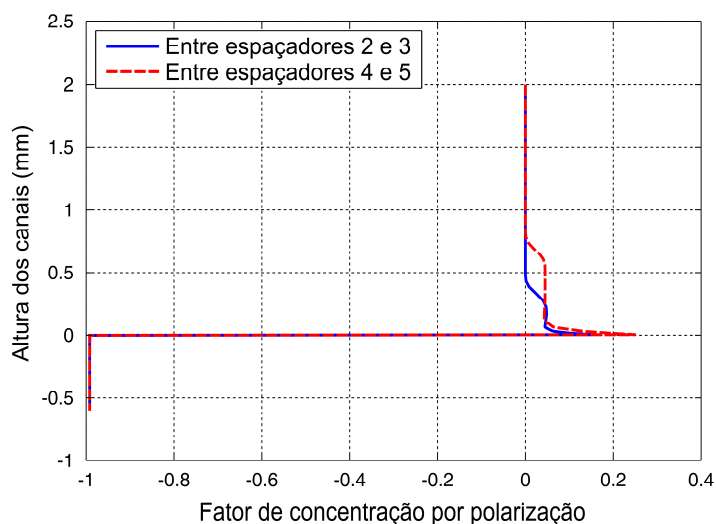
Essas instabilidades podem ocasionar variações do comportamento hidrodinâmico entre espaçadores, com distintas formações de regiões de recirculações e mudanças na distribuição da fração mássica na camada de concentração de polarização. Essa questão pode ser observada na Figura 4.40, em que mostra as linhas de correntes do escoamento e a distribuição da fração mássica em duas regiões do domínio com espaçador SCI. Isso também é perceptível na Figura 4.41 onde são apresentadas as curvas do fator de concentração por polarização ao longo das alturas dos canais para as regiões com distância da seção de entrada de 0,024 mm (entre espaçadores 2 e 3) e 0,040 mm (entre espaçadores 4 e 5).

Figura 4.40 – Comparação das linhas de correntes e distribuição da fração mássica das regiões demarcadas para o caso com espaçador SCI a Re 200 e pressão 1 MPA



Fonte: Própria do autor.

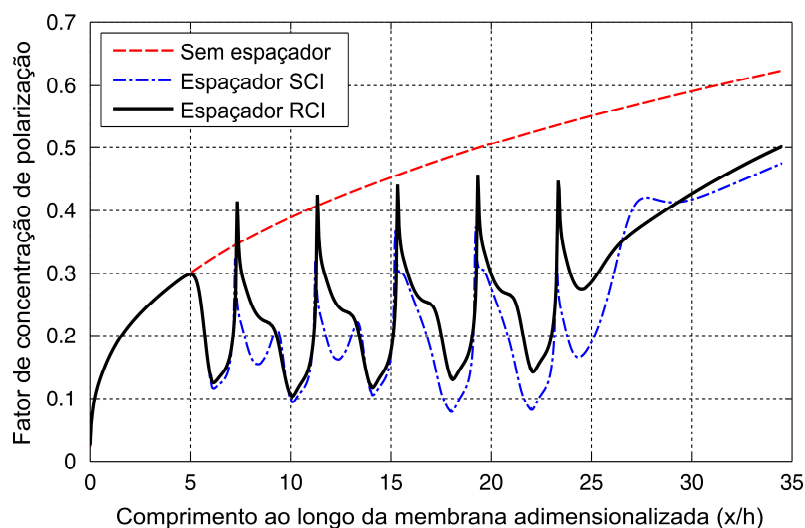
Figura 4.41 – Curvas do fator Γ para caso SCI com condição Re 200 e 1 MPa referente as regiões com distância da seção de entrada de 0,024 mm e 0,040 mm



Fonte: Própria do autor.

Na Figura 4.42 está representada a evolução do parâmetro de fator Γ para os casos das Figuras 4.38 e 4.39 e para simulação com geometria sem espaçador, ambos com as mesmas condições de contorno.

Figura 4.42 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 200 e 1 MPa

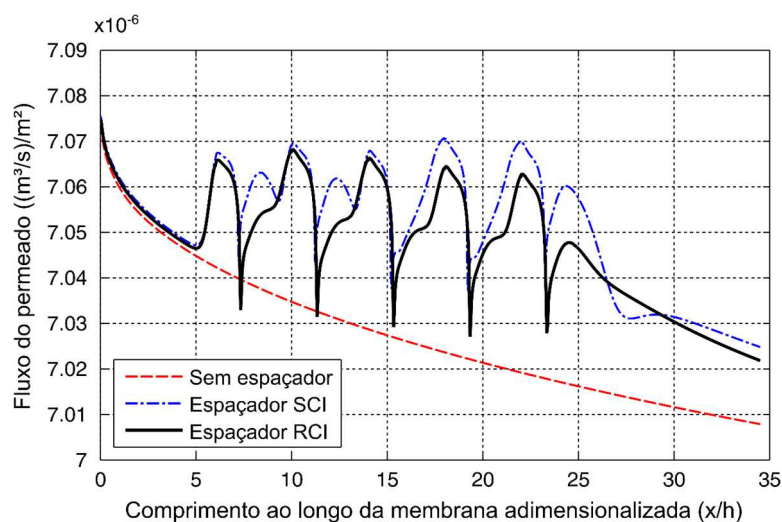


Fonte: Própria do autor.

As curvas da Figura 4.42 apresentaram as mesmas tendências das curvas dos casos com geometria que contém os espaçadores com e sem arredondamento, mostrando cinco picos correspondentes à influência de cada promotor e ao efeito benéfico na redução do fator provido

da alteração do comportamento hidrodinâmico causado pela presença dos espaçadores. Ao analisar a curva referente ao espaçador SCI, observa-se alterações no formato dos picos quando comparado antes e depois de $x = 15$, causada pela tendência de instabilidade do escoamento explicado anteriormente. Tal diferença é mais nítida nas curvas que caracterizam o fluxo permeado de cada caso (vide Figura 4.43). Ao comparar as curvas dos espaçadores SCI e RCI com as diferenças médias dos maiores picos, percebe-se que houve uma redução de 19,5% dos picos para o caso espaçador RCI, refletindo, no caso SCI, um aumento da produção do fluxo permeado, com diferença de $0,0038 \times 10^{-6} \text{ (m}^3/\text{s)/m}^2$.

Figura 4.43 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa



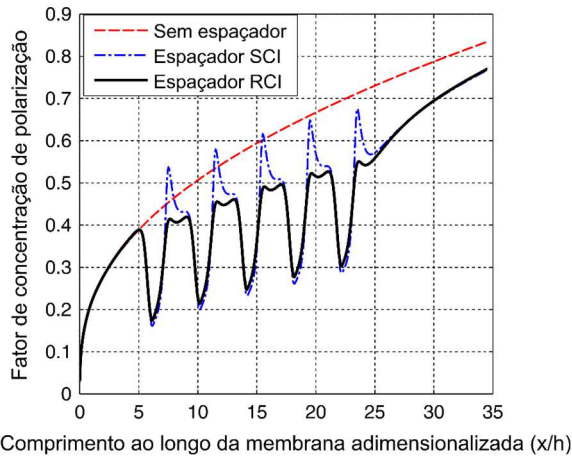
Fonte: Própria do autor.

Para as simulações com essas mesmas geometrias e com as condições de contorno na seção de entrada de Re 100 e pressão 1 MPa, foram construídos os gráficos das Figuras 4.44 e 4.45 correspondentes às curvas do fator de concentração de polarização e fluxo permeado ao longo do comprimento da membrana adimensionalizada (x/h). Ao comparar os resultados desses espaçadores com os das Figuras 4.32 e 4.33, que têm as mesmas condições de operação, nota-se que o efeito da rotação dos espaçadores para uma posição a 45 graus intensificou a influência dos arredondamentos, apresentando nas Figuras 4.44 e 4.45 uma maior diferença entre as referidas curvas correspondentes, ao contrário do que é visto nas curvas das Figuras 4.32 e 4.33, onde a distância entre curvas é praticamente desprezível.

Utilizando a métrica da diferença entre as médias do fator I das curvas referente espaçador com e sem arredondamento (Figuras 4.32 e 4.33) e da mesma forma com as curvas dos promotores SCI e RCI, obteve-se diferenças de 0,0022 e 0,0116, respectivamente, o que

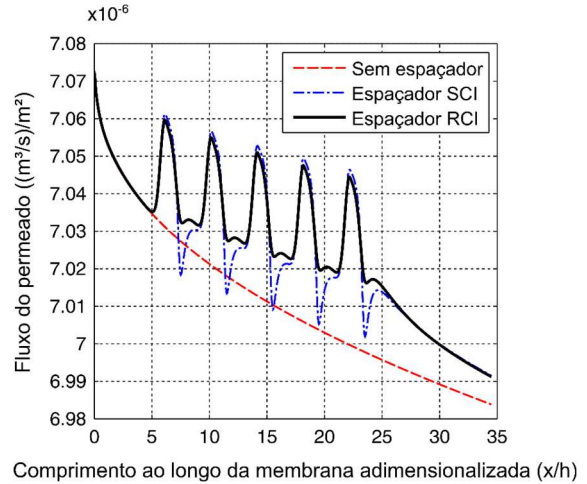
significa um aumento da diferença de 5,27 vezes, caracterizando o poder da rotação na intensificação do efeito do arredondamento dos vértices.

Figura 4.44 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 100 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

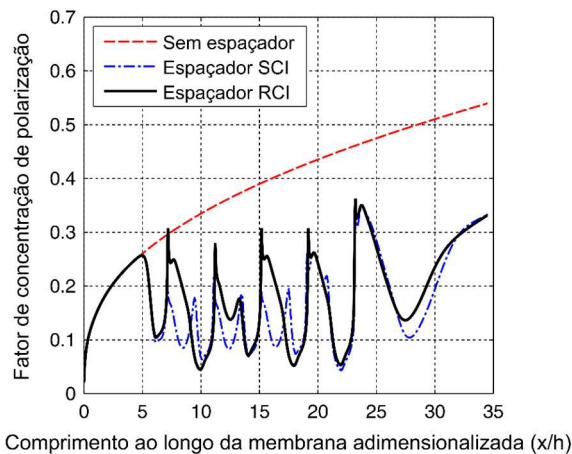
Figura 4.45 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

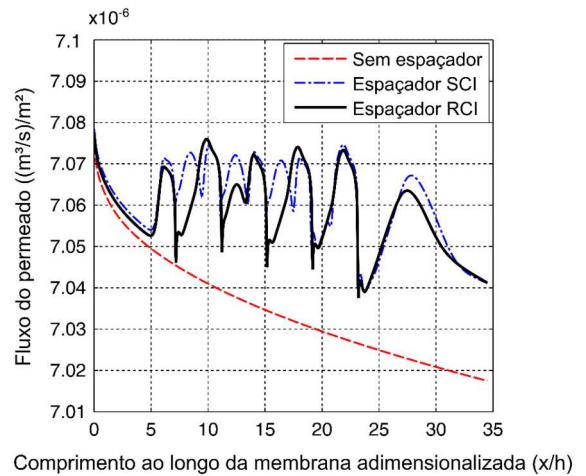
As Figuras 4.46 e 4.47 ilustram as curvas do fator Γ e do fluxo permeado para as condições de Re 300 e pressão de 1 MPa.

Figura 4.46– Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.47– Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Foi visto nos resultados para os casos com Re 300 e 1 MPa que os efeitos dos espaçadores na camada polarizada e no fluxo foram maiores do que os outros casos com geometria semelhante e condições diferentes, havendo, para os promotores SCI e RCI, uma

redução do fator Γ médio de, aproximadamente, 58,0% e 54,3% em relação ao caso sem espaçador, respectivamente. No entanto, em detrimento a esse benefício, houve um crescimento na pressão por unidade de comprimento de 24,48 vezes do caso sem espaçador, em relação ao caso com SCI e de 16,36 para o caso com RCI.

O aumento da perda de pressão e a redução médio do fator Γ com incremento do número de Reynolds é esperado, pois um escoamento com maiores velocidades na presença dos espaçadores promove formação de zonas de recirculações e maiores velocidades tangenciais na superfície da membrana com poder de retirar os solutos. Isso reduz a capacidade de formação de incrustação no processo, mas será necessário um maior custo energético para manter essas condições, fato esse ratificado por Jeong et al. (2020) e Saeed (2012).

Quanto às simulações dos casos com pressão de aplicação de 2 MPa na saída do concentrado e condições de simulação semelhantes aos resultados da seção 4.2.1, notou-se que apresentaram comportamentos dos fenômenos de processo análogos aos dos casos com pressão 1 MPa, o que alteraram foram os valores das variáveis, cujas médias estão dispostas na Tabela 4.3. Tal tabela apresenta a perda de pressão por unidade de comprimento e os valores médios do fator da concentração de polarização e do fluxo permeado para as geometrias estudadas sob as condições de operações variando o número de Reynolds de 100, 200 e 300 e a pressão aplicada de 2 MPa. Os valores da perda de pressão foram obtidos pela diferença de pressão média da entrada e saída do canal de alimentação e as outras duas variáveis foram calculadas realizando a média dos valores de cada célula pertencente a zona que representa a membrana.

Para quantificar a comparação entre os casos, foi utilizado a métrica SPMP (Razão de Performance do Espaçador), que é calculada pela Equação 4.2, conforme Schwinge, Wiley e Fletcher (2002).

$$SPMP = \frac{\Delta c_{\text{espaçador}} / \Delta c_{\text{sem espaçador}}}{\Delta P_{\text{espaçador}} / \Delta P_{\text{sem espaçador}}} \quad (4.2)$$

onde Δc e ΔP representa a diferença de concentração e pressão entre a saída e entrada do canal de alimentação, respectivamente. Ambos parâmetros são retirados nos casos com mesma condição de operação, em que se comparam as simulações com espaçador em relação às sem espaçador.

Um espaçador é dito mais eficiente quando apresenta o maior valor SPMP dentre os promotores analisados, indicando um alto aprimoramento de transferência de massa em um

aumento pequeno da perda de pressão ao longo do canal (SCHWINGE; WILEY; FLETCHER, 2002). Os valores de SPMP para os casos simulados, também são encontrados na Tabela 4.4.

Tabela 4.3 – Valores médios do fator Γ e do fluxo permeado e perda de pressão para geometrias estudadas sob uma pressão aplicada de 2 MPa

Geometria	Re	$\bar{\Gamma}$	\bar{J}_v	$\Delta P/L$
Sem espaçador	100	1,506	1,4101x10 ⁻⁵	117,4
	200	1,092	1,4148x10 ⁻⁵	236,2
	300	0,638	1,4168x10 ⁻⁵	355,1
Com espaçador	100	1,24	1,4131x10 ⁻⁵	717,4
	200	0,901	1,4170x10 ⁻⁵	1852,2
	300	0,758	1,4186x10 ⁻⁵	3304,3
Com espaçador R01	100	1,247	1,4130x10 ⁻⁵	665,2
	200	0,901	1,4170x10 ⁻⁵	1685,5
	300	0,868	1,4174x10 ⁻⁵	2986,6
Com espaçador SCI	100	1,136	1,4143x10 ⁻⁵	1382,6
	200	0,479	1,4218x10 ⁻⁵	4426,1
	300	0,361	1,4233x10 ⁻⁵	8714,5
Com espaçador RCI	100	1,100	1,4147x10 ⁻⁵	1026,1
	200	0,608	1,4203x10 ⁻⁵	3081,2
	300	0,390	1,4229x10 ⁻⁵	5824,6

Fonte: Própria do autor.

Tabela 4.4 – Valores SPMP para os casos com arranjos submersos

Geometria		SPMP	
		1 MPa	2 MPa
Com espaçador	100	0,172270	0,173140
	200	0,133098	0,133031
	300	0,106993	0,108771
Com espaçador R01	100	0,185957	0,187057
	200	0,146339	0,146329
	300	0,123053	0,124326
Com espaçador SCI	100	0,040699	0,081084
	200	0,041874	0,033187
	300	0,025233	0,024385
Com espaçador RCI	100	0,110225	0,109373
	200	0,031891	0,062550
	300	0,037748	0,035493

Fonte: Própria do autor.

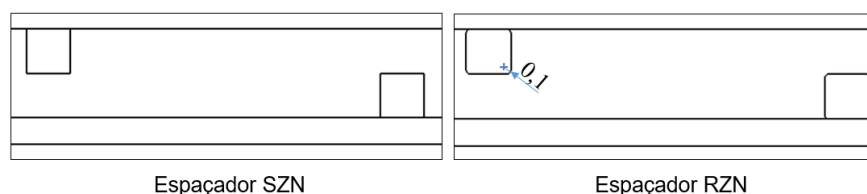
Na Tabela 4.3, a perda de pressão por unidade de comprimento e os valores médios do fator Γ e do fluxo permeado entre cada geometria apresentaram uma relação proporcional com o número de Reynolds da entrada, havendo menores valores de fluxo de permeado e de perda de pressão para o caso com Re 100 e maiores para os casos Re 300, e isso foi notado inversamente para o fator da concentração de polarização. Tal influência do número de Reynolds nesses parâmetros foi percebida por Ahmad, Lau e Abu Bakar (2005), Kavianipour, Ingram e Vuthaluru (2017) e Li et al. (2019) para casos com ou sem a presença de espaçadores.

Com base na métrica SPMP na Tabela 4.4, foi observado nos espaçadores analisados, que o promotor com raio de 0,1 mm na condição de operação Re 100 obteve os maiores valores nas duas condições de pressões, possivelmente influenciado por ter a menor perda de pressão entre os casos analisados. Além disso, os casos com espaçador R01 tiveram uma melhor performance em todas as condições quando comparados com as simulações que possuíam a geometria com espaçador sem arredondamento nos vértices e/ou inclinados, mostrando que a sua geometria consegue equilibrar melhor a relação entre a pressão e a capacidade de remoção do soluto na superfície da membrana.

4.2.2 Espaçador do tipo quadrado e com arranjo zigue-zague

Uma outra forma de posicionar os espaçadores perante ao canal de alimentação é empregando o arranjo zigue-zague. Para esse tipo de arranjo, foi estudado os espaçadores com e sem arredondamento (Figura 4.48), seguindo-se os preceitos descritos na metodologia no que diz respeito aos parâmetros e variáveis utilizadas no modelo computacional.

Figura 4.48 – Espaçadores utilizados nas simulações com arranjo zigue-zague

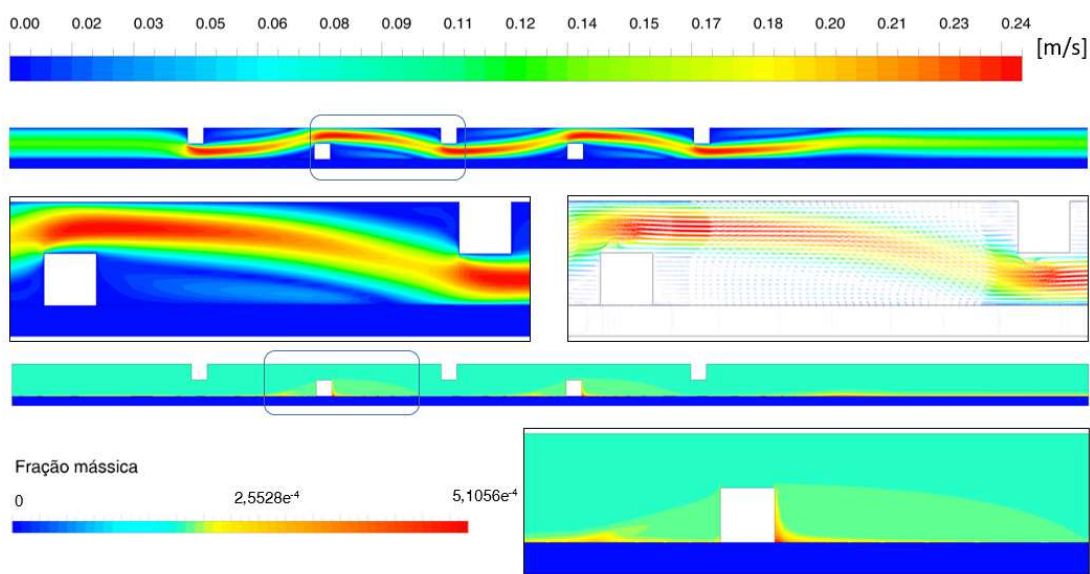


Fonte: Própria do autor.

Os campos de velocidades e distribuições da fração mássica no domínio para as geometrias que possuem os espaçadores SZN e RZN estão ilustrados nas Figuras 4.49 e 4.50, em que foram obtidos em simulações com condição de entrada com perfil de velocidade plenamente desenvolvido para número de Reynolds igual a 200 e foi aplicada uma pressão na

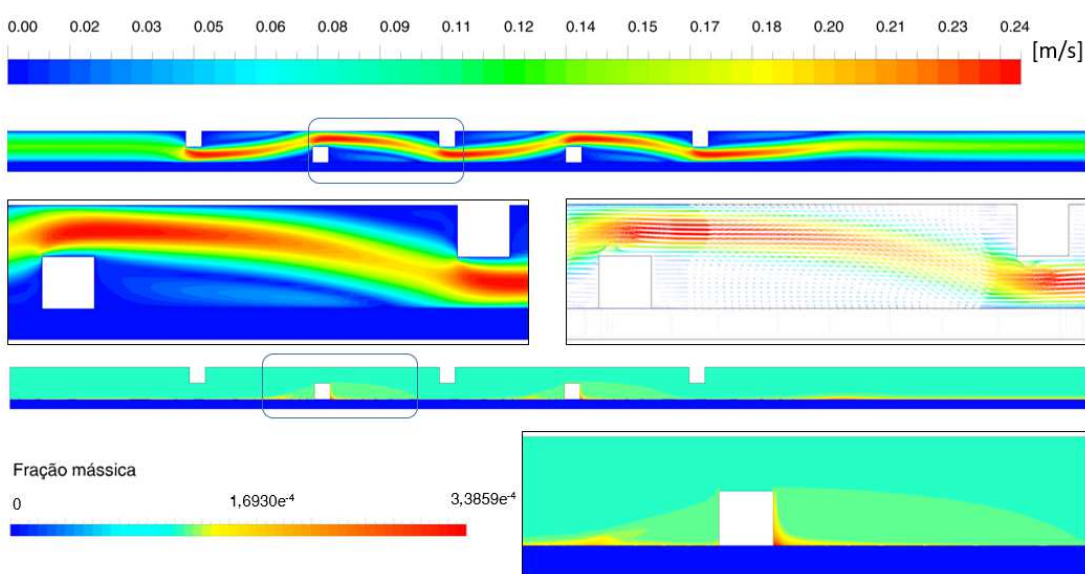
saída do canal de alimentação de 1 MPa. Para uma melhor análise, por conta da escala do problema, novamente, uma região localizada entre o segundo e o terceiro filamento foi escolhida para um monitoramento do comportamento das variáveis de estudo.

Figura 4.49 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador SZN e com arranjo zigue-zague a Re 200 e pressão 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

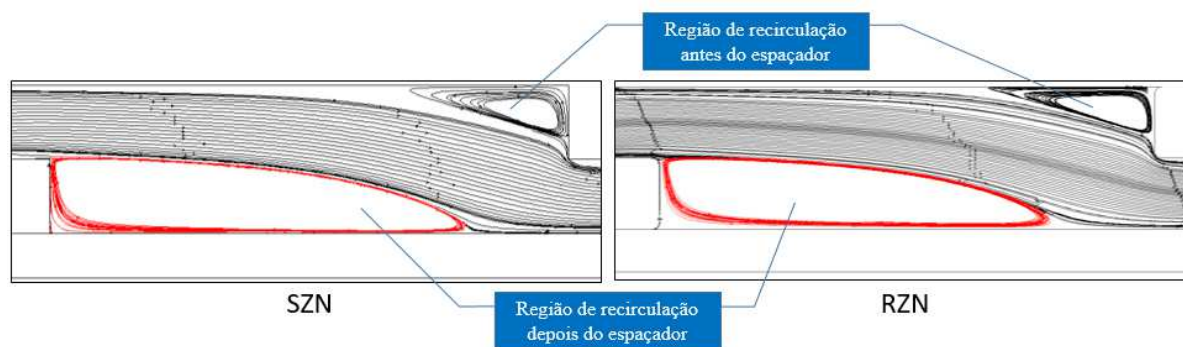
Figura 4.50 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador RZN e com arranjo zigue-zague a Re 200 e pressão 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Ao analisar os campos de velocidades das Figuras 4.49 e 4.50, percebe-se que a configuração zigue-zague força o escoamento a manter um padrão entre os espaçadores presentes no domínio, apresentando duas regiões de recirculação de baixa velocidade antes e depois dos promotores, como pode ser visto nas linhas de correntes ilustradas na Figura 4.51 para os casos com geometrias contendo espaçadores sem (SZN) e com (RZN) arredondamento. Esses padrões de escoamento na configuração zigue-zague são ratificados por resultados de Sousa et al. (2014) e Foo, Liang e Weihs (2020), obtidos por espaçadores circulares.

Figura 4.51 – Linhas de correntes para os casos com espaçadores SZN e RZN a condição Re 200 e 1 MPa

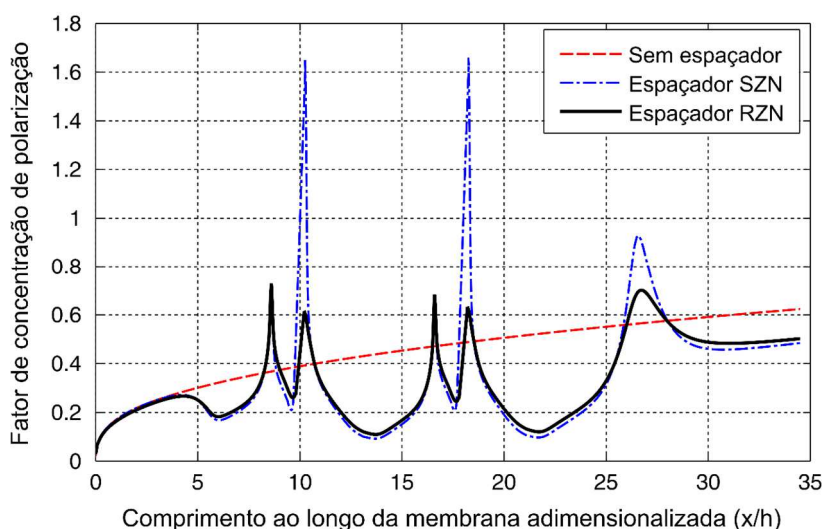


Fonte: Própria do autor.

Referente à distribuição da fração mássica do soluto no domínio, verifica-se que as maiores concentrações mássicas estão localizadas nas fixações dos espaçadores e nas proximidades das regiões de recirculações, as quais apresentam estagnação ou velocidades baixas do escoamento. Esses resultados convergem com os obtidos por Li et al. (2019) para espaçador circular. Ademais, nota-se que o desenvolvimento da camada limite de concentração é prejudicado pelo maior cisalhamento causado pelas velocidades tangenciais motivado pela redução da seção transversal do canal devido ao espaçador localizado na parede oposta a membrana, o que ocasiona o achatamento da camada de concentração polarizada. Tais considerações estão de acordo com as considerações mostradas por Fimbres-Weihs, Wiley e Fletcher (2006).

A Figura 4.52 apresenta as curvas da evolução do fator de polarização de concentração para os casos com geometria que contém espaçadores do tipo SZN e RZN e o caso com o domínio sem a presença de promotores, ambos sob condições de operação de entrada com Re 200 e pressão 1 MPa.

Figura 4.52 – Curvas do fator de polarização de concentração dos casos com condições aplicadas de Re 200 e 1 MPa



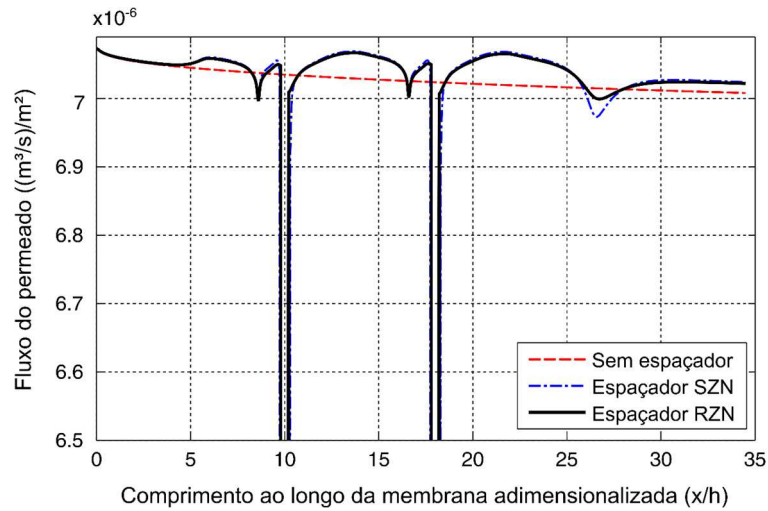
Fonte: Própria do autor.

As curvas obtidas com uso do domínio contendo espaçadores apresentam duas regiões contendo dois picos, correspondendo à influência dos dois espaçadores posicionados na superfície da membrana. Verifica-se que os maiores valores de fator Γ estão vinculados às regiões adjacentes dos espaçadores fixados na membrana, nos quais cada pico corresponde aos locais antes e depois dos promotores.

Ao comparar os tamanhos dos picos, nota-se que a curva do espaçador SZN tem o maior pico para regiões posteriores ao promotor, fato esse verificado por Amokrane et al. (2016), contrariamente ao que é no caso com geometria contendo espaçador RZN, onde os primeiros picos são ligeiramente maiores. É possível explicar isso pela presença do arredondamento do primeiro vértice exposto ao escoamento, criando uma região propícia ao depósito de soluto e, conseqüentemente, a ter valores de fator Γ elevados.

A Figura 4.53 ilustra a evolução do fluxo permeado para os casos com espaçadores SZN e RZN ao longo do comprimento da superfície da membrana. Observa-se que as curvas correspondentes às geometrias com espaçadores apresentam dois grandes vales, cujos valores mínimos são zero devido à presença física dos espaçadores na membrana que obstrui a solução a ser permeada nestas regiões.

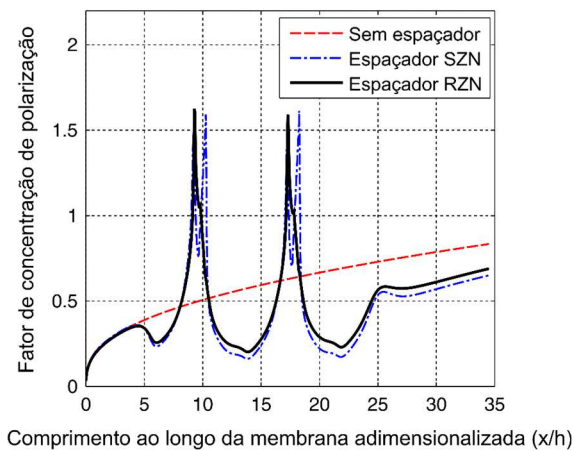
Figura 4.53 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

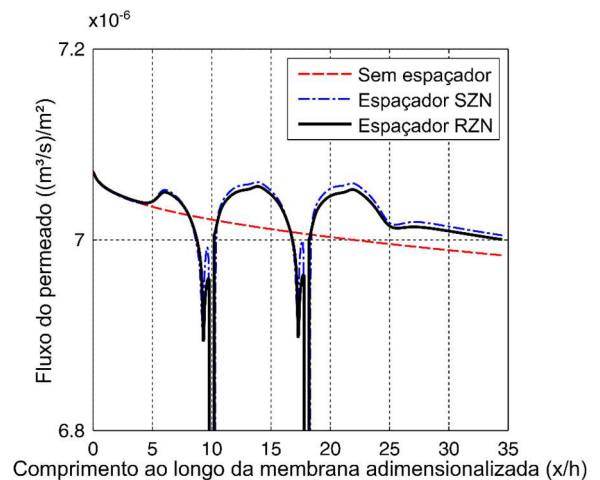
As Figuras 4.54 a 4.57 são resultados obtidos para as geometrias com espaçadores SZN e RZN nas condições de pressão 1 MPa e número de Reynolds da seção de entrada equivalente a 100 e 300, nas quais são exibidas curvas de fator da camada polarizada e do fluxo permeado. Ambas as curvas têm comportamentos semelhantes às curvas apresentadas para as condições de Re 200 e pressão 1 MPa. Na condição de Re 100, ao comparar o fator Γ médio das curvas com espaçadores e geometria sem promotor, obtém-se uma redução de 31,8% para o caso SZN e 25,3% para o caso RZN.

Figura 4.54 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 100 e 1 MPa



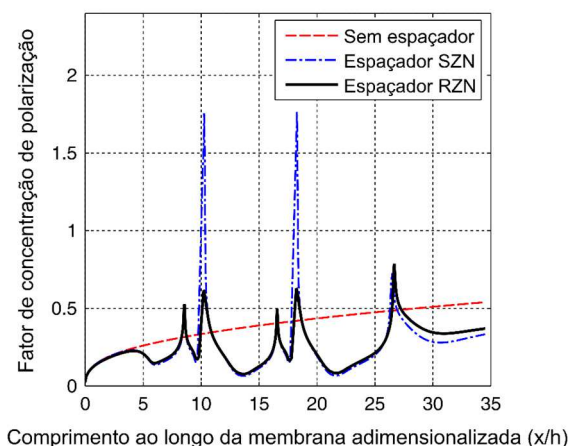
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.55 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa



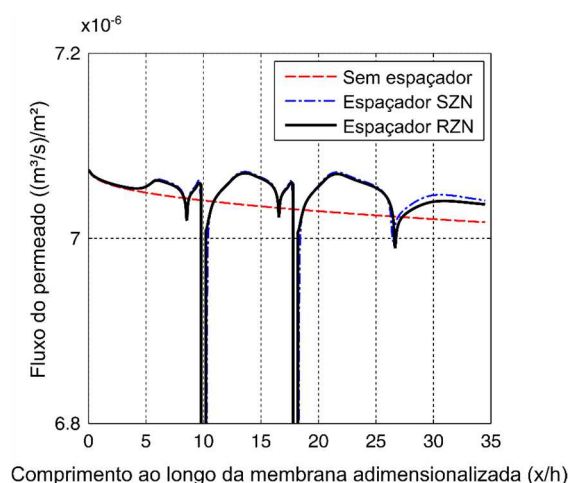
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.56 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.57 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Referente aos casos com a condição Re 300, ao comparar tanto a perda de pressão como o fator Γ entre os casos com espaçadores, percebe-se que o caso SZN apresenta uma diferença de redução do fator Γ de 0,0074, correspondente a uma diminuição de 3,3% em relação ao caso RZN; no entanto, há um aumento de 137,7 Pa/m na perda de pressão, o que corresponde a 9,6%.

Para a condição de pressão de operação igual a 2 MPa, foram analisadas as pressões por unidade de comprimento e as médias das variáveis de fator Γ e fluxo permeado, que estão dispostas na Tabela 4.5.

Tabela 4.5 – Valores médios do fator Γ e do fluxo permeado e perda de pressão para geometrias estudadas sob uma pressão aplicada de 2 MPa

Geometria	Re	$\bar{\Gamma}$	\bar{J}_v	$\Delta P/L$
Sem espaçador	100	1,506	$1,4101 \times 10^{-5}$	117,4
	200	1,092	$1,4148 \times 10^{-5}$	236,2
	300	0,638	$1,4168 \times 10^{-5}$	355,1
Com espaçador SZN	100	1,027	$1,4155 \times 10^{-5}$	344,9
	200	0,706	$1,4192 \times 10^{-5}$	856,5
	300	0,567	$1,4208 \times 10^{-5}$	1566,7
Com espaçador RZN	100	1,138	$1,4143 \times 10^{-5}$	334,8
	200	0,667	$1,4196 \times 10^{-5}$	815,9
	300	0,515	$1,4214 \times 10^{-5}$	1431,9

Fonte: Própria do autor.

Assim como na Tabela 4.3, a Tabela 4.5 mostra a influência do número de Reynolds na média das variáveis do fator f e do fluxo permeado, bem como que há relação inversa entre o aumento da perda de pressão e a redução da camada polarizada nas condições de operação analisadas.

O desempenho dos espaçadores da Tabela 4.5 foi analisado pela métrica SPMP, estando os valores estão apresentados na Tabela 4.6.

Tabela 4.6 – Valores SPMP para os casos com arranjos zigue-zague

Geometria		SPMP	
		1 MPa	2 MPa
Com espaçador SZN	100	0,395966	0,377560
	200	0,318264	0,305883
	300	0,205238	0,197616
Com espaçador RZN	100	0,276432	0,261094
	200	0,211876	0,200160
	300	0,074537	0,141335

Fonte: Própria do autor.

Comparando os valores SPMP da Tabela 4.6, constata-se que o domínio com os espaçadores do tipo SZN na configuração de Re 100 nas duas pressões estudadas apresentou os maiores valores de SPMP, caracterizando a melhor performance entre os casos analisados. Relacionando os valores maiores obtidos nas configurações submerso (Tabela 4.4) e zigue-zague (Tabela 4.6), verifica-se que o arranjo em zigue-zague apresentaram melhores valores, pois tal arranjo tem uma boa capacidade de produzir velocidades tangências nas regiões adjacentes à membrana através de regiões de recirculações e do escoamento advindo da seção de entrada, sem causar grandes magnitudes de perda de pressão. O melhor desempenho do zigue-zague entre os arranjos estudados também foi reportado por Schwinge, Wiley e Fletcher (2002), que utilizaram uma geometria circular nos espaçadores.

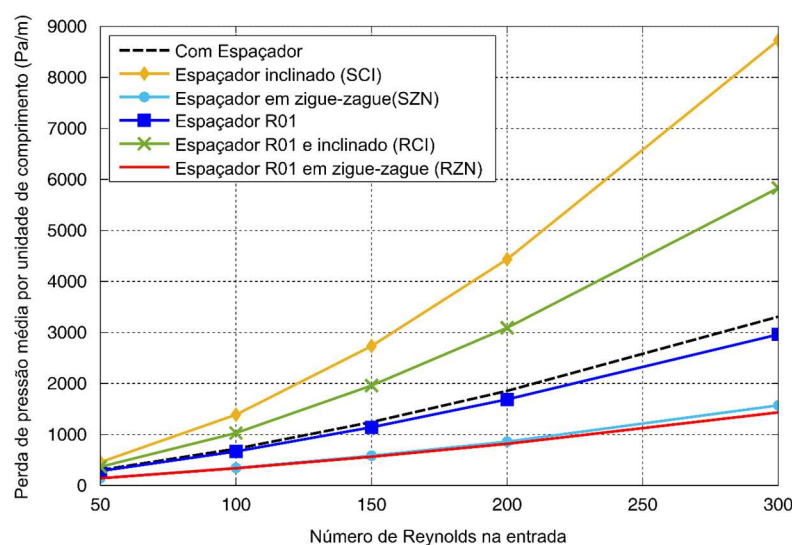
4.2.3 Análise das variáveis médias para casos com espaçadores quadráticos

Nesta seção é analisado o comportamento das variáveis médias do processo para os casos com espaçadores quadráticos em função do número de Reynolds da seção de entrada para 50, 100, 150, 200 e 300, sob uma pressão aplicada na saída do canal de alimentação de 1 MPa.

As variáveis utilizadas para análise foram: perda de pressão por unidade de comprimento, fator de polarização de concentração, fluxo permeado e espessura da camada limite de polarização.

A Figura 4.58 ilustra a evolução da perda de pressão média por unidade de comprimento para diferentes números de Reynolds da seção de entrada com relação aos casos com espaçadores quadráticos.

Figura 4.58 – Evolução perda de pressão média em função de Re de entrada para casos com espaçadores quadráticos a 1 MPa

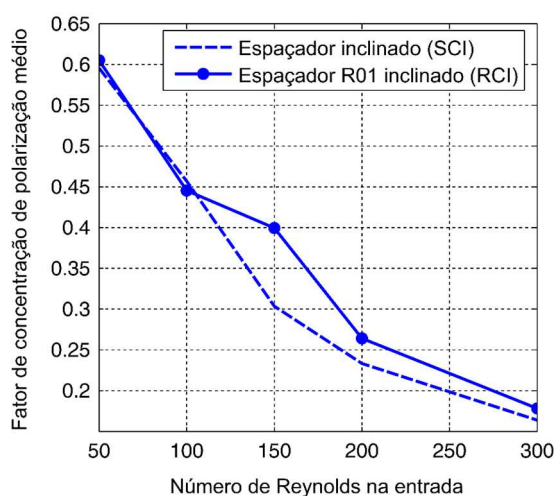


Fonte: Própria do autor.

As curvas da Figura 4.58 mostram que há um crescimento da perda de pressão à medida que aumenta o número de Reynolds, tal comportamento corroborado por Keir (2012) e Kaviani-pour, Ingram e Vuthaluru (2019), e que, quanto maior for o número de Reynolds maiores são os desvios das curvas entre cada tipo de espaçador. Nota-se que há uma aproximação entre pares de curvas, conseguindo categorizar três grupos distintos, sendo eles: espaçadores em zigue-zague, espaçadores submersos com arestas normais à membrana e, por fim, espaçadores inclinados com arranjo submerso. O grupo em zigue-zague é o que demonstra as menores perdas de pressão e os espaçadores inclinados possuem os maiores valores, que foram causados pela presença de maiores velocidades gerados pelo efeito difusor motivado pela rotação e pela geometria dos espaçadores junto com a superfície da membrana.

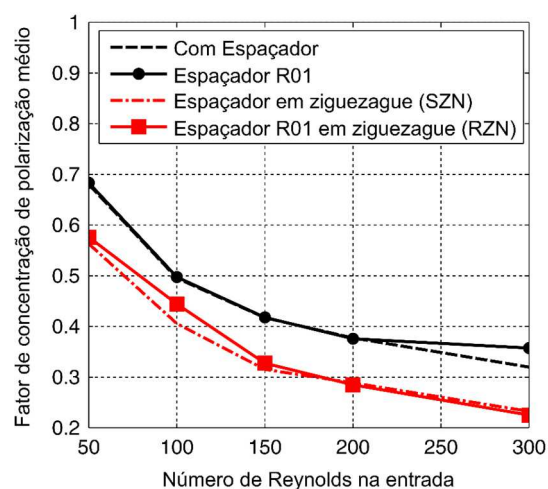
As Figuras 4.59 e 4.60 exibem a evolução do fator Γ médio para diferentes números de Reynolds dos casos estudados, no qual observa-se uma diminuição dos valores médios com o aumento do número de Reynolds. Apesar de ter as presenças dos espaçadores no domínio, este comportamento é análogo ao que foi demonstrado na Figura 4.17 em casos sem espaçador.

Figura 4.59 – Curvas do fator Γ médio para diversos Re dos casos com espaçadores quadráticos inclinados



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.60 – Curvas do fator Γ médio para diversos Re dos casos com arranjo submerso e zigue-zague



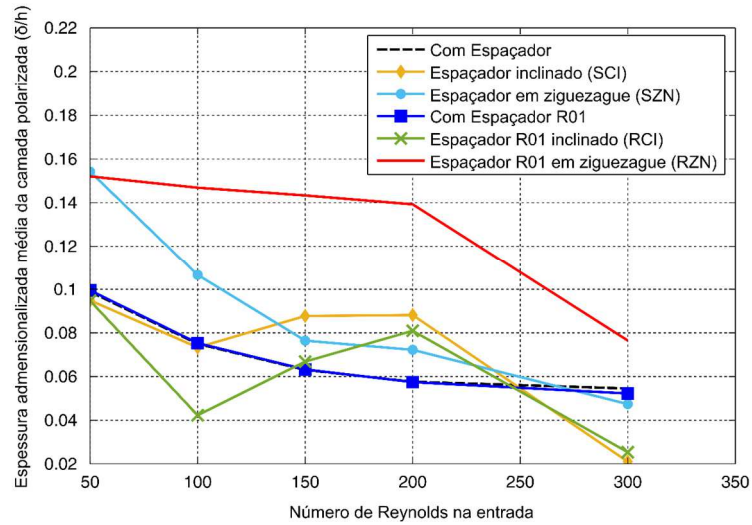
Fonte: Própria do autor.

Outro ponto a destacar quando se compara as curvas é que, avaliando a redução do fator Γ , os espaçadores inclinados apresentam uma leve vantagem com relação aos espaçadores em zigue-zague. Para os casos representados pelas curvas de cor preta, pode-se notar um maior efeito do arredondamento quando Re é maior que 200, pois há um desvio entre essas curvas, justificado pelo surgimento e formação das zonas de recirculação, como foi explicado na Figura 4.36.

A Figura 4.61 ilustra o comportamento da espessura média dos casos estudados com espaçador em função do número de Reynolds da entrada. Para obtenção dos valores médios, foi utilizado a UDF que está disposta no Apêndice A - V e, logo após, é aplicado junto ao MATLAB as funções para cálculo das médias e plotagem das curvas. Nota-se que, para todos os casos, a espessura média decai com o aumento do número de Reynolds, mostrando que as velocidades tangenciais nas proximidades da superfície da membrana têm um papel importante no combate da espessura da camada limite de concentração.

Pode-se ressaltar também, que os casos com arranjos submersos e sem está inclinado perante o canal (curvas tracejadas pretas e continua azul com marcador quadrado) foram os que exibiram o menor desvio entre as curvas quando comparados com os demais pares de curvas (par de curvas com arranjo zigue-zague e par de curvas com espaçador inclinado e submerso), sendo o par de curvas correspondente a geometria com espaçadores dispostos em zigue-zague o que mostrou maiores desvios.

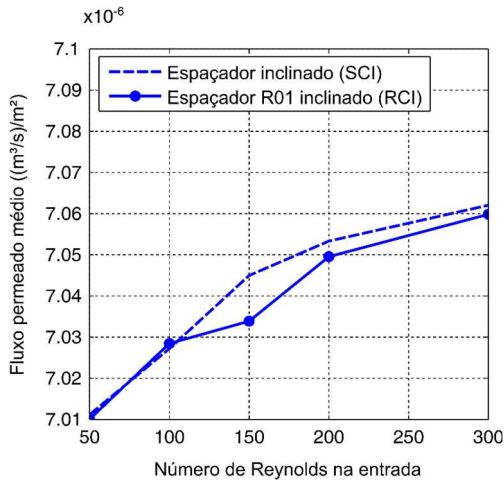
Figura 4.61 – Curvas da espessura média para os casos quadráticos



Fonte: Própria do autor.

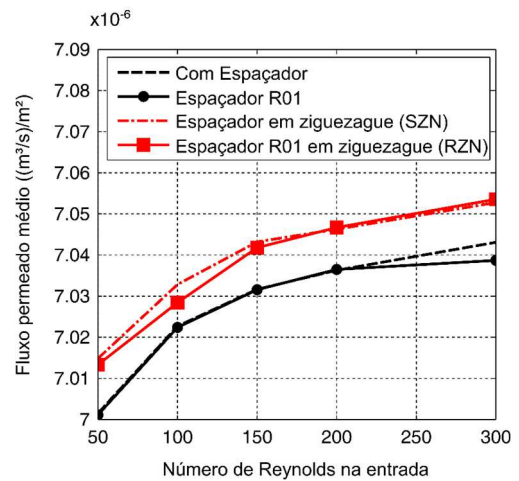
As Figuras 4.62 e 4.63 apresentam a evolução do fluxo permeado médio para diferentes números de Reynolds da seção de entrada para os casos quadráticos estudados.

Figura 4.62 – Curvas do fluxo permeado médio para diversos Re dos casos com espaçadores quadráticos inclinados



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.63 – Curvas do fluxo permeado médio para diversos Re dos casos com arranjo submerso e ziguezague



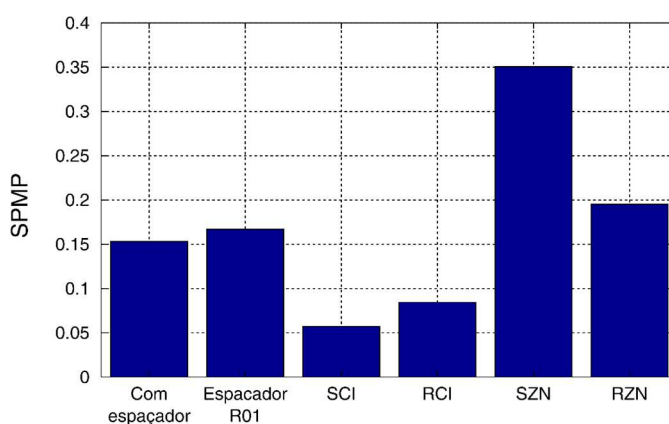
Fonte: Própria do autor.

Como visto nas Figuras 4.62 e 4.63, a relação entre o fluxo permeado e o aumento do número de Reynolds tem comportamento inverso às curvas obtidas para Fator Γ médio, ou seja o fator de concentração de polarização decai e o fluxo permeado aumenta com o acréscimo da

velocidade do escoamento no canal de alimentação. Essas relações comportamentais são reportados por Salcedo-Díaz et al. (2014) em seu resultados experimentais.

A Figura 4.64 apresenta um gráfico de barras com os valores médios de SPMP de cada espaçador quadrático estudado obtidos pelos valores de cada condição de operação analisados. Como mencionado anteriormente, constata que o espaçador sem arredondamento com o padrão zigue-zague foi o que teve o melhor desempenho, com base nesta métrica, seguido pelo espaçador com arredondamento também em zigue-zague.

Figura 4.64 – Valores das médias de SPMP para os casos com espaçadores estudados

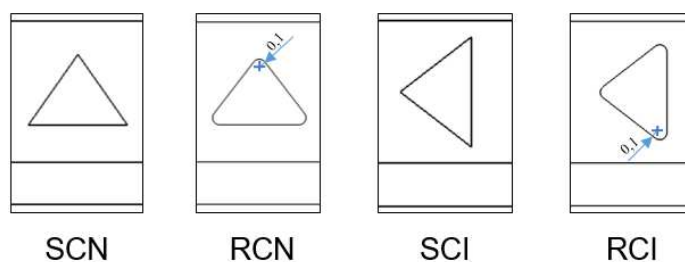


Fonte: Própria do autor.

4.2.4 Espaçador tipo triangular e arranjo submerso

Nesta seção serão exibidos os resultados das simulações que contêm geometrias com promotores triangulares e arranjo submerso; suas características estão mostradas na Figura 4.65.

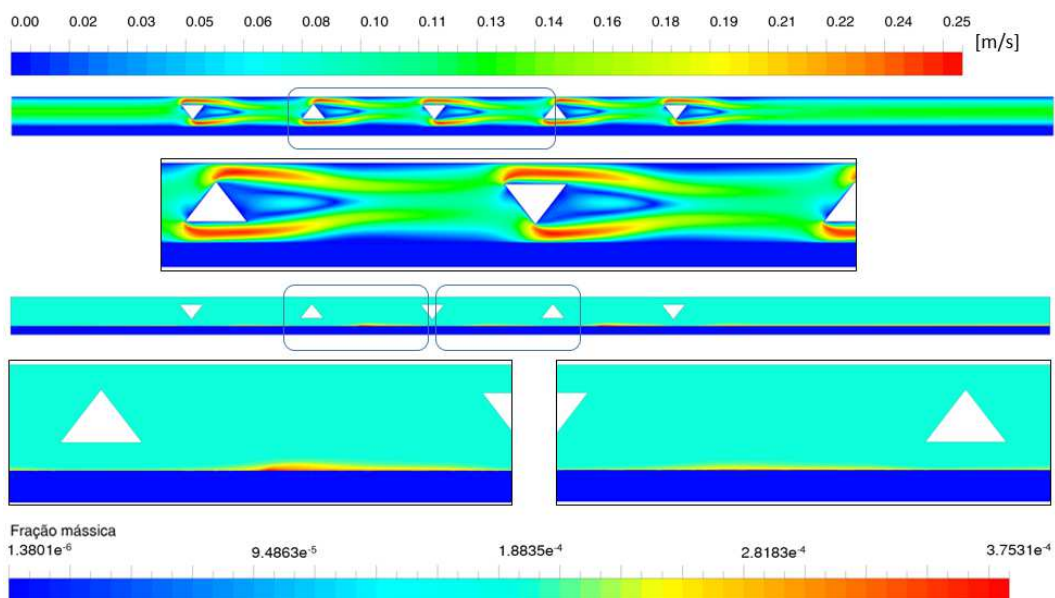
Figura 4.65 – Espaçadores triangulares



Fonte: Própria do autor.

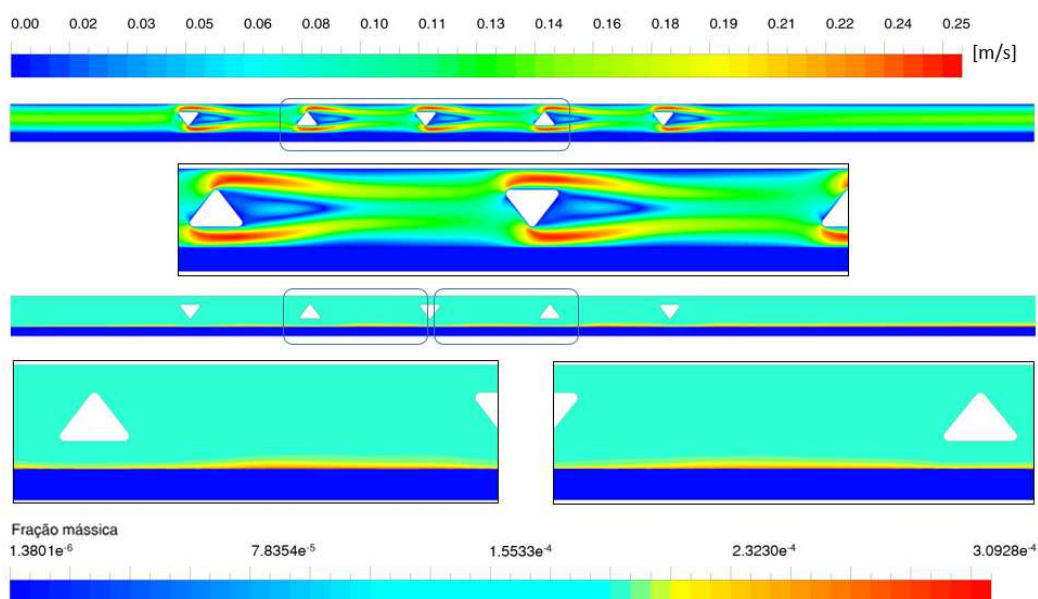
Por sua vez, as Figuras 4.66 e 4.67 expõem os campos de velocidade e de fração mássica do soluto para os casos com espaçadores SCN e RCN.

Figura 4.66 – Campo de velocidade e fração mássica do soluto para domínio com espaçador SCN e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.67 – Campo de velocidade e fração mássica do soluto para domínio com espaçador RCN e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa



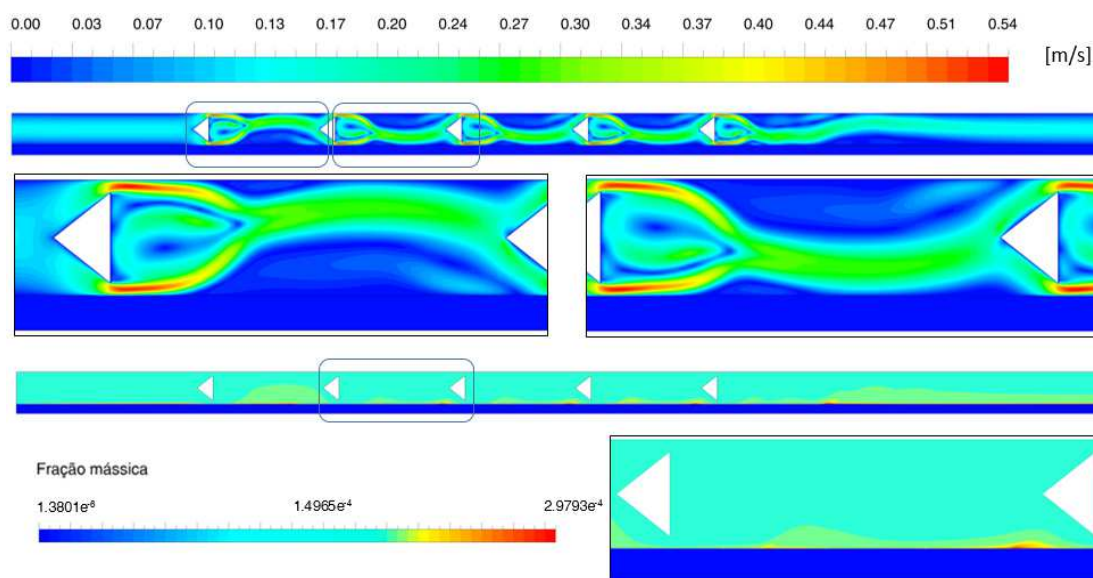
Fonte: Própria do autor.

Os campos de velocidades das Figuras 4.66 e 4.67 exibiram comportamentos característicos de um domínio com espaçadores, com formação de esteiras após cada promotor e regiões de alta velocidades em cima e abaixo dos triângulos. Um ponto a destacar é que, apesar dos espaçadores em sequência estarem rotacionalmente defasados em 180 graus, praticamente não há grandes variações de comportamento no campo de velocidade nas regiões entre espaçadores. Essa configuração permitiu que o fluxo mantivesse com padrão estável durante a passagem no domínio.

Ao analisar a distribuição da fração mássica do soluto, percebe-se que ambas as geometrias apresentam uma região de depósito entre os espaçadores. Entretanto, para o caso com espaçador SCN, é notada uma diferença nessa região de depósito, quando se compara as duas figuras que detalham as regiões entre espaçadores 2 - 3 e 3 - 4. Isso pode ser atribuído à pequena variação causada pela defasagem rotacional dos espaçadores aliado à capacidade dos vértices sem arredondamento em intensificar o comportamento do escoamento.

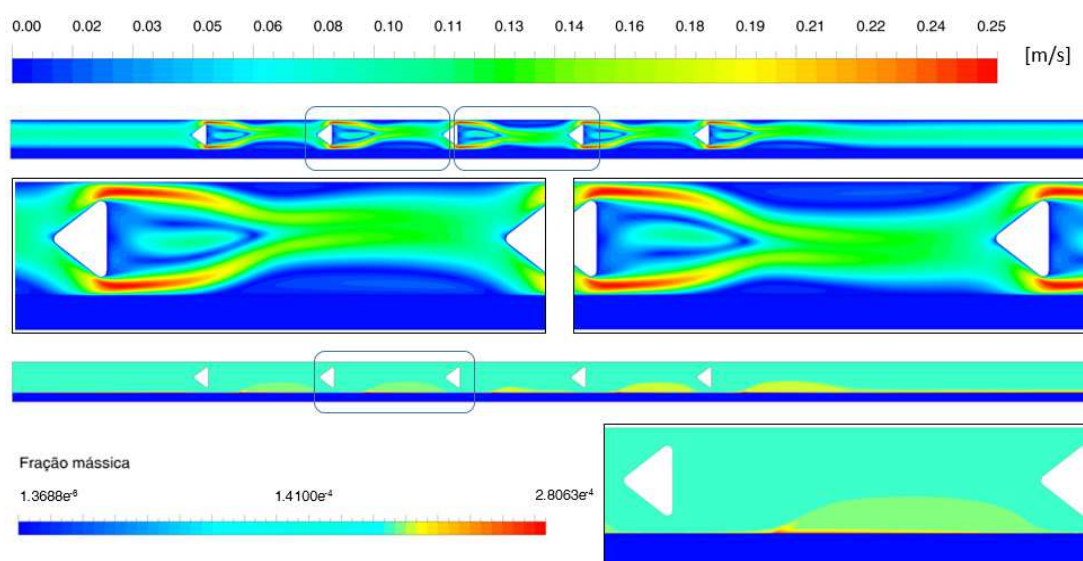
As Figuras 4.68 e 4.69 exibem os campos de velocidade e distribuição da fração mássica do soluto para os casos com geometrias compostas por espaçadores SCI e RCI, para as condições Re 200 na seção de entrada e pressão aplicada de 1 MPa.

Figura 4.68 – Campo de velocidade e fração mássica do NaCl para domínio com espaçador SCI e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.69 – Campo de velocidade e fração mássica do NaCl para domínio com espaçador RCI e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa



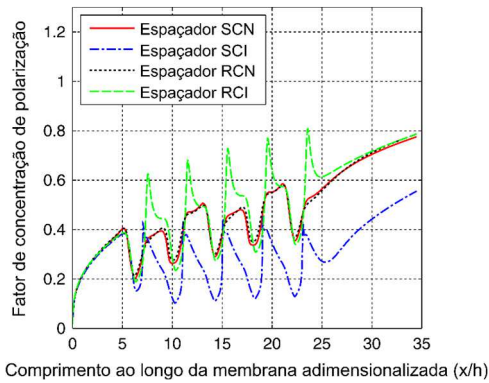
Fonte: Própria do autor.

Os campos de velocidades para os casos SCI e RCI apresentaram padrões característicos com tendência de instabilidade de escoamento e sem comportamentos simétricos ao longo do canal; porém, devido ao não arredondamento dos vértices, o caso SCI demonstrou uma maior intensidade nessas tendências, ficando nítido quando comparado com as figuras em destaques do campo de velocidade. Ao analisar as distribuições de fração mássica do soluto, constata-se que o acúmulo do NaCl é ditado pelo comportamento hidrodinâmico presente no local, em que maiores valores mássicos estão em regiões de menores velocidades.

A evolução do fator de polarização de concentração e do fluxo permeado ao longo da superfície da membrana para os casos com geometrias com espaçadores triangulares é exibida nas Figuras 4.70 a 4.75 sob condições de pressão na saída do canal de alimentação de 1 MPa e número de Reynolds da seção de entrada de 100, 200 e 300. Ao comparar entre as curvas, observa-se que, para casos com Re 100, há uma periodicidade bem definida caracterizada pela presença do espaçador, enquanto nas condições Re 200 e Re 300, essa periodicidade é descaracterizada para o caso com geometria SCI por causa da agressividade da geometria no comportamento hidrodinâmico e da instabilidade produzida.

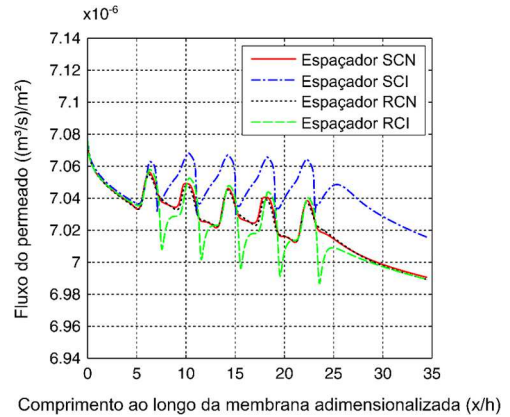
Com relação aos demais casos (SCN, RCN e RCI), destaca-se a predominância de comportamento visto para os casos com espaçadores quadráticos com arranjo submerso, no qual houve a presença de picos e vales. Comportamentos de curvas semelhantes foram obtidos por Ahmad, Lau e Abu Bakar (2005) para espaçadores com arranjo tipo cavidade.

Figura 4.70 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 100 e 1 MPa



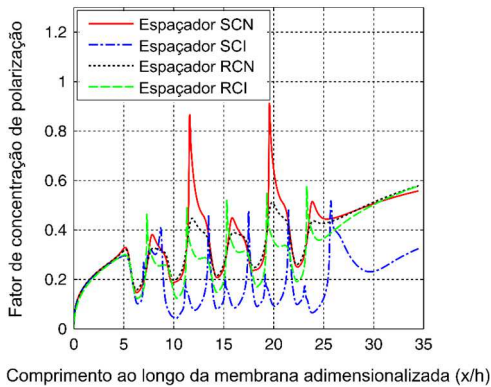
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.71 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa



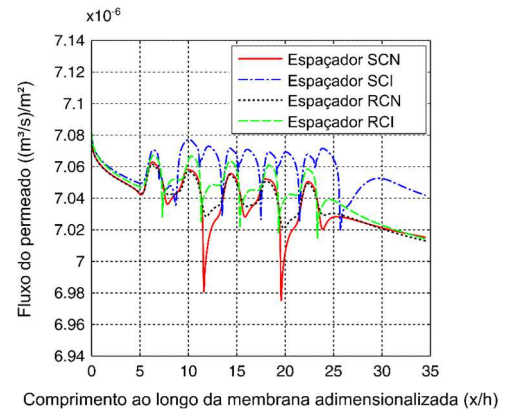
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.72 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 200 e 1 MPa



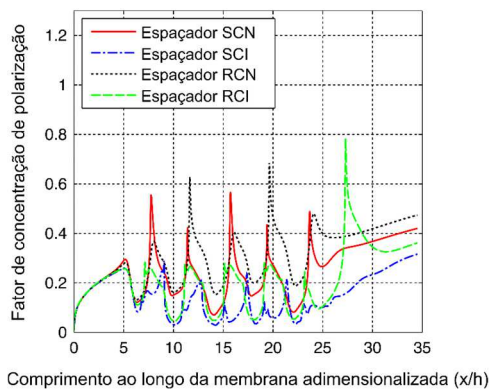
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.73 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa



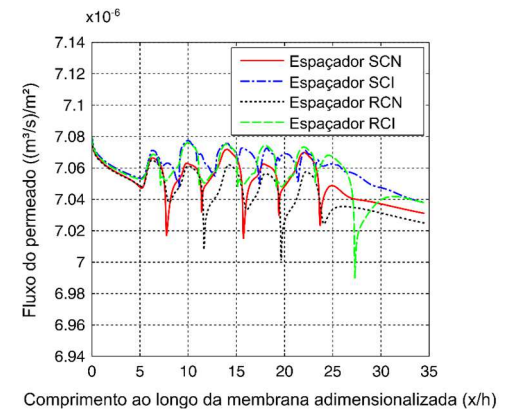
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.74 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.75 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Utilizando a métrica da média para análise do fator $\bar{\Gamma}$, nota-se que o caso com Re 300, pressão aplicada na saída do canal de alimentação de 1 MPa e geometria contendo espaçadores do tipo SCI, foi o que apresentou o menor valor médio, equivalente à 0,1261, seguido pelos espaçadores RCI com valor de 0,1961. Quando comparado com uma condição de canal sem espaçadores, obteve-se uma redução de 67,2% para SCI e 49,7% para RCI, mostrando que os promotores triangulares conseguem gerar mais turbulências e energias para remoção de soluto na superfície ao comparar com os promotores quadráticos nas mesmas condições de operação visto na seção 4.2.1. No entanto, essas configurações com SCI e RCI apresentam maiores perdas de pressão por unidade de comprimento para todos os outros casos.

A Tabela 4.7 expõe valores médios obtidos utilizando simulações com condições e geometrias desta seção 4.2.4 com alteração da pressão aplicada na saída do canal de alimentação para o valor de 2 MPa. Constata-se que essas variáveis médias são influenciadas diretamente pelo número de Reynolds, demonstrando correlações diretas ou inversas ao aumento do número de Reynolds, a depender do parâmetro em análise.

Tabela 4.7 – Valores médios do fator $\bar{\Gamma}$ e do fluxo permeado e perda de pressão para geometrias estudadas sob uma pressão aplicada de 2 MPa

Geometria	Re	$\bar{\Gamma}$	\bar{J}_v	$\Delta P/L$
Sem espaçador	100	1,506	1,4101x10 ⁻⁵	117,4
	200	1,090	1,4148x10 ⁻⁵	236,2
	300	0,638	1,4168x10 ⁻⁵	355,1
Com espaçador SCN	100	1,025	1,4156x10 ⁻⁵	652,2
	200	0,791	1,4183x10 ⁻⁵	1772,5
	300	0,472	1,4219x10 ⁻⁵	3291,3
Com espaçador RCN	100	1,163	1,4140x10 ⁻⁵	533,3
	200	0,836	1,4177x10 ⁻⁵	1392,8
	300	0,692	1,4194x10 ⁻⁵	2487,0
Com espaçador SCI	100	0,592	1,4206x10 ⁻⁵	2671,0
	200	0,350	1,4235x10 ⁻⁵	8994,2
	300	0,264	1,4246x10 ⁻⁵	17965,2
Com espaçador RCI	100	1,207	1,4135x10 ⁻⁵	1144,9
	200	0,515	1,4214x10 ⁻⁵	3392,8
	300	0,441	1,4223x10 ⁻⁵	6446,4

Fonte: Própria do autor.

Os valores da Razão de Performance do Espaçador (SPMP) das simulações realizadas para esta seção são apresentados na Tabela 4.8. Percebe-se que a performance dos espaçadores

sem rotação (SCN e RCN) foram melhores que os espaçadores com rotação (SCI e RCI), possivelmente, devido aos valores elevados de perda de pressão, como pode ser visto na Tabela 4.7 para os casos com pressão 2 MPa e na seção 4.2.6 para os casos de 1 MPa.

Tabela 4.8 – Valores SPMP para os casos com arranjos submersos

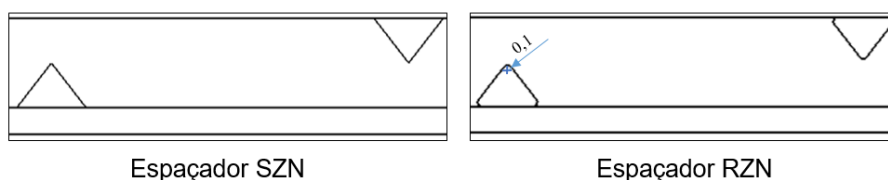
Geometria		SPMP	
		1 MPa	2 MPa
Com espaçador SCN	100	0,159977	0,159796
	200	0,138964	0,110459
	300	0,078743	0,077698
Com espaçador RCN	100	0,181764	0,181675
	200	0,177028	0,137409
	300	0,055060	0,111099
Com espaçador SCI	100	0,028248	0,023048
	200	0,012239	0,013089
	300	0,010020	0,009532
Com espaçador RCI	100	0,090611	0,073597
	200	0,043465	0,041046
	300	0,033869	0,032752

Fonte: Própria do autor.

4.2.5 Espaçador do tipo triângulo e com arranjo zigue-zague

Nesta seção serão analisadas duas configurações de espaçadores, denominadas de SZN e RZN, em que a diferença entre elas é o arredondamento dos vértices (vide Figura 4.76).

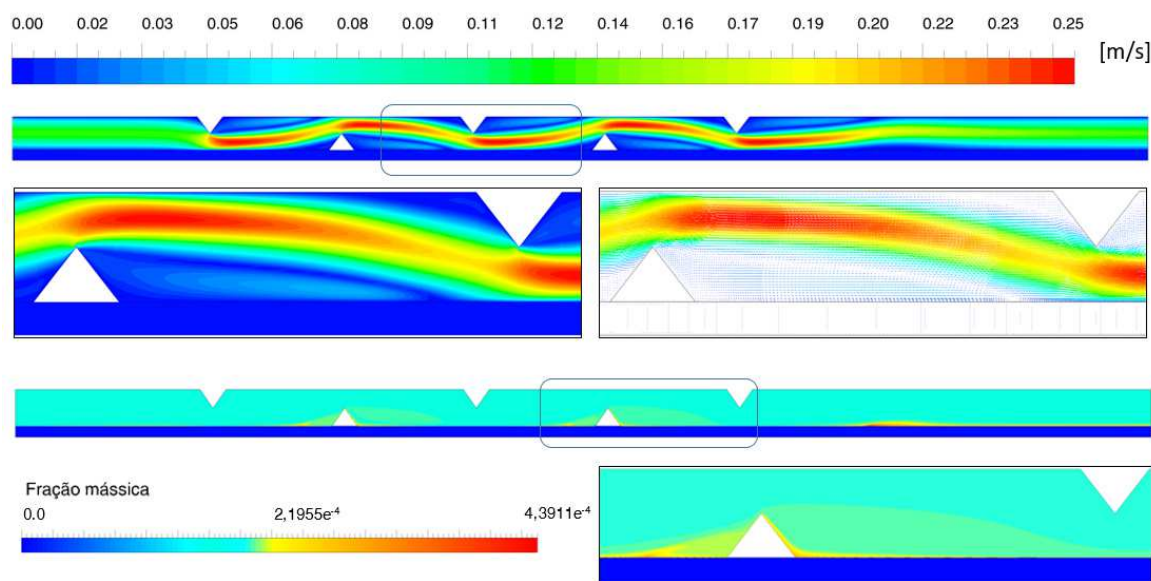
Figura 4.76 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

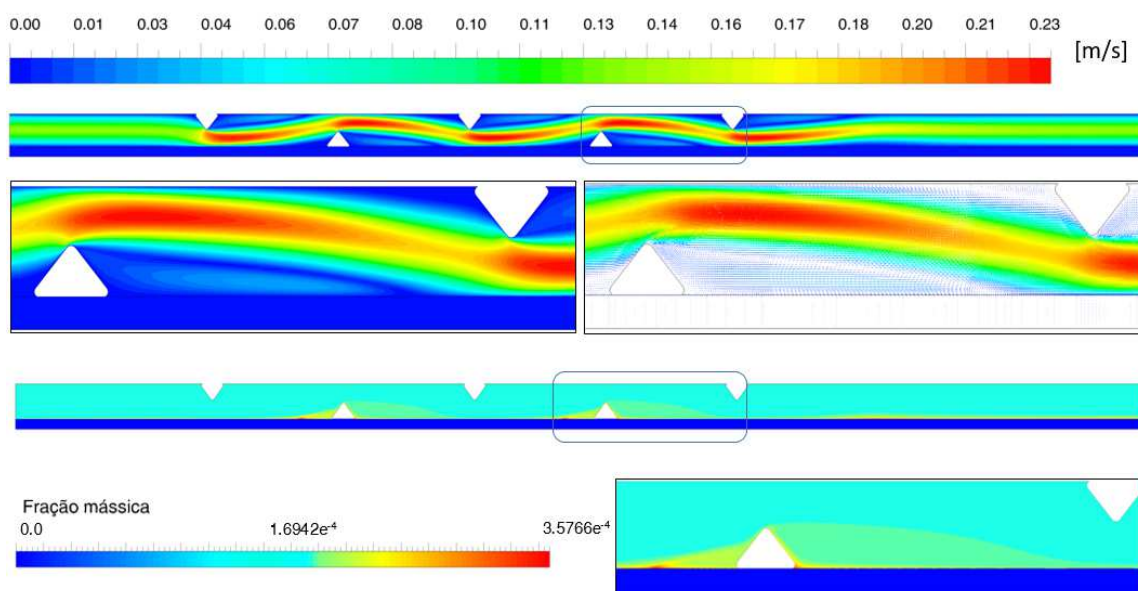
As Figuras 4.77 e 4.78 exibem as distribuições de velocidades e fração mássica do soluto para as geometrias que contém espaçadores do tipo SZN e RZN, respectivamente, obtidos para uma condição com Re 200 na seção de entrada e pressão de 1 MPa na saída do concentrado.

Figura 4.77 – Campo de velocidade e fração mássica do NaCl para domínio com espaçador SZN e com arranjo submerso a $Re\ 200$ e pressão 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.78 – Campo de velocidade e fração mássica NaCl para domínio com espaçador RZN e com arranjo submerso a $Re\ 200$ e pressão 1 MPa



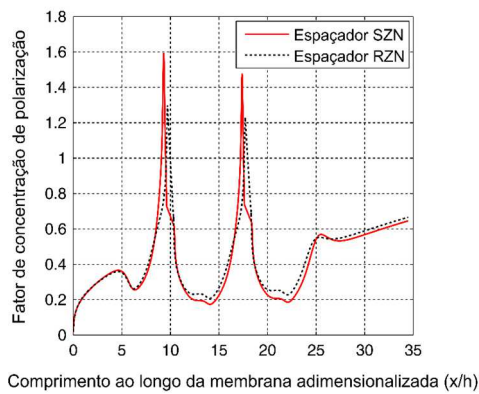
Fonte: Própria do autor.

Os campos de velocidades apresentados nas Figuras 4.77 e 4.78 mostram semelhanças no comportamento com casos contendo espaçadores quadráticos com padrão zigue-zague, constatando formações de regiões de baixas velocidades nos locais antes e depois dos

espaçadores que estão fixados na superfície da membrana. Ao comparar as Figuras 4.77 e 4.78, nota-se que a região entre o último promotor e a saída do canal apresentou ser mais propícia ao acúmulo no soluto para o caso SZN, podendo isso ser atribuído ao dano causado pelo vértice sem arredondamento no escoamento, proporcionando a formação de uma zona de estagnação mais efetiva na região adjacente à superfície da membrana e após esse último espaçador.

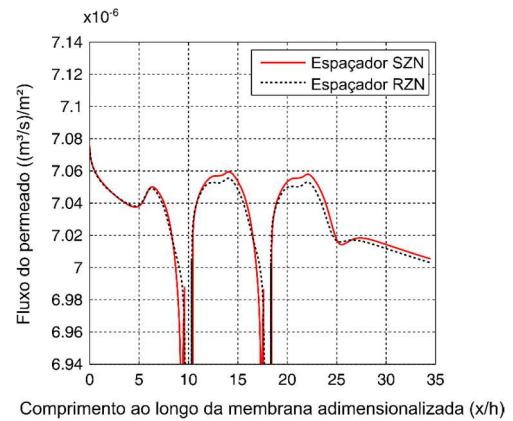
Os gráficos do fluxo permeado e do fator de polarização de concentração ao longo da superfície da membrana para os casos com Re 100, 200 e 300 foram plotados e exibidos nas Figuras 4.79 a 4.84 para as simulações com espaçadores triangulares do tipo SZN e RZN.

Figura 4.79 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 100 e 1 MPa



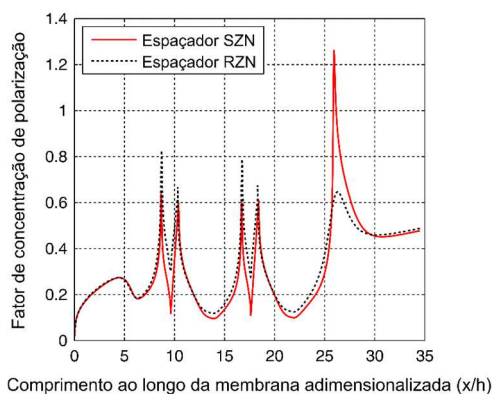
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.80 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa



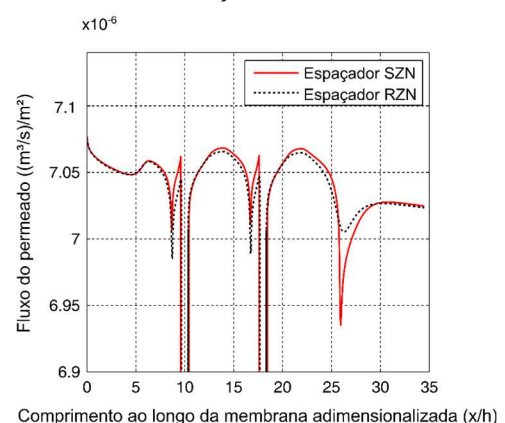
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.81 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 200 e 1 MPa



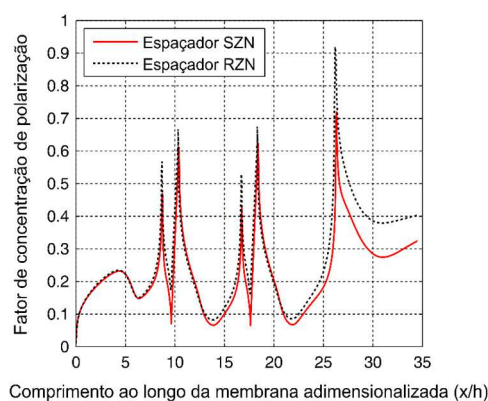
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.82 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa



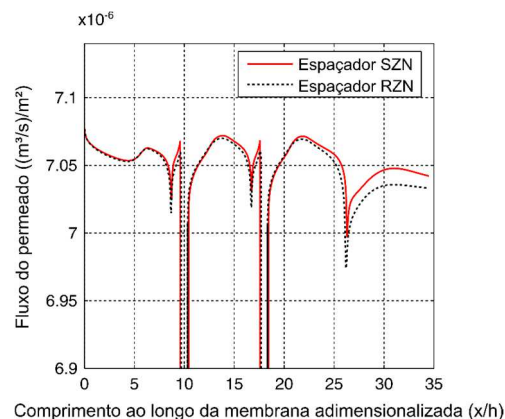
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.83 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.84 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

As curvas das Figuras 4.79 a 4.84 apresentam comportamentos semelhantes entre as três condições, principalmente para os casos com Re 200 e 300, em que contêm 5 picos localizados na mesma posição ao longo da superfície da membrana, causado pelo efeito da presença dos espaçadores. Isso induz um comportamento hidrodinâmico que propicia ter baixas velocidades do escoamento nessas regiões, sendo os picos bem mais definidos quando há uma elevação do número de Reynolds da seção de entrada.

Ao comparar as curvas dos casos zigue-zague para os espaçadores quadráticos e triangulares, verifica-se o aparecimento mais efetivo do quinto pico nas simulações com geometria contendo triângulos. Se utilizar a métrica do maior valor do quinto pico referente às curvas obtidas com espaçadores quadráticos, é constatado que o caso com condição Re 200 apresentou o maior valor, correspondente a 0,9289 e, nessa mesma condição, para o caso com uso de triângulos teve o valor de 1,264, equivalente ao aumento de aproximadamente 36%.

Para as simulações que utilizaram a pressão aplicada de 2 MPa na saída do canal de alimentação, foram apresentados comportamentos hidrodinâmicos e distribuição de fração mássica do soluto próximos aos obtidos nos casos com pressão de 1 MPa. Entretanto os valores médios das variáveis do fator Γ e fluxo permeado, conforme Tabela 4.9, apresentam maiores valores, estando de acordo com o comportamento visto na Figura 4.18.

A Tabela 4.10 mostra os valores SPMP obtidos para cada caso estudado nesta seção. Percebe-se que a performance do espaçador RZN teve os maiores valores para todas as condições em relação aos valores obtidos pelo promotor SZN. Ao comparar com espaçadores quadráticos para as mesmas condições de operação e com arredondamento dos espaçadores, nota-se que os triangulares têm um melhor desempenho, com uma diferença de 0,09458,

correspondente ao aumento de 34,2% em relação ao quadráticos. Porém, se comparar as de maiores performances, tem-se como resultado os espaçadores quadráticos do tipo SZN com melhor performance entre os triangulares e quadráticos.

Tabela 4.9 – Valores médios do fator Γ e da fluxo permeado e perda de pressão para geometrias estudadas sob uma pressão aplicada de 2 MPa

Geometria	Re	$\bar{\Gamma}$	\bar{J}_v	$\Delta P/L$
Sem espaçador	100	1,506	1,4101x10 ⁻⁵	117,4
	200	1,092	1,4148x10 ⁻⁵	236,2
	300	0,638	1,4168x10 ⁻⁵	355,1
Com espaçador SZN	100	1,114	1,4145x10 ⁻⁵	326,1
	200	0,658	1,4198x10 ⁻⁵	847,8
	300	0,480	1,4217x10 ⁻⁵	1594,2
Com espaçador RZN	100	0,942	1,4165x10 ⁻⁵	268,1
	200	0,648	1,4199x10 ⁻⁵	673,9
	300	0,518	1,4214x10 ⁻⁵	1204,3

Fonte: Própria do autor.

Tabela 4.10 – Valores SPMP para os casos com arranjos zigue-zague

Geometria		SPMP	
		1 MPa	2 MPa
Com espaçador SZN	100	0,332422	0,279827
	200	0,244798	0,208526
	300	0,131875	0,132276
Com espaçador RZN	100	0,371014	0,353456
	200	0,284890	0,272695
	300	0,228004	0,223436

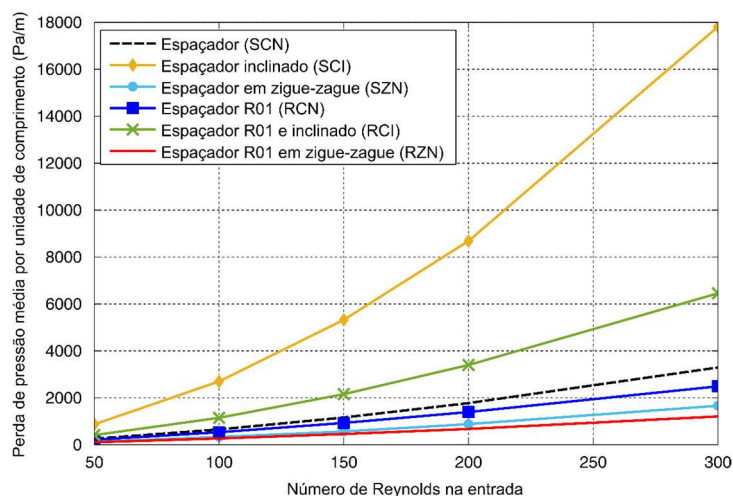
Fonte: Própria do autor.

4.2.6 Análise das variáveis médias para casos com espaçadores triangulares

Os resultados apresentados nesta seção foram obtidos por meio de simulações com geometrias contendo espaçadores triangulares sob condições de pressão na saída do canal de alimentação de 1 MPa e variando o número de Reynolds na seção de entrada.

A Figura 4.85 ilustra a evolução da perda de pressão média por unidade de comprimento para diferentes números de Reynolds dos casos analisados.

Figura 4.85 – Evolução perda de pressão média em função de Re de entrada para casos com espaçadores triangulares a 1 MPa



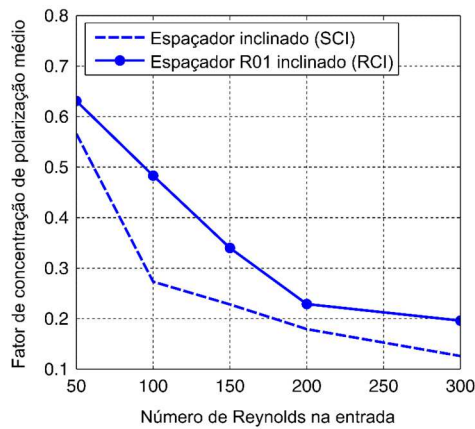
Fonte: Própria do autor.

As curvas da Figura 4.85 mostram que os espaçadores com padrão em zigue-zague apresentam os menores valores de perda de pressão, possuindo, para as curvas referente aos promotores do tipo SZN e RZN, desvios pequenos até número de Reynolds igual a 150. A curva correspondente ao espaçador inclinado (SCI) foi a que apresentou maiores valores de perda de pressão, destoando das demais curvas. Isso é justificado pela forma com que esse tipo de espaçador causa alterações na direção do fluxo e como essas mudanças interagem no comportamento dos efeitos viscosos e arrasto no domínio. Além disso, essas variáveis têm influência intensificada à medida que é incrementado a velocidade do escoamento. Essas considerações são ratificadas por Amokrane et al. (2016) e Dendukuri, Karode e Kumar, (2005).

O desenvolvimento dos valores médios do fator Γ e o do fluxo permeado para os casos triangulares sob diversos números de Reynolds é exibido nas Figuras 4.86 a 4.89. É notável que, comparando as curvas entre o fator Γ e o fluxo permeado para geometrias com mesmo espaçador, há um espelho do comportamento das curvas até nessa situação quando se analisa as médias em função do número de Reynolds.

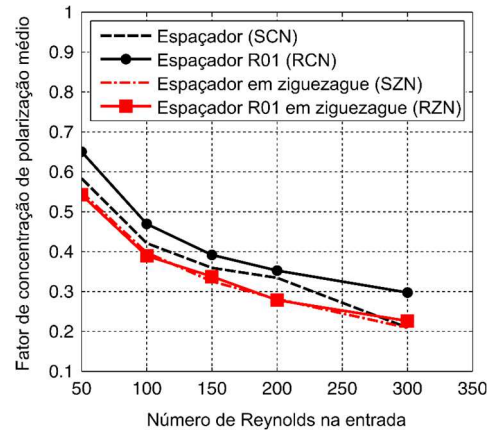
Ao analisar as curvas dos casos com arranjo zigue-zague, verifica-se que o arredondamento dos vértices praticamente não teve influência nos valores médios, pois não houve grandes desvios entre as curvas. Utilizando a média dos valores do fator Γ das curvas, constata-se que a curva do espaçador RCN teve a maior média (0,4324), enquanto a curva do espaçador SCI teve o menor valor (0,2746). Como já mencionado, isso reflete de forma contrária no fluxo permeado, sendo o maior ($7,0493 \times 10^{-6}$ (m³/s)/m²) e o menor ($7,0299 \times 10^{-6}$ (m³/s)/m²) valor para SCI e RCN, respectivamente.

Figura 4.86 – Curvas do fator Γ médio para diversos Re dos casos com espaçadores triangulares inclinados em submerso



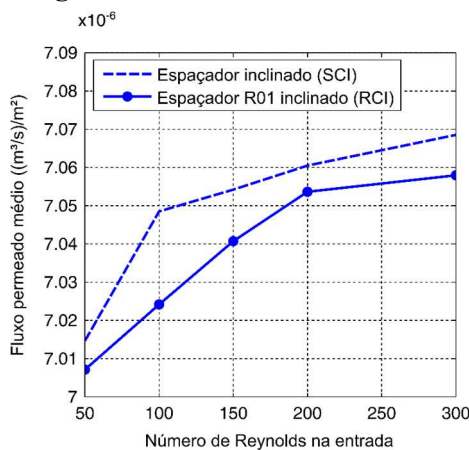
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.87 – Curvas do fator Γ médio para diversos Re dos casos com promotores triangulares em submerso e em zigue-zague



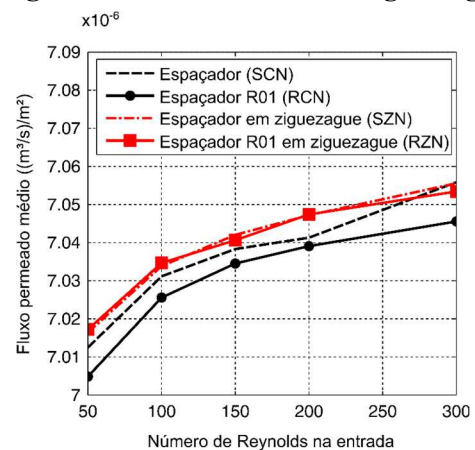
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.88 – Curvas do fator Γ médio para diversos Re dos casos com espaçadores triangulares inclinados em submerso



Fonte: Própria do autor.

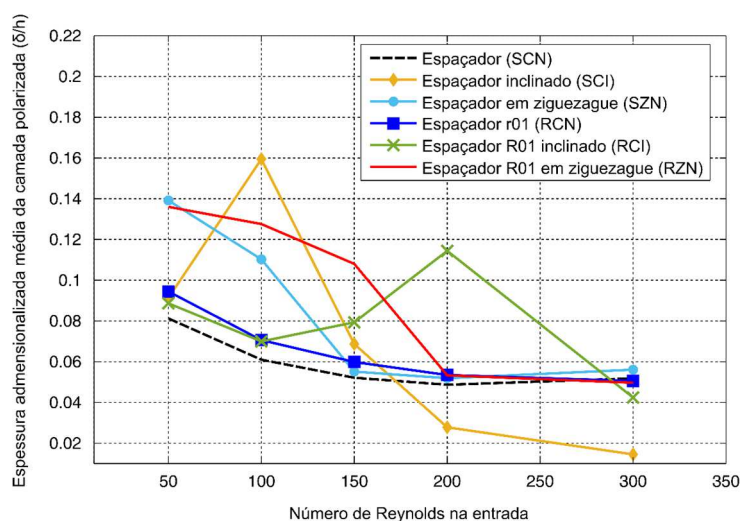
Figura 4.89 – Curvas do fator Γ médio para diversos Re dos casos com promotores triangulares em submerso e em zigue-zague



Fonte: Própria do autor.

A Figura 4.90 ilustra o comportamento da espessura média em função do número de Reynolds para os casos com espaçadores triangulares. As curvas dos espaçadores RCN e SCN mostraram um decaimento gradual, semelhante às suas curvas do fator Γ . Quanto aos comportamentos das outras curvas, ao serem comparadas suas configurações com e sem arredondamento, observa-se que há um atraso das curvas referente aos promotores com arredondamento, como pode ser visto nos picos máximos presentes nas curvas com padrão zigue-zague, em que o SZN teve o pico em 100 e o RZN surgiu a 200. Pode-se atribuir isso à capacidade agressiva que cada espaçador tem em modificar a hidrodinâmica do canal e formar regiões de baixa velocidades nos locais adjacentes à superfície da membrana.

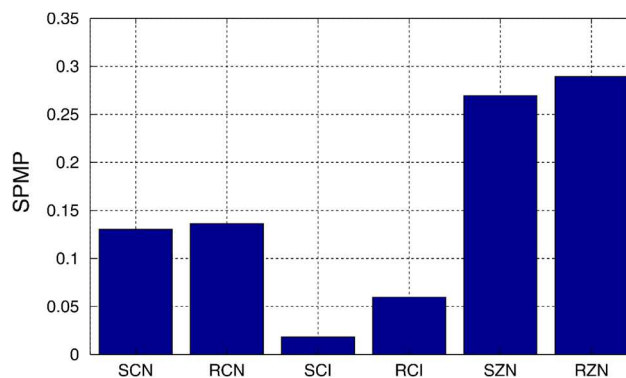
Figura 4.90 – Curvas da espessura média para os casos triangulares



Fonte: Própria do autor.

A Figura 4.91 apresenta os valores médios de cada caso com espaçador triangular obtidos pelos valores de cada condição de operação. Nota-se que os espaçadores zigue-zague possuem as melhores performances quando comparados com os casos com padrão submerso.

Figura 4.91 – Valores das médias de SPMP para os casos com espaçadores triangulares



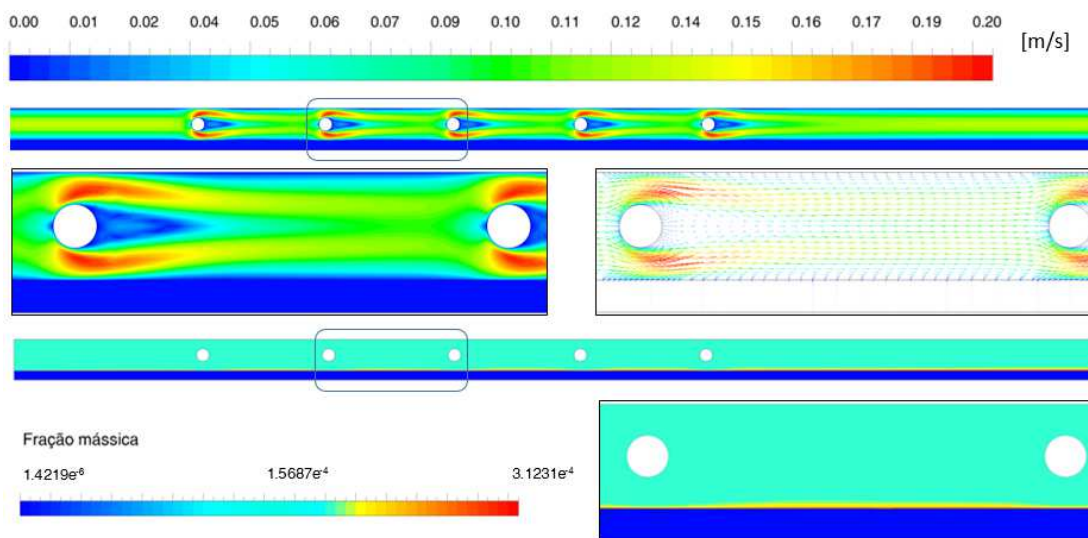
Fonte: Própria do autor.

4.2.7 Espaçador do tipo círculo e com arranjo submerso

Para os casos com promotores circulares de diâmetro 0,8, 1 e 1,2 mm em padrão submerso, foram exibidas nas Figuras 4.92 a 4.94 as distribuições de velocidade e fração mássica do soluto sob condição de Re 200 na seção de entrada e pressão de 1 MPa na saída do canal de alimentação. As figuras mostram uma influência do diâmetro do espaçador na

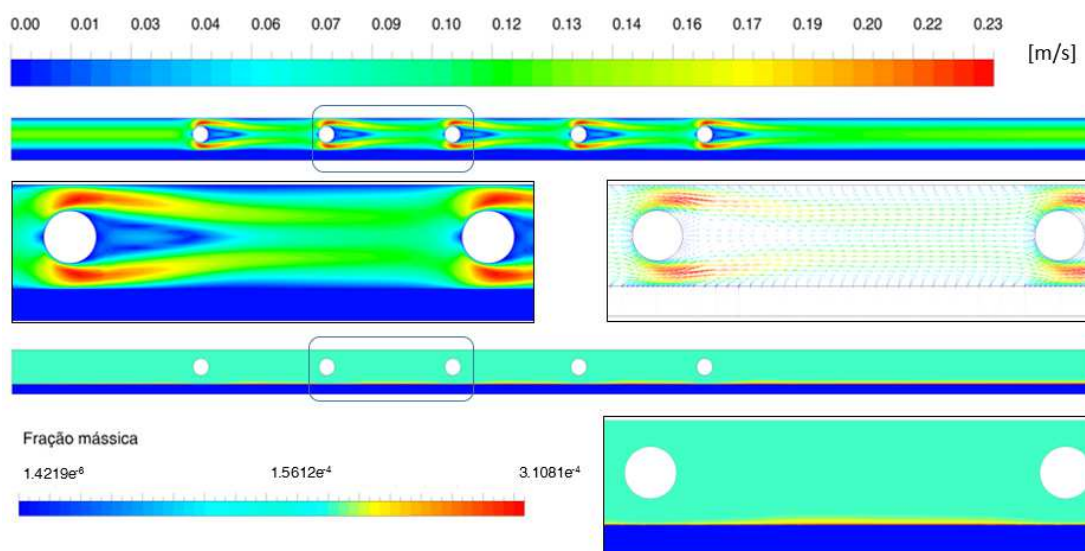
distribuição de velocidade entre os promotores, constatando um aumento da velocidade a cima e abaixo do espaçador e um crescimento do comprimento da esteira à medida que há um acréscimo nos diâmetros, o que intensifica o efeito de “estrangulamento” do escoamento (direcionamento do escoamento para o centro do canal) logo depois do término da esteira.

Figura 4.92 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador circular com $d = 0,8$ mm e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa



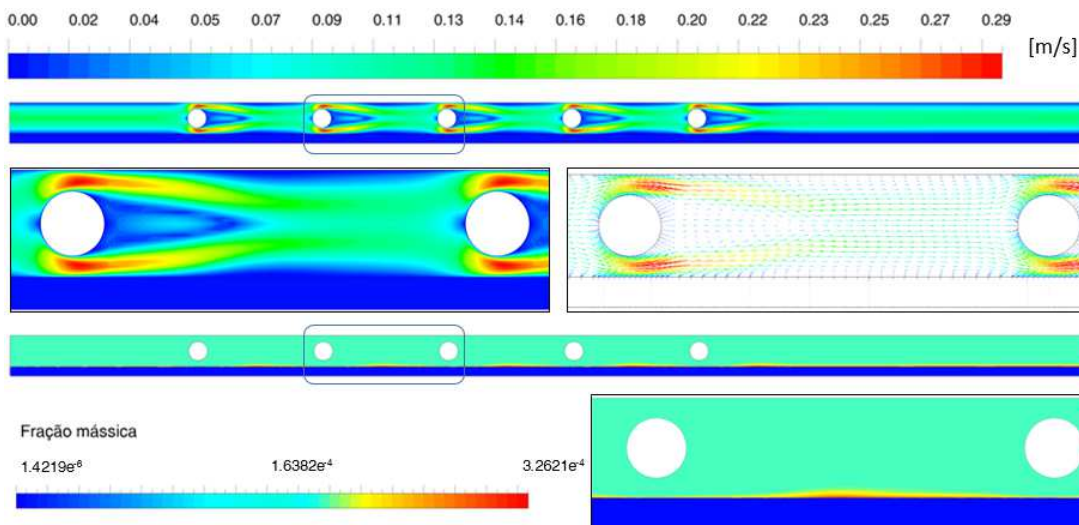
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.93 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador circular com $d = 1$ mm e com arranjo submerso a Re 200 e pressão 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

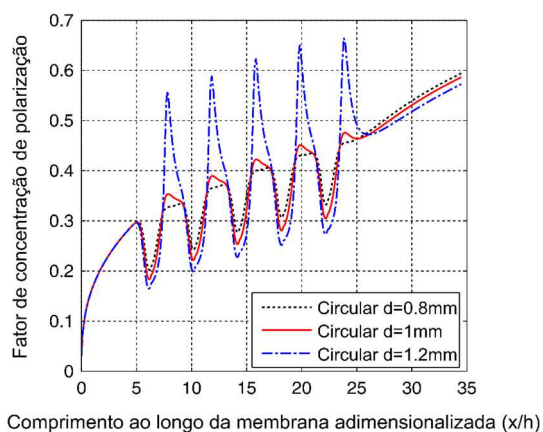
Figura 4.94 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador circular com $d = 1,2$ mm e com arranjo submerso a $Re\ 200$ e pressão 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

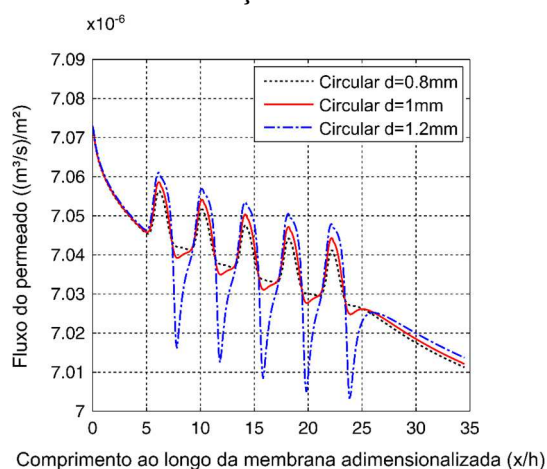
Outro ponto a destacar em uma comparação entre as Figuras 4.92 a 4.94 é que esse efeito “estrangulamento” cria uma expansão de uma região de baixa velocidade próxima à superfície da membrana, que é refletido na distribuição da fração mássica do soluto, como é visto nas figuras em destaques em que a região de depósito, para o caso $d = 1,2$ mm, torna-se mais visível e maior quando comparado com os demais, sobretudo ao caso de 0,8 mm. Esse efeito fica mais nítido quando se analisa as curvas de Fator Γ e fluxo permeado ao longo da membrana, vide Figuras 4.95 e 4.96, com a evolução dos picos nas regiões entre espaçadores.

Figura 4.95 – Curvas do fator Γ dos casos com condição $Re\ 200$ e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.96 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição $Re\ 200$ e 1 MPa

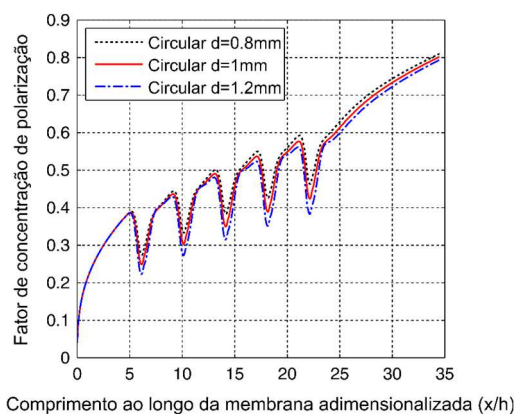


Fonte: Própria do autor.

Utilizando, como métrica, a diferença de altura do pico 1 das curvas adotando como referência a curva do caso com espaçador $d = 0,8$ mm e mantendo a mesma ordenada, tem-se que a curva correspondente ao espaçador circular $d = 1,2$ mm possui um valor da diferença de altura de 0,2316 e para o promotor com $d = 1$ mm obteve-se 0,0265, havendo aproximadamente um aumento de 8,7 vezes, mostrando a capacidade da região de baixa velocidade formada nas proximidades da superfície da membrana.

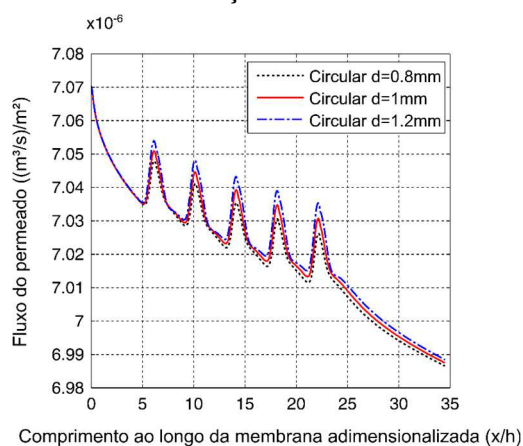
As Figuras 4.97 e 4.98 apresentam as curvas do fator Γ e do fluxo permeado para os espaçadores circulares sob condição com Re 100 na seção de entrada e pressão de 1 MPa na seção de saída do canal de alimentação.

Figura 4.97 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 100 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.98 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa

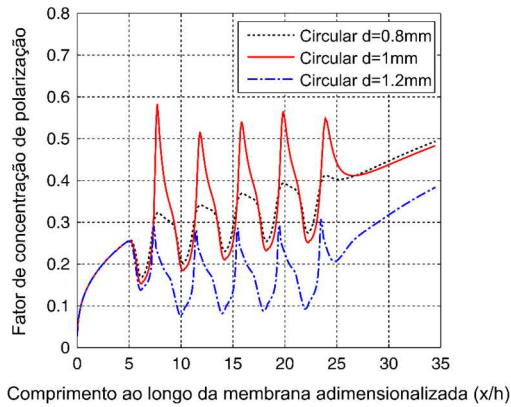


Fonte: Própria do autor.

Observa-se que as curvas têm um comportamento parecido entre si e se aproximam do comportamento visto para o caso com espaçador $d = 0,8$ mm na condição de Re 200 e pressão 1 MPa. É possível afirmar, para essas simulações, que o mecanismo de remoção do soluto predominante é a velocidade tangencial provida das condições de contorno da seção de entrada, visto que, praticamente não se tem a influência região de velocidade baixa formada pelo redirecionamento do escoamento logo após a esteira. Por causa desse efeito, nota-se que o espaçador circular com $d = 1,2$ mm (fator Γ médio = 0,4636) é o que apresenta melhor capacidade de remoção do soluto do que o caso com $d = 1$ mm (fator Γ médio = 0,4662) e $d = 0,8$ mm (fator Γ médio = 0,4813), pois consegue gerar maiores valores de velocidade tangencial na superfície da membrana.

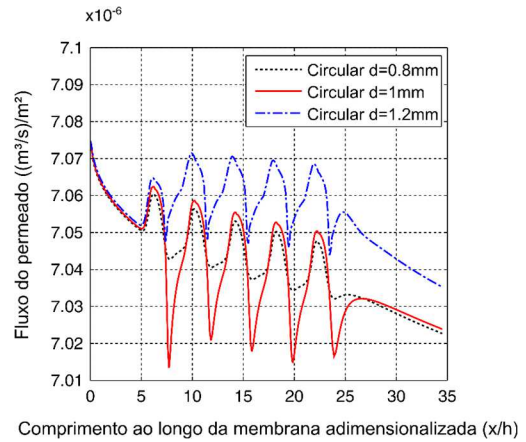
As figuras 4.99 e 4.100 exibem as curvas obtidas das simulações com condições de contorno na seção de entrada Re 300 e pressão 1 MPa na saída do canal de alimentação.

Figura 4.99 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

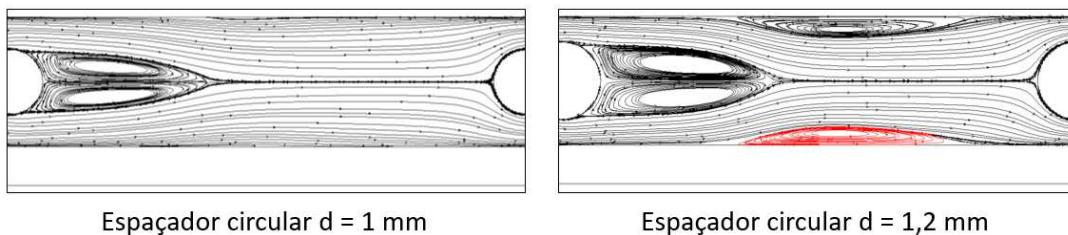
Figura 4.100 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

É visto na Figura 4.99 um maior desvio na curva correspondente ao espaçador circular $d = 1,2 \text{ mm}$ das demais curvas. Para essas condições, isso se deve à capacidade deste espaçador em produzir zonas de recirculação, como pode ser visto na Figura 4.101 quando comparadas as linhas de correntes obtidas nos casos com espaçador circular $d = 1,2 \text{ mm}$ e $d = 1 \text{ mm}$. Ao comparar as médias do fator Γ , constata-se que o caso com espaçador circular $d = 1,2 \text{ mm}$ teve uma redução de 38,3% em relação ao caso com promotor circular $d = 1 \text{ mm}$.

Figura 4.101 – Linhas de corrente para os casos com espaçadores circulares a condição de Re 300 e diâmetro de 1 e 1,2 mm



Fonte: Própria do autor.

A Tabela 4.11 contém os valores médios obtidos nas simulações com geometrias utilizadas nesta seção e condições de contornos semelhantes com exceção na pressão aplicada na saída do canal de alimentação, que foi de 2 MPa. Percebe-se que os valores médios apresentaram os mesmos comportamentos visto para os outros espaçadores estudados, mostrando, novamente, que há uma relação entre os valores médios e o número de Reynolds.

Ao comparar os três tipos de espaçadores, no geral, a geometria circular é o que apresentou menores níveis de perda de pressão por unidade de comprimento.

Tabela 4.11 – Valores médios do fator $\bar{\Gamma}$ e do fluxo permeado e perda de pressão para geometrias estudadas sob uma pressão aplicada de 2 MPa

Geometria	Re	$\bar{\Gamma}$	\bar{J}_v	$\Delta P/L$
Sem espaçador	100	1,506	$1,4101 \times 10^{-5}$	117,4
	200	1,092	$1,4148 \times 10^{-5}$	236,2
	300	0,638	$1,4168 \times 10^{-5}$	355,1
Espaçador circular d = 0,8 mm	100	1,189	$1,4137 \times 10^{-5}$	352,2
	200	0,843	$1,4176 \times 10^{-5}$	882,6
	300	0,709	$1,4192 \times 10^{-5}$	1543,5
Espaçador circular d = 1 mm	100	1,148	$1,4142 \times 10^{-5}$	498,6
	200	0,826	$1,4178 \times 10^{-5}$	1298,6
	300	0,748	$1,4188 \times 10^{-5}$	2331,9
Espaçador circular d = 1,2 mm	100	1,145	$1,4142 \times 10^{-5}$	795,7
	200	0,880	$1,4173 \times 10^{-5}$	2143,5
	300	0,440	$1,4223 \times 10^{-5}$	3913,0

Fonte: Própria do autor.

Os valores SPMP das simulações realizadas para esta seção são apresentados na Tabela 4.12, em que é visto o espaçador de menor diâmetro com os melhores valores quando comparado com os demais espaçadores circulares estudados.

Tabela 4.12 – Valores SPMP para os casos com arranjos submersos

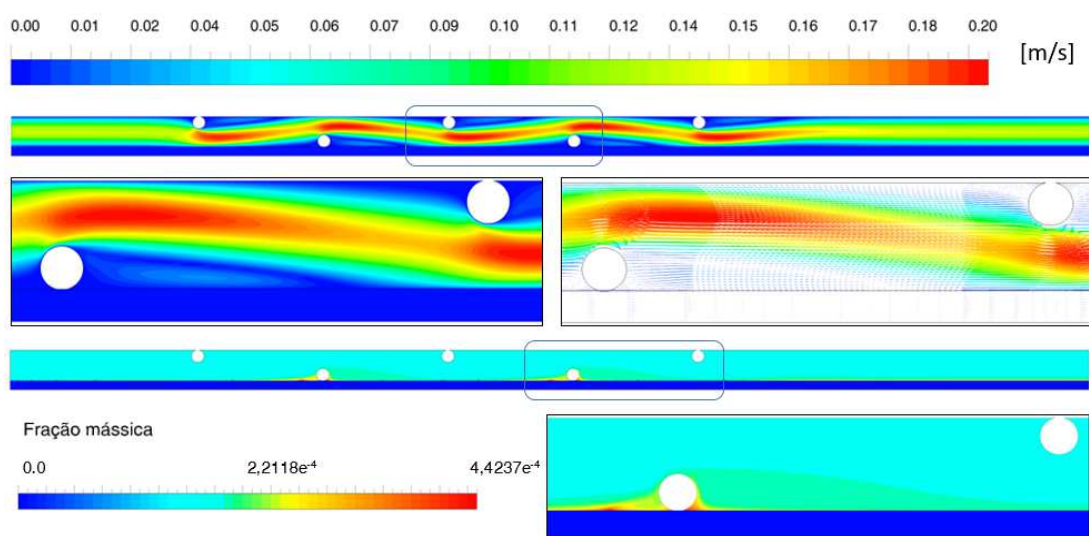
Geometria		SPMP	
		1 MPa	2 MPa
Espaçador circular d = 0,8 mm	100	0,582723	0,594973
	200	0,497725	0,531783
	300	0,205165	0,318697
Espaçador circular d = 1 mm	100	0,501526	0,499122
	200	0,377470	0,374901
	300	0,299608	0,302379
Espaçador circular d = 1,2 mm	100	0,309683	0,309245
	200	0,222584	0,220635
	300	0,137480	0,135548

Fonte: Própria do autor.

4.2.8 Espaçador do tipo círculo e com arranjo zigue-zague

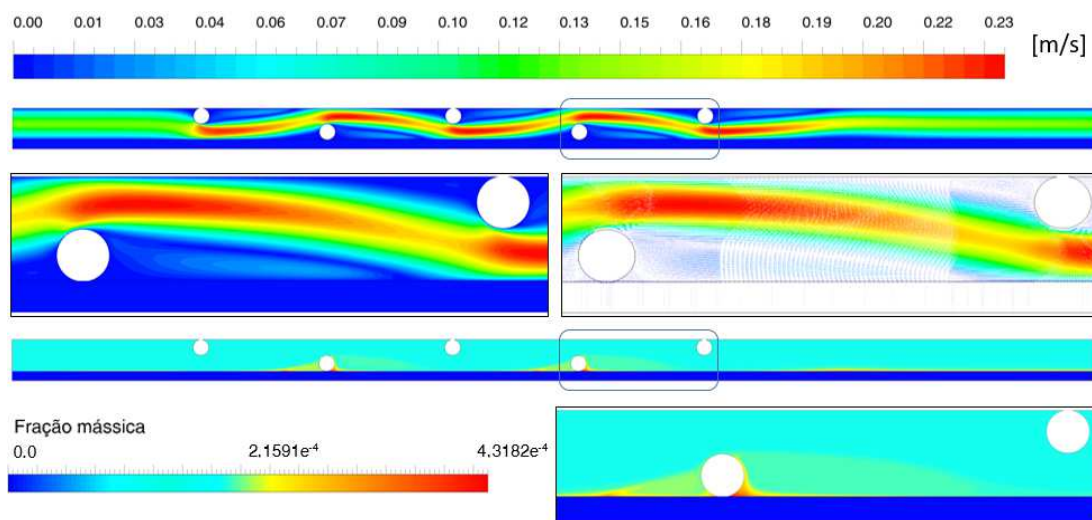
Referente a geometrias contendo espaçadores circulares em zigue-zague com diâmetro igual a 0,8, 1 e 1,2 mm, foram obtidas os campos de velocidade e de fração mássica do soluto, Figuras 4.102 a 4.104, através de simulações a uma condição de velocidade de Re 200 na entrada e pressão de 1 MPa na saída do concentrado.

Figura 4.102 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador circular com $d = 0,8$ mm e com arranjo zigue-zague a Re 200 e pressão 1 MPa



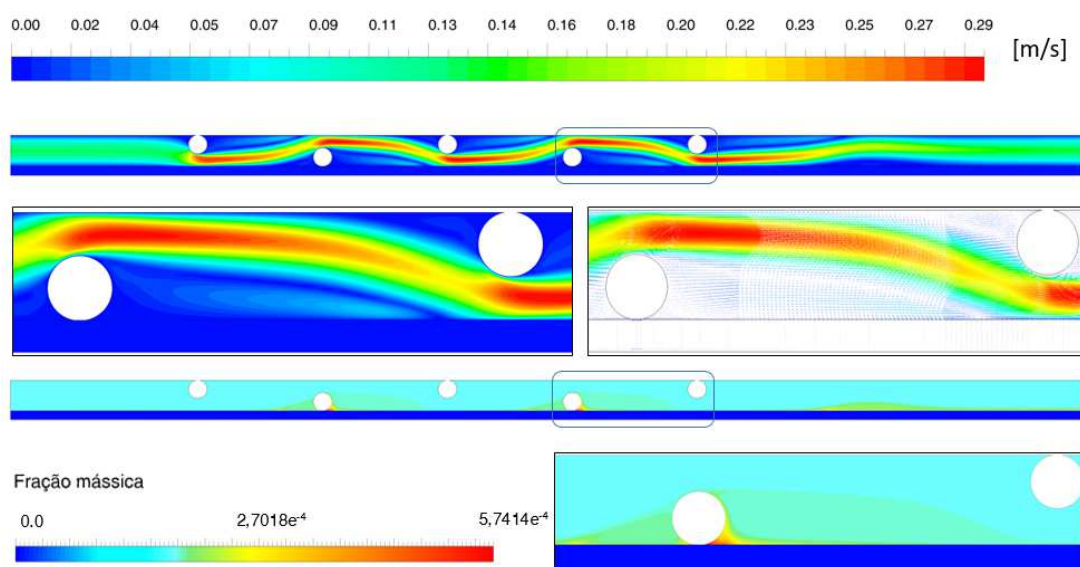
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.103 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador circular com $d = 1,0$ mm e com arranjo zigue-zague a Re 200 e pressão 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.104 – Campo de velocidade e fração mássica para domínio com espaçador circular com $d = 1,2$ mm e com arranjo zigue-zague a Re 200 e pressão 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

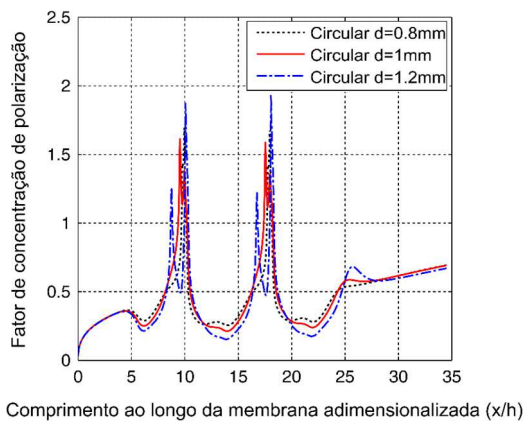
Os campos de velocidades das Figuras 4.102 a 4.104 apresentam uma distribuição característica dos casos que utilizaram na suas geometrias arranjos do tipo zigue-zague, apresentando regiões de estagnação antes e depois de cada espaçador e, conseqüentemente, é onde há maiores valores de fração mássica do soluto. Ao comparar os campos de velocidades das simulações dos casos desta seção, são observadas diferenças nas regiões de baixas velocidades, alterando sua altura e comprimento em função do diâmetro do espaçador, o que reflete na formação de regiões com acúmulo do soluto no domínio, como pode ser visto nas figuras contendo a distribuição de fração mássica do soluto.

As Figuras 4.105 a 4.110 apresentam as curvas do fator de polarização de concentração e fluxo permeado para as geometrias que possuem espaçadores circulares em padrão zigue-zague. As condições de contorno utilizadas são compostas por pressão 1 MPa na saída do canal de alimentação e velocidade com perfil plenamente desenvolvido na seção de entrada variando o número de Reynolds em 100, 200 e 300.

Ao comparar os gráficos, percebe-se que os espaçadores do tipo circular conseguem produzir picos nas regiões correspondentes à presença do espaçador e no local próximo à saída, conduzindo, assim, três regiões de depósitos, como é visto nos campos de fração mássica do soluto nas Figuras 4.102 a 4.104. Esse comportamento reflete de forma inversa no desempenho do fluxo permeado.

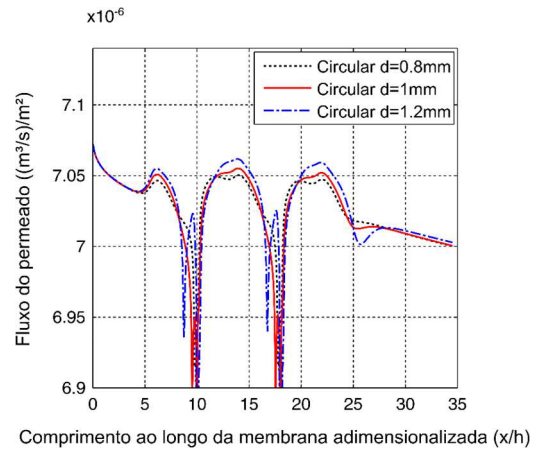
Além disso, as amplitudes máximas dos picos são influenciadas pelo diâmetro dos espaçadores e pela velocidade impostas na seção de entrada. No entanto, ao comparar as médias do fator Γ das curvas para condição Re 300, verifica-se que há pouca diferença quando varia o diâmetro do espaçador, sendo o promotor $d = 1,2$ mm ($\bar{\Gamma} = 0,2541$) o menor valor, seguindo pelo promotor 1 mm ($\bar{\Gamma} = 0,2665$) e, por fim, o espaçador 0,8 mm ($\bar{\Gamma} = 0,2672$), havendo para maior média uma variação de 5,16% em relação ao menor valor.

Figura 4.105 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 100 e 1 MPa



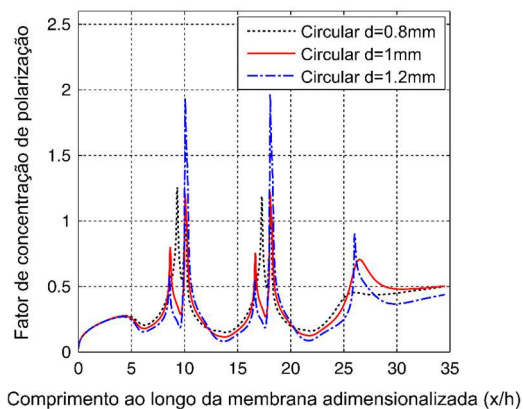
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.106 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 100 e 1 MPa



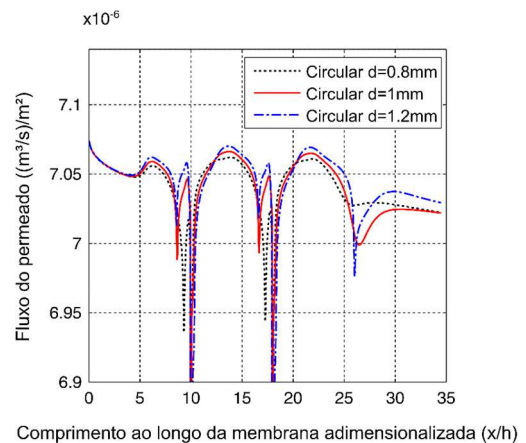
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.107 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 200 e 1 MPa



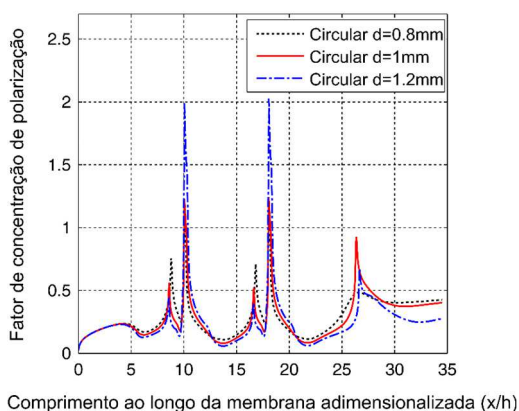
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.108 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa



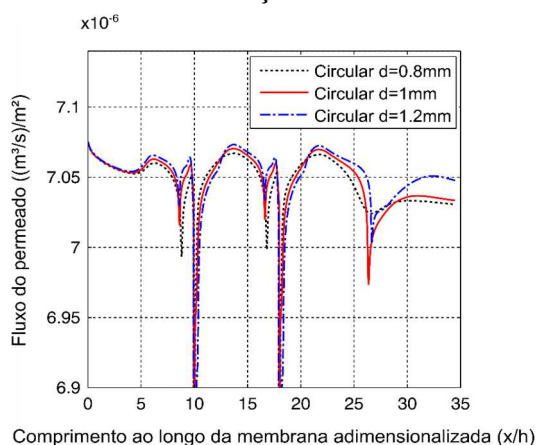
Fonte: Própria do autor.

Figura 4.109 – Curvas do fator Γ dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.110 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 300 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

As Tabelas 4.13 e 4.14 exibem os valores das médias do fator Γ e do fluxo permeado, perda de pressão por unidade de comprimento e SPMP para geometrias com espaçadores circulares dispostos com arranjo zigue-zague. Nota-se a grande influência da perda de pressão nos valores do SPMP, em que o espaçador circular $d = 0,8$ mm apresentaram menores perdas de pressão e maiores SPMP.

Tabela 4.13 – Valores médios do fator Γ e da fluxo permeado e perda de pressão para geometrias estudadas sob uma pressão aplicada de 2 MPa

Geometria	Re	$\bar{\Gamma}$	\bar{J}_v	$\Delta P/L$
Sem espaçador	100	1,506	$1,4101 \times 10^{-5}$	117,4
	200	1,092	$1,4148 \times 10^{-5}$	236,2
	300	0,638	$1,4168 \times 10^{-5}$	355,1
Espaçador circular $d = 0,8$ mm	100	1,139	$1,4143 \times 10^{-5}$	204,3
	200	0,836	$1,4178 \times 10^{-5}$	478,3
	300	0,620	$1,4202 \times 10^{-5}$	805,8
Espaçador circular $d = 1$ mm	100	1,250	$1,4131 \times 10^{-5}$	294,2
	200	0,764	$1,4186 \times 10^{-5}$	736,2
	300	0,626	$1,4202 \times 10^{-5}$	1317,4
Espaçador circular $d = 1,2$ mm	100	1,038	$1,4155 \times 10^{-5}$	475,4
	200	0,700	$1,4193 \times 10^{-5}$	1268,1
	300	0,606	$1,4204 \times 10^{-5}$	2411,6

Fonte: Própria do autor.

Tabela 4.14 – Valores SPMP para os casos com arranjos submersos

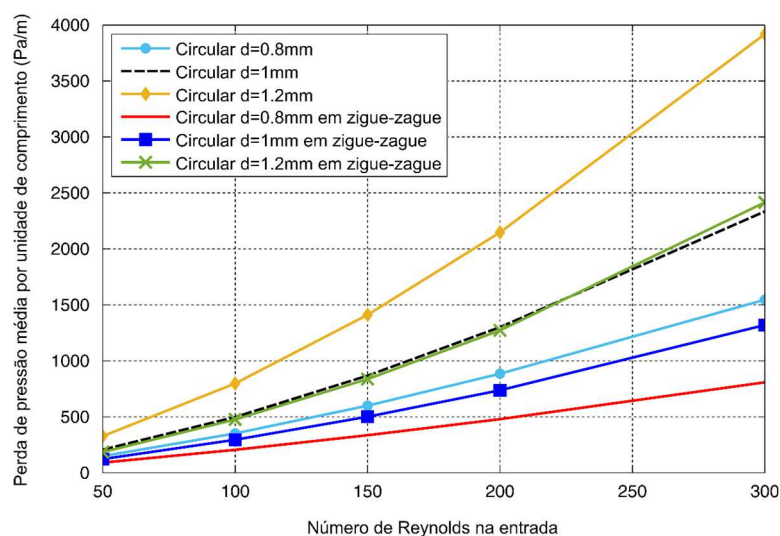
Geometria		SPMP	
		1 MPa	2 MPa
Espaçador circular d = 0,8 mm	100	0,440823	0,418832
	200	0,356739	0,339724
	300	0,309927	0,302909
Espaçador circular d = 1 mm	100	0,257769	0,242928
	200	0,195397	0,185751
	300	0,150543	0,145745
Espaçador circular d = 1,2 mm	100	0,179556	0,169312
	200	0,115289	0,108022
	300	0,065236	0,060577

Fonte: Própria do autor.

4.2.9 Análise das variáveis médias para casos com espaçadores circulares

A Figura 4.111 ilustra a evolução da perda de pressão média por unidade de comprimento em diversos números de Reynolds nas simulações com geometrias contendo espaçadores circulares. Observa-se que maiores perdas de pressão foi da curva referente à geometria com espaçador circular d = 1,2 mm e o espaçador d = 0,8 mm em zigue-zague teve as menores perdas de pressão.

Figura 4.111 – Curvas da $\Delta P/L$ em função de diferentes número de Reynolds para geometrias com espaçadores circulares

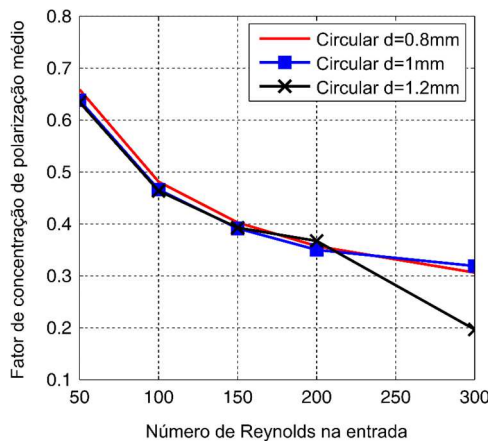


Fonte: Própria do autor.

Outro ponto a destacar, é que as curvas têm taxa de crescimento variando com base nos tamanhos dos espaçadores circulares e nos tipos de arranjos, havendo uma dependência proporcional de $Re^{1,36-1,17}$, em que foi obtido por meio ajuste de curva do tipo x^a com correlação superior a 0,99, sendo $Re^{1,36}$ para espaçador $d = 1,2$ mm com padrão submerso e $Re^{1,17}$ para espaçador $d = 0,8$ mm em zigue-zague. Faixas dos números do expoente têm grandezas similares encontradas para outros tipos de espaçadores por Kavianipour, Ingram e Vuthaluru (2017)

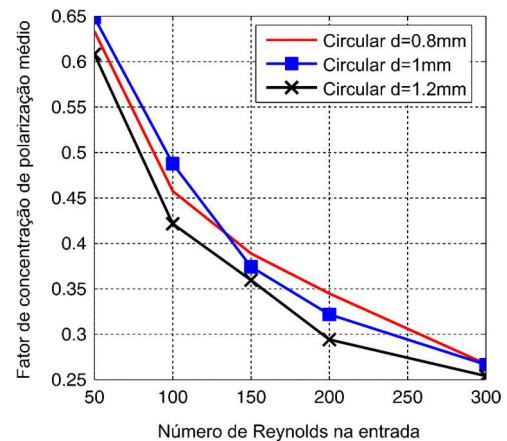
As Figuras 4.112 a 4.113 exibem as curvas do fator Γ médio em função de diversos números de Reynolds para simulações com geometrias contendo espaçadores circulares nos padrões submerso e zigue-zague, respectivamente.

Figura 4.112 – Curvas do fator Γ médio em função de Re dos casos em submerso



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.113 – Curvas do fator Γ médio em função de Re dos casos em zigue-zague

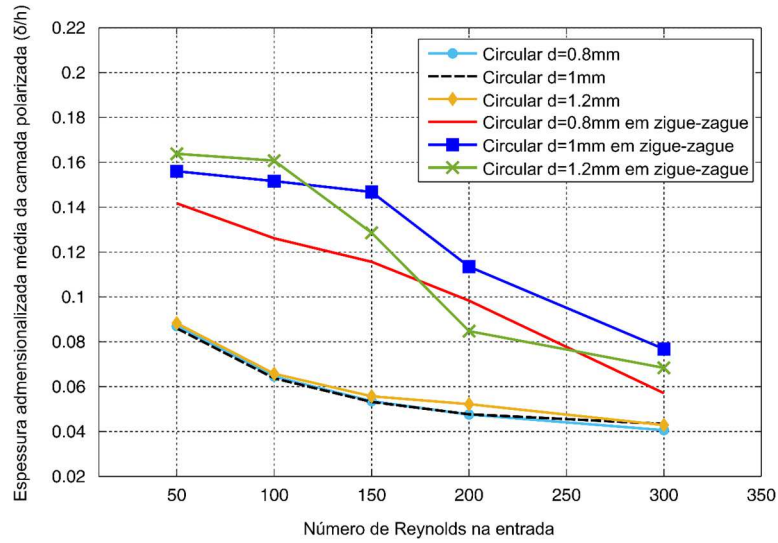


Fonte: Própria do autor.

As curvas indicam comportamentos semelhantes entre si, com um decaimento gradual à medida que há o incremento do número de Reynolds, havendo uma maior variação nos menores valores do número de Reynolds, com exceção da curva correspondente ao espaçador circular $d = 1,2$ mm padrão submerso, que apresentou uma alteração elevada no declínio para valores superiores a Re 200, causada, possivelmente, pelo surgimento efetivo de zonas de recirculação nas localidades adjacentes a superfície da membrana, conforme visto na Figura 4.101.

A Figura 4.114 expõe as curvas referentes a espessura média adimensionalizada (δ/h) da camada limite de polarização em função do número de Reynolds para os casos com espaçadores circulares, obtidas por meio das médias dos valores captados pela UDF apresentada no Apêndice A - V.

Figura 4.114 – Curvas da espessura média para os casos com espaçadores circulares

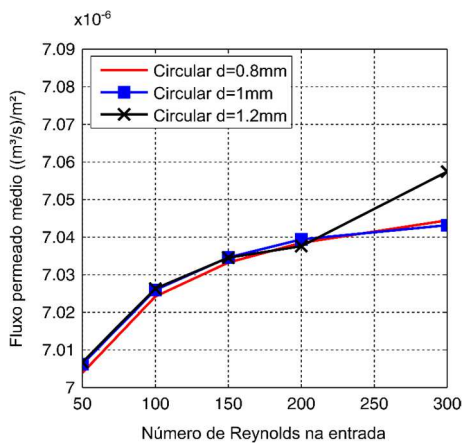


Fonte: Própria do autor.

As curvas da Figura 4.114 exibem um comportamento de decaimento com o aumento do número de Reynolds, semelhante ao que foi visto nas curvas de fator Γ . Além disso, há um grande desvio nas curvas entre o padrão submerso e zigue-zague. Possivelmente os valores médios foram afetados pelas as regiões de estagnação localizados próximas aos espaçadores fixados na superfície da membrana nos casos zigue-zague, elevando a sua média.

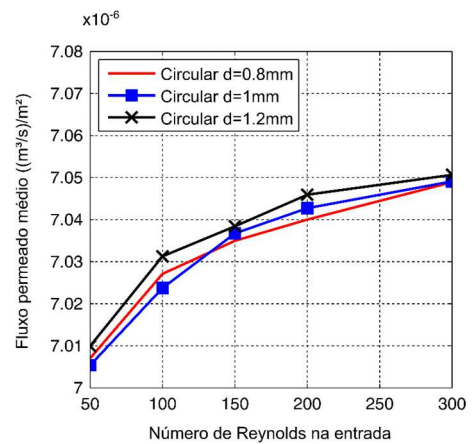
As Figuras 4.115 e 4.116 apresentam os fluxos permeados médios em função do número de Reynolds dos casos circulares com arranjos submerso e zigue-zague, respectivamente.

Figura 4.115 – Curvas do fluxo permeado médio em função de Re dos casos com padrão submerso



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.116 – Curvas do fluxo permeado médio em função de Re dos casos com padrão zigue-zague

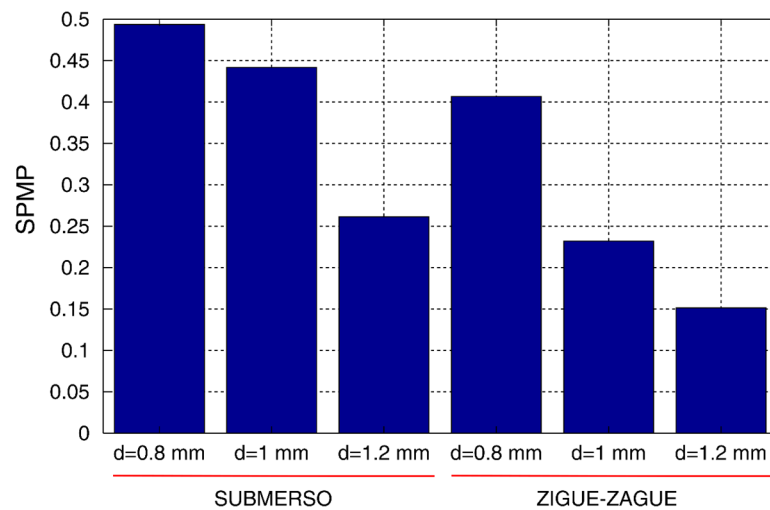


Fonte: Própria do autor.

Percebe-se que quanto menor os valores médios do fator Γ , visto nas Figuras 4.112 a 4.113, maior são os valores do fluxo permeado médio, mostrando, como notado nos outros espaçadores, uma relação entre esses dois parâmetros. Utilizando a métrica do valor máximo para comparar as curvas de cada arranjo, percebe-se que os fluxos permeados máximos são conseguidos pela geometria contendo círculos $d = 1,2$ mm a uma condição de contorno de Re 300 a 1 MPa, que para o padrão submerso teve o pico de $7,0574 \times 10^{-06}$ (m³/s)/m² e para o padrão zigue-zague teve o valor máximo de $7,0507 \times 10^{-06}$ (m³/s)/m², correspondendo a uma diferença pequena de $0,0067 \times 10^{-06}$ (m³/s)/m², resultado este influenciado pela formação de zonas de recirculação.

A Figura 4.117 mostra o SPMP médio dos casos com geometria contendo espaçadores circulares, em que observa-se a dominância do arranjo submerso, com destaque para o valor maior que pertence à geometria com espaçador circular $d = 0,8$ mm.

Figura 4.117 – Valores das médias de SPMP para os casos com espaçadores circulares



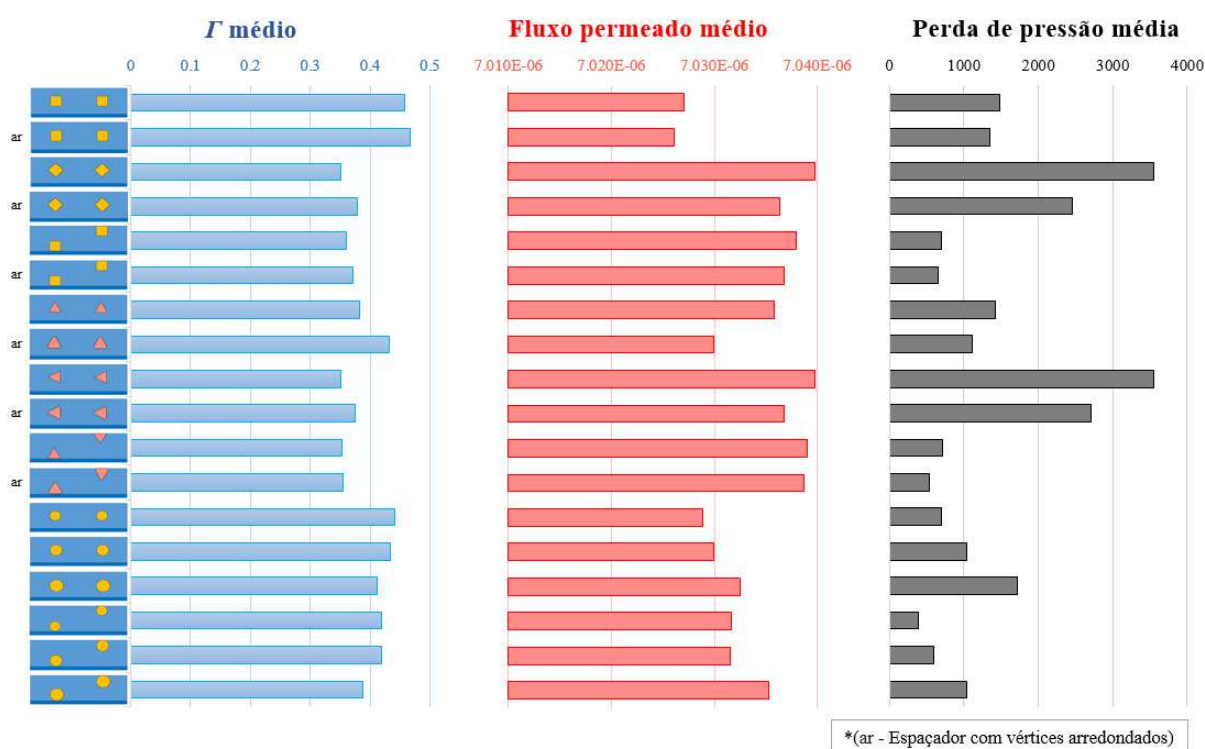
Fonte: Própria do autor.

Ao comparar com todos os espaçadores estudados, este caso com espaçador circular proporcionou o melhor valor de SPMP, muito influenciado por ter a menor perda de pressão entre os espaçadores, como também visto por Kaviani-pour, Ingram e Vuthaluru (2017), no qual afirma que o parâmetro SPMP é bastante afetado por essa variável de perda de pressão. No entanto, o caso com espaçador circular é o que oferece o melhor equilíbrio entre os parâmetros de consumo de energia por perda de carga e combate a polarização de concentração dentre os espaçadores estudados, de acordo por este parâmetro SPMP.

4.2.10 Comparação entre os tipos de espaçadores

A Figura 4.118 exibe gráficos de barras com os valores médios do fator Γ , fluxo permeado e perda de pressão para cada tipo de espaçadores e arranjos estudados. Os valores médios foram calculados através dos resultados obtidos nos casos com número de Reynolds da seção de entrada de 50, 100, 150, 200 e 300 e sob uma pressão aplicada na saída do canal de alimentação de 1 MPa.

Figura 4.118 – Valores médios do fator Γ , fluxo permeado e perda de pressão para os espaçadores e arranjos estudados



Fonte: Própria do autor.

Ao analisar os gráficos de barras na Figura 4.118, percebe-se que os maiores valores de fluxo permeado foram os que tiveram os menores valores de fator Γ , sendo os espaçadores quadráticos e triangulares, inclinados e sem arredondamento dos vértices o que apresentaram os maiores valores de fluxo permeado e consequentemente, foram os que possuíram menor acúmulo de fração mássica na superfície da membrana. No entanto, ao analisar a perda de pressão, esses dois espaçadores foram o que apresentaram as maiores perdas de pressão, necessitando, maiores cargas energéticas, o que ocasionará no maior custo para o processo.

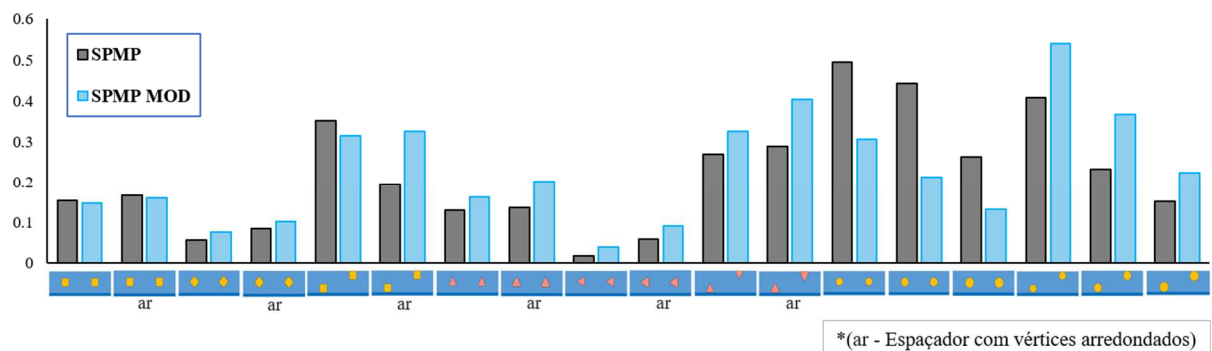
Outro ponto a destacar ao analisar os valores médios do fluxo permeado, é que o espaçador do tipo circular, arranjo submerso e com diâmetro equivalente a 0,8 mm, avaliado pelo parâmetro SPMP de Schwinge, Wiley e Fletcher (2002) como espaçador de melhor performance entre os promotores estudados, apresentou um dos menores valores de produção do fluxo permeado, sendo o terceiro pior entre as geometrias estudadas. Entretanto esse espaçador está entre os promotores com menores perdas de cargas, o que influenciou de forma efetiva no valor de SPMP, haja visto que esse parâmetro é afetado de forma intensa pela perda de pressão, tal afirmação é corroborada por Kaviani-pour, Ingram e Vuthaluru (2017).

Assim, afim de minimizar o efeito da perda de carga no parâmetro SPMP e relacionar com um parâmetro diretamente vinculado ao processo e à produção, foi proposto uma modificação na equação de Schwinge, Wiley e Fletcher (2002), alterando as variáveis utilizadas no numerador, substituindo a diferença da fração mássica entre a saída e a entrada do canal de alimentação pelo fluxo permeado na membrana, conforme pode ser visto na Equação 4.3.

$$SPMP_{mod} = \frac{J_{w\text{espaçador}}/J_{w\text{sem espaçador}}}{\Delta P_{\text{espaçador}}/\Delta P_{\text{sem espaçador}}} \quad (4.3)$$

O gráfico de colunas da Figura 4.119 ilustra os valores médios dos parâmetros $SPMP_{mod}$ e SPMP para as geometrias de espaçadores estudados, referente aos casos com número de Reynolds da seção de entrada de 50, 100, 150, 200 e 300 e pressão aplicada na saída do canal de alimentação de 1 MPa.

Figura 4.119 – Valores médios de $SPMP_{mod}$ e SPMP para os promotores estudados



Fonte: Própria do autor.

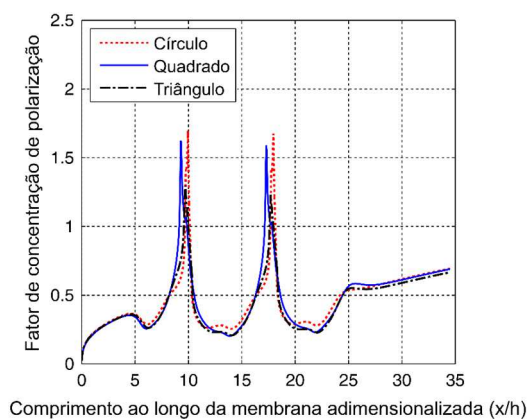
A Figura 4.119 mostra que os maiores valores do $SPMP_{mod}$ são obtidos quando os espaçadores ficam dispostos com o arranjo zigue-zague, isso comparando com o arranjo

submerso do mesmo tipo de espaçador. Além disso, é visto que dentre os espaçadores dispostos em zigue-zague e baseando a análise no parâmetro $SPMP_{mod}$, o promotor circular com diâmetro igual a 0,8 mm foi o que teve uma melhor performance dentre os espaçadores estudados e o que melhor relaciona com a menor perda de pressão e com uma maior produção do permeado.

Ao comparar os valores obtidos pelos parâmetros SPMP e $SPMP_{mod}$ percebe-se que os maiores valores foram conseguidos com a geometria do espaçador do tipo circular e diâmetro equivalente a 0,8 mm, variando apenas no arranjo que espaçador é colocado no canal de alimentação, sendo maior valor SPMP para arranjo submerso e $SPMP_{mod}$ para zigue-zague. Ao comparar os valores médios dos parâmetros de processo, na Figura 4.118, para essas duas geometrias, é observado que o espaçador com maior valor de $SPMP_{mod}$ consegue produzir mais fluxo permeado com um menor valor de perda de pressão do que o outro espaçador que possui o maior SPMP. Isso indica que o promotor circular 0,8 mm disposto em zigue-zague possui uma melhor relação entre o custo energético e a produção do fluxo permeado dentre os demais espaçadores e mostra que o $SPMP_{mod}$ possui uma maior sensibilidade aos parâmetros de processo para análise de desempenho dos tipos de geometrias de espaçadores.

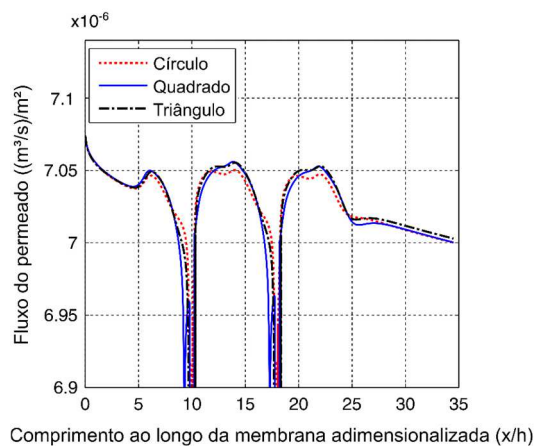
As Figuras 4.120 e 4.121 exibem as curvas de evolução do fator Γ e do fluxo permeado para os casos com os maiores valores de $SPMP_{mod}$ referente a cada tipo de espaçador, ambos os casos possuem a mesma condição de operação que é número de Reynolds na entrada de 100 e pressão de 1 MPa na saída do canal de alimentação. Ademais, os espaçadores quadráticos e triangulares escolhidos possuem arredondamento nos vértices e todos estão em zigue-zague.

Figura 4.120 – Curvas do fator Γ para os promotores estudados e dispostos zigue-zague



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.121 – Curvas do fluxo permeado para os promotores em zigue-zague estudados

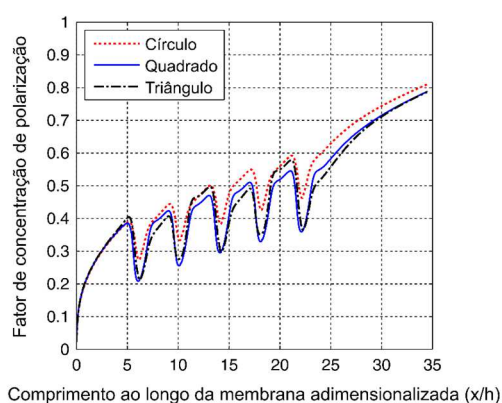


Fonte: Própria do autor.

As curvas de evolução do fator Γ da Figura 4.120 apresentam comportamentos típicos de espaçadores em zigue-zague e são semelhantes entre si. No entanto, percebe-se que há pequenas variações entre as curvas, principalmente na região com $x > 5$. Isso é decorrência da capacidade que cada geometria de espaçador possui em influenciar a hidrodinâmica do canal que ocasiona, como consequência, a alteração do acúmulo de soluto nas regiões próximas a superfície da membrana. Um outro ponto a destacar é o tamanho dos picos das curvas e isso está relacionado a forma como ocorre a junção entre o espaçador e a membrana, sendo considerado o caso com espaçador circular o mais propício em acumular soluto nas vizinhanças dessa região de ligação, apesar do arredondamento das demais geometrias. Nas curvas da Figura 4.121, percebe-se que segue a tendência oposta da Figura 4.120, assim como foi visto ao longo da seção 4.2.

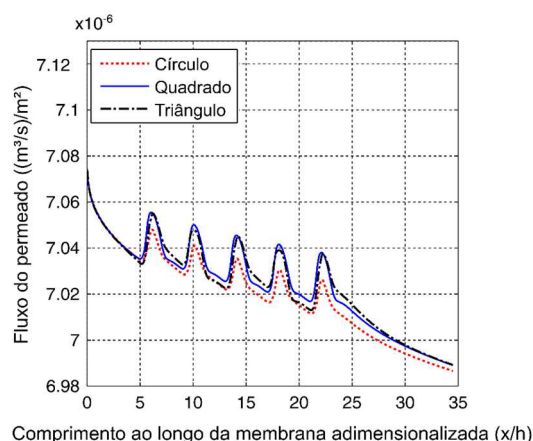
As Figuras 4.122 e 4.123 apresentam as curvas do fator Γ e fluxo permeado para os casos com maiores $SPMP_{mod}$ para cada tipo de espaçador e disposto em submerso. Os casos possuem a condição de entrada com Re 100 e pressão aplicada no concentrado equivalente a 1 MPa. Assim como os casos das Figuras 4.120 e 4.121, os promotores quadráticos e triangulares possuem arredondamento nos vértices.

Figura 4.122 – Curvas do fator Γ para os promotores estudados em submerso



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.123 – Curvas do fluxo permeado para os promotores estudados em submerso



Fonte: Própria do autor.

Nas Figuras 4.122 e 4.123 mostram que as curvas estão defasadas entre si, sendo o caso com espaçador circular o que apresentou maiores valores de fator de concentração de polarização, seguido pelo promotor triangular, em que utilizando a métrica da média do fator Γ , foi analisado que houve uma redução de 7,77% para o caso quadrado e 7,58% para o triangular em relação ao caso circular. Além disso, as curvas do fluxo permeado se comporta

de forma inversa a curvas da Figura 4.122, ou seja, espaçador circular apresentou menores valores de fluxo permeado, com valor médio de 7.0204×10^{-06} (m³/s)/m² e com diferença de $0,0045 \times 10^{-06}$ (m³/s)/m² para o triangular e $0,0046 \times 10^{-06}$ (m³/s)/m² para o promotor quadrático. Um outro fato interessante é que fica nítido, ao comparar com as outras curvas, alternância nas alturas dos picos da curva do caso com promotor triangular, causada pelo efeito da disposição distinta entre os espaçadores triangulares com defasagem de 180 graus entre si, conforme foi visto na seção 4.2.4.

4.3 Geometria Tridimensional

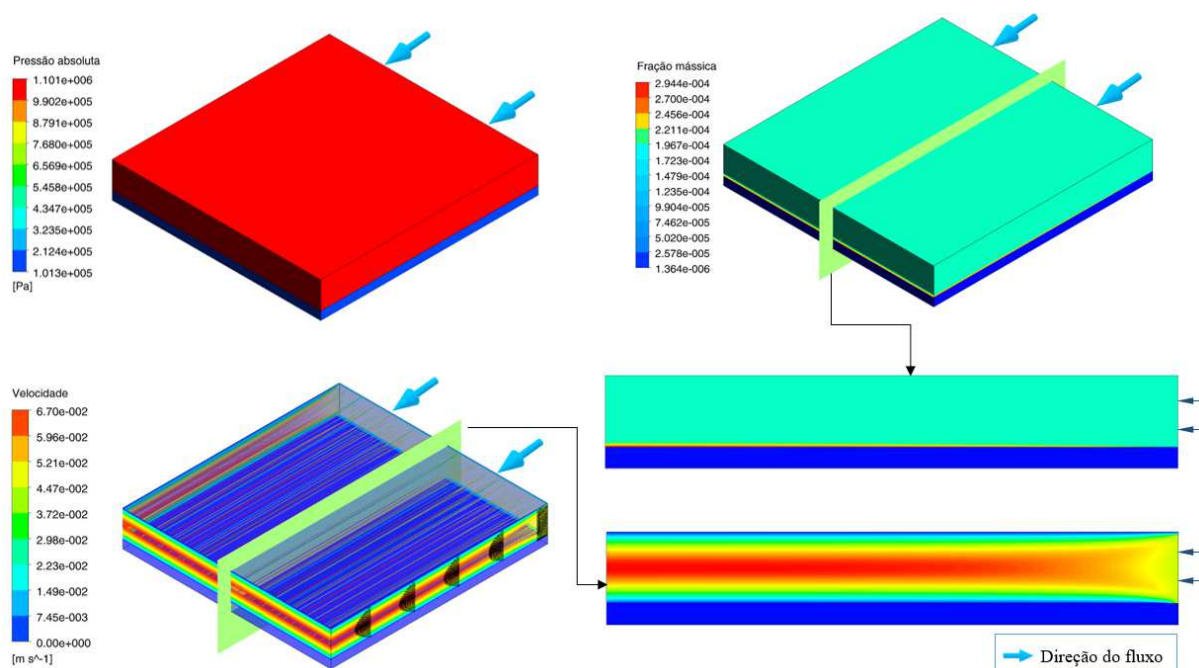
Nesta seção, estudos numéricos foram realizados utilizando geometrias tridimensionais para análise do processo de dessalinização através da separação por membranas. As simulações seguiram os preceitos descritos no capítulo referente a metodologia, em que, basicamente, constitui-se a utilização de três geometrias diferentes (sem espaçador, com espaçador em formato plano e com espaçador em formato com efeito espiral) sob condição de contorno na seção de entrada configurado com perfil constante para fração mássica de 0,0002 kg/kg e para velocidade com número de Reynolds igual a 100. Além disso, na seção de saída do canal de alimentação foi empregado uma pressão de operação variando entre 1 e 2 MPa para as simulações utilizadas nesta seção.

4.3.1 Geometria tridimensional sem espaçador

Com intuito de analisar e verificar o comportamento do modelo matemático para geometrias tridimensionais, foi feito um estudo com o caso que possuem uma geometria no formato plano e sem espaçador.

Na Figura 4.124 estão representados os campos de velocidade, a distribuição da fração mássica do soluto e o gradiente da pressão absoluta nos canais de alimentação e do permeado no domínio tridimensional adotado e com pressão na saída do canal de alimentação equivalente a 1 MPa. Para uma melhor análise, foi construído um plano médio ao longo do domínio e na direção do fluxo para monitorar o comportamento do escoamento e da fração mássica do soluto no domínio.

Figura 4.124 – Campo de pressão absoluta, velocidade e fração mássica para domínio tridimensional sem espaçador a $Re\ 100$ e pressão 1 MPa

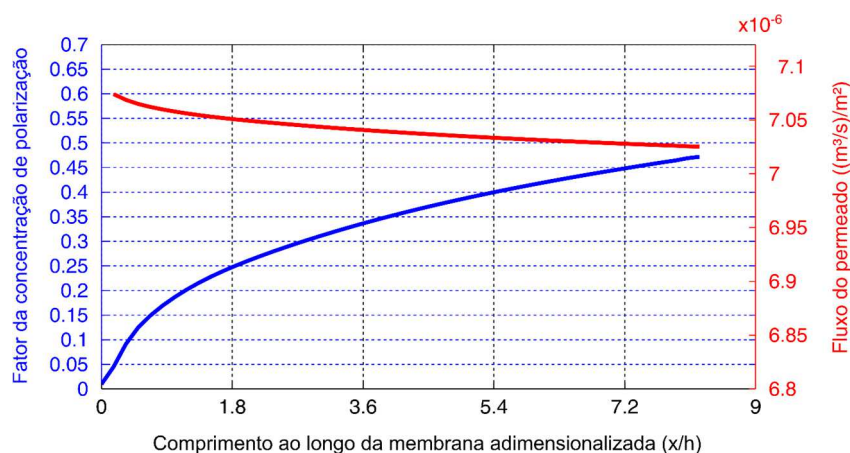


Fonte: Própria do autor.

Os resultados expostos na Figura 4.124 apresentaram comportamentos típicos do processo de dessalinização por membrana referente aos parâmetros analisados (pressão, velocidade do escoamento e fração mássica do soluto), em que há a presença da variação de pressão entre os canais, formação do perfil parabólico da velocidade ao longo do canal de alimentação e fenômeno de acúmulo de soluto na superfície da membrana. Tais características do processo também foram vistas nos casos com domínio bidimensional na seção 4.1, em que se assemelha aos campos de velocidade e distribuição de fração mássica do soluto plotados no plano médio do domínio tridimensional. Além disso, esses comportamentos também foram observados por autores que utilizaram domínios tridimensionais, como Li, Bui e Chao (2016) e Li et al. (2012). Outro ponto a destacar é a correta aplicação das condições de contornos no domínio, referente ao emprego de simetrias, *pressure outlet*, paredes e *inlet*, haja visto que os resultados da Figura 4.124 proporcionaram uma boa consistência qualitativa com fenômenos tipicamente encontrados no processo de separação por membranas, como foi exposto anteriormente.

A Figura 4.125 apresenta as curvas de evolução da fração mássica do soluto e do fluxo permeado ao longo da interseção entre a membrana e o plano médio para o caso com domínio tridimensional utilizado nos resultados da Figura 4.124.

Figura 4.125 – Curvas da evolução do fator Γ e do fluxo permeado dos casos 3D na condição de entrada Re 100 e pressão na seção do concentrado de 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

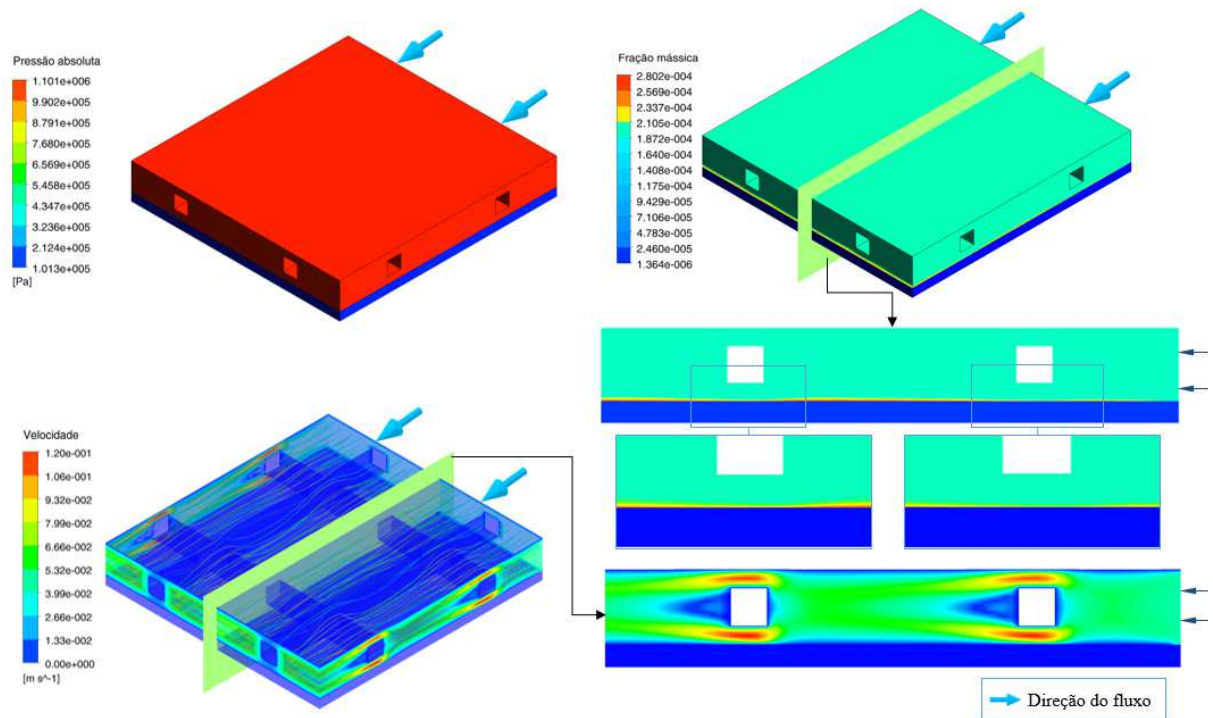
Os resultados exibidos na Figura 4.125 apresentaram comportamentos semelhantes aos obtidos nos casos bidimensionais, com a presença de um rápido aumento do fator de concentração polarizada (fator Γ) no início do canal e um decaimento da taxa de aumento dessa variável no decorrer do comprimento do canal. Na curva do fluxo permeado, apresentou-se um comportamento inverso ao fator Γ , que está relacionado à resistência causada pelo soluto acumulado na superfície da membrana, como, visto no caso 2D e exibido na Figura 4.15.

4.3.2 Geometria tridimensional com espaçador

Para estudos com domínio tridimensional contendo espaçador, optou-se por utilizar promotores quadráticos dispostos com arranjo em submerso, devido ao menor tempo de simulação computacional observado nos casos bidimensionais. Além disso, essa geometria foi o que menos precisou de alterações nas UDFs em relação aos que foram utilizados nos casos 2D. Assim, dois casos foram simulados com esses espaçadores, sendo um caso com geometria plana para os canais (geometria plana) e um outro com a geometria curvada configurada como um trecho da espiral de Arquimedes (geometria espiral), buscando aproximar da geometria do módulo em espiral encontrada no âmbito industrial, conforme dito na metodologia, seção 3.4.2.

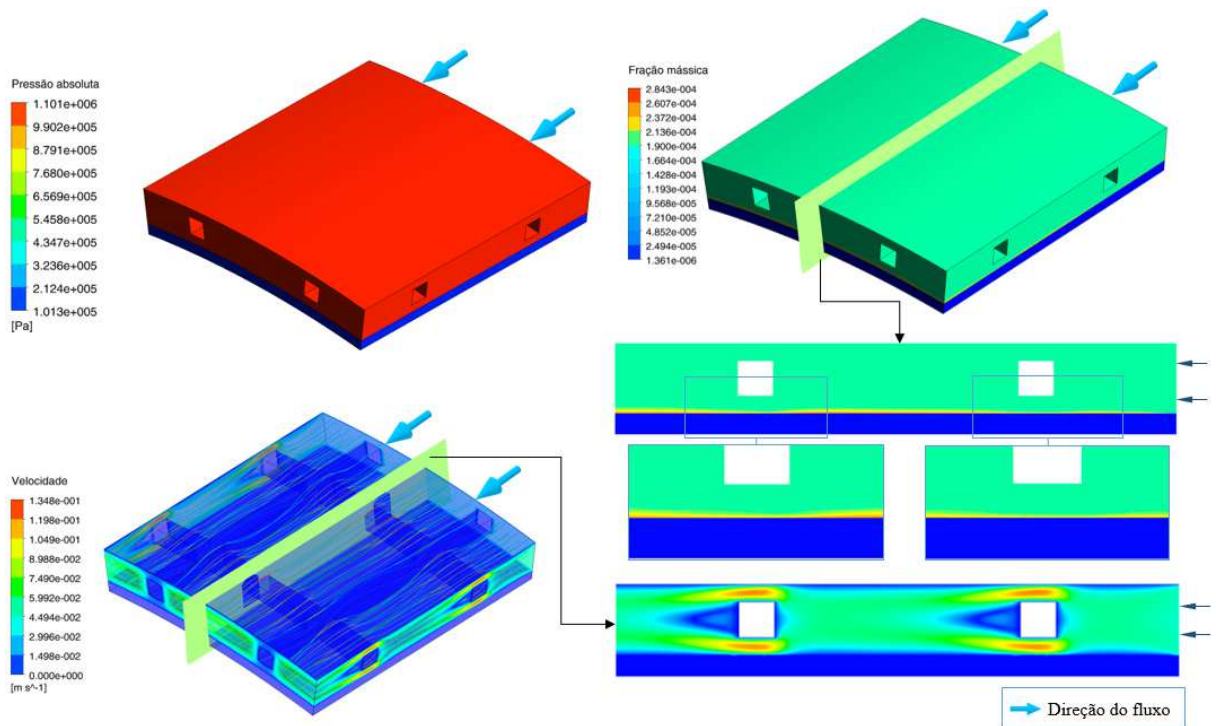
Assim, as Figuras 4.126 e 4.127 exibem os campos de velocidade, da fração mássica do soluto e da pressão absoluta para os casos com geometria plana e espiral, respectivamente, sob pressão aplicada no concentrado de 1 MPa. Também, foram exibidos o perfil de velocidade do escoamento e da fração mássica do soluto do plano médio localizado no meio do domínio utilizado e na direção do fluxo, conforme são ilustrados nas Figuras 4.126 e 4.127.

Figura 4.126 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.127 – Curvas do fluxo permeado dos casos com condição Re 200 e 1 MPa

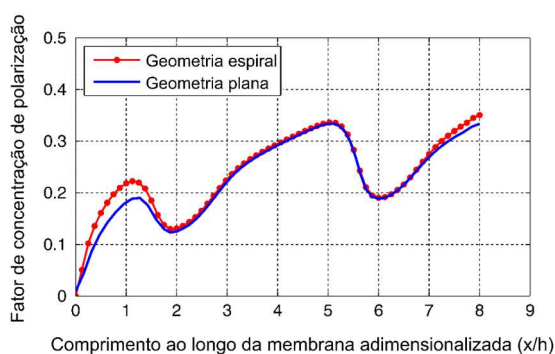


Fonte: Própria do autor.

Os resultados das Figuras 4.126 e 4.127 proporcionaram comportamentos similares entre si, com surgimento, em ambos os casos, de esteiras após os espaçadores e regiões de alta velocidade em cima e embaixo dos promotores nos campos de velocidade. Além disso é notado a formação da camada polarizada nas vizinhanças do plano que possui as condições de contorno da membrana semipermeável, característica típica do processo de separação por membrana. Quando comparados os resultados obtidos entre os dois domínios, percebe-se que há pequenas alterações nas regiões de baixas velocidades, em que é visto um pequeno aumento dessa região para o caso com geometria espiral. Isso é mais notório, quando se analisa a camada de concentração por polarização, onde é observado, na Figura 4.127, um acúmulo maior de soluto para este caso com geometria espiral do que é visto na Figura 4.126.

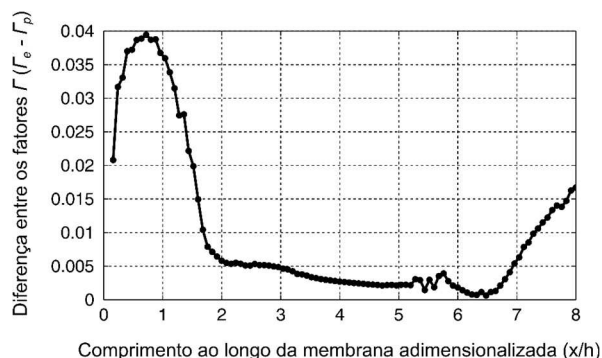
A Figura 4.128 exibe essa diferença, pois apresentam as curvas de evolução do fator de concentração de polarização ao longo da interseção entre o plano médio e a superfície que representa a membrana para os dois casos analisados (geometria plana e espiral). Além disso, para dar um maior destaque na variação entre as curvas, foi plotado a diferença do fator Γ entre os dois casos estudados, conforme pode ser visto na Figura 4.129.

Figura 4.128 – Curvas do fator Γ para as duas geometrias 3D estudados sob 1 MPa



Fonte: Própria do autor.

Figura 4.129 – Curva da diferença do fator Γ para as duas geometrias 3D sob 1 MPa



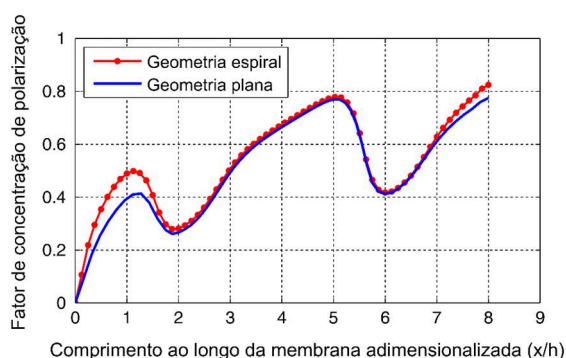
Fonte: Própria do autor.

As curvas da Figura 4.128 apresentam deslocamentos relativos entre eles maiores nas regiões de início e final do canal de alimentação, todavia ambos as curvas é conduzido a ter uma tendência de comportamento similar ao longo do canal, apresentando dois vales característicos a presença dos filamentos transversais a direção do escoamento, pois origina regiões maiores velocidades entre o filamento e a membrana, o que permite ter uma maior energia nas proximidades da superfície da membrana capaz de remover o soluto acumulado e conseqüentemente há uma redução do fator Γ . A diferença entre as curvas (Figura 4.129) pode-se atribuir a variação da distância relativa entre a superfície do espaçador e a membrana quando

se compara entre a geometria plana e a de espiral, o que altera a transferência de massa. Além disso, essa variação entre as curvas também pode-se atribuir a uma maior dificuldade de adaptação do modelo matemático na implementação das UDFs perante a alteração do tipo de coordenadas utilizadas e da forma de captação dos parâmetros diante do formato geométrico utilizado.

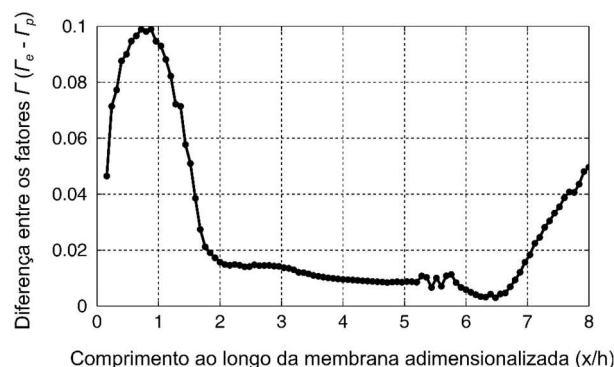
Também foram plotadas as curvas de evolução do fator de concentração por polarização ao longo da interseção do plano médio com a membrana para as duas geometrias analisadas (plana e espiral), no entanto para os casos sob a condição de pressão aplicada de 2 MPa na seção da saída do canal de alimentação. Essas curvas estão ilustradas na Figura 4.130 e a curva da diferença entre as curvas do fator Γ para os dois casos é exibida na Figura 4.131.

Figura 4.130 – Curvas do fator Γ para as duas geometrias 3D estudadas sob 2 MPa



Fonte: Própria do autor.

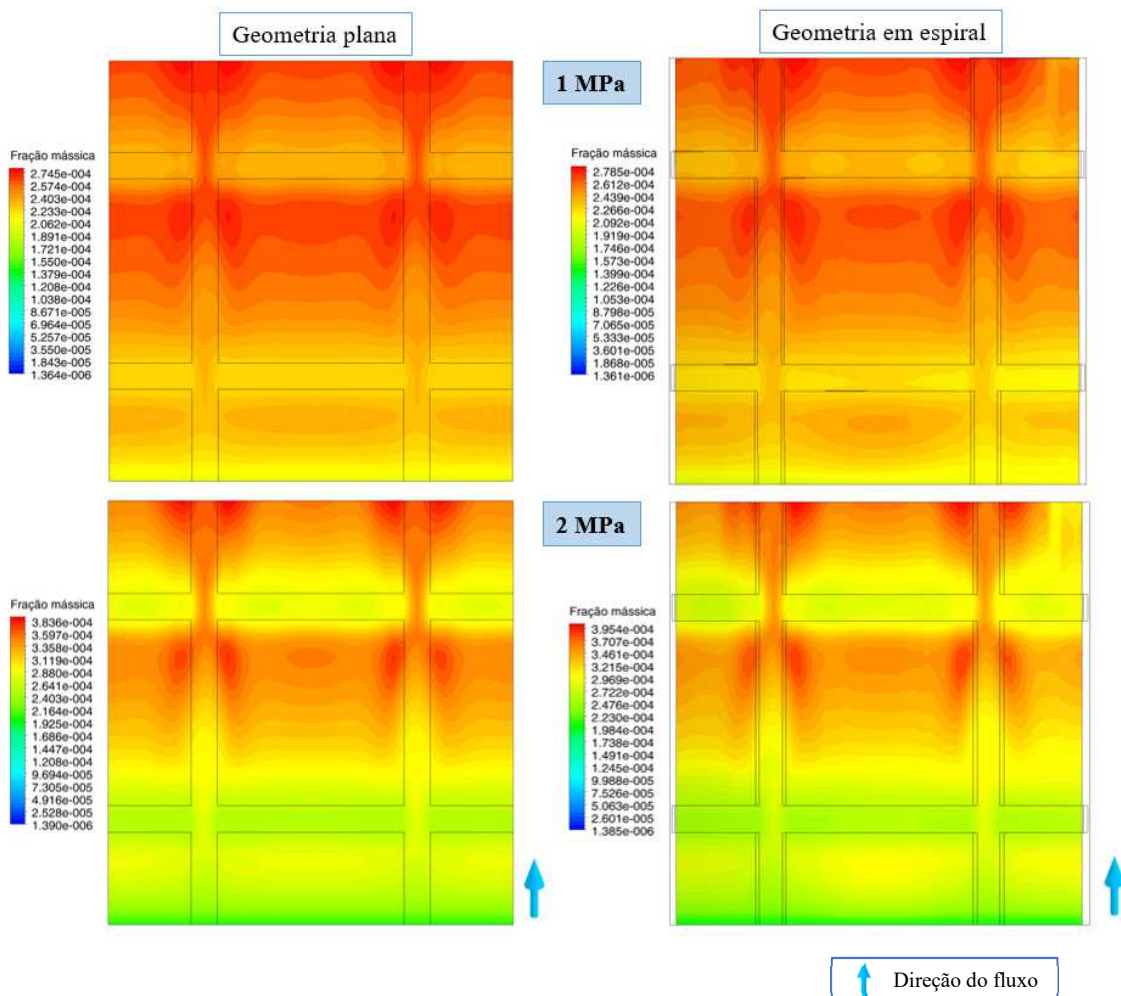
Figura 4.131 – Curva da diferença do fator Γ para as duas geometrias 3D sob 2 MPa



Fonte: Própria do autor.

É visto que, apesar do aumento da pressão aplicada, o comportamento das curvas se mantém similar as curvas apresentadas na Figura 4.128, entretanto com valores maiores. Ao comparar a diferença entre as curvas, percebe-se que as maiores variações acontecem nas mesmas regiões vistas para os dois casos com pressão aplicada de 1 MPa. Utilizando a métrica da média das curvas referente a diferença dos fatores Γ , observa-se que a maior média é vista para os casos com pressão na seção do concentrado de 2 MPa (0,0271), enquanto os casos com 1 MPa tiveram uma média de 0,01, o que representa um aumento de 171% a mais da diferença com relação aos casos com 1 MPa.

A distribuição de fração mássica do soluto na superfície da membrana para os casos com a geometria plana e espiral e sob as condições de pressão aplicada de 1 e 2 MPa na seção de saída do canal de alimentação são ilustradas na Figura 4.132.

Figura 4.132 – Distribuição da fração mássica na superfície da membrana para os casos estudados sob pressão no concentrado de 1 MPa e 2 MPa

Fonte: Própria do autor.

As distribuições da fração mássica do soluto nas superfícies das membranas mostram que há um gradiente de fração mássica do soluto e que os valores aumentam no decorrer do canal, como é visto nos quatros casos analisados. Outro ponto interessante está na capacidade em que cada filamento consegue afetar, de forma diferente, a camada de concentração de polarização, pois os filamentos transversais ao fluxo conseguem afetar de forma efetiva a hidrodinâmica do escoamento e, conseqüentemente, a distribuição da fração mássica do soluto na superfície da membrana, o que justifica a diminuição do soluto acumulado em todo o comprimento dos filamentos transversais, o que não se pode afirmar para os filamentos longitudinais, em que nessa situação, o comportamento do acumulo do soluto na membrana se aproxima de um canal sem espaçador.

A Figura 4.132 também mostra uma variação do comportamento entre os casos com geometria plana e em espiral, em que verifica-se regiões distorcidas entre si com maiores valores para o domínio com um trecho da espiral. No entanto, numa avaliação geral, há uma tendência de apresentar comportamentos similares quando comparados entre as geometrias, o que corrobora no que foi afirmado quando analisou as curvas das Figuras 4.128 e 4.130.

Capítulo 5

CONCLUSÕES E SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS

Neste capítulo, são destacadas as considerações finais obtidas nas simulações realizadas no decorrer da tese, assim como são mencionadas sugestões para trabalhos futuros que possam complementar esta tese.

5.1 Considerações finais

O modelo numérico proposto foi capaz de prever o comportamento hidrodinâmico dos canais do concentrado e permeado, além da camada de polarização por concentração, fenômenos tipicamente presentes no processo de dessalinização por membranas. Esse modelo foi desenvolvido por meio de uma modelagem numérica com auxílio do software ANSYS FLUENT 15.07 e das rotinas computacionais criadas pelo usuário (UDF) para as simulações propostas no trabalho. Com isso, foram possíveis obter as seguintes conclusões:

- Os resultados das simulações quando comparados com os valores reportados pela literatura, apresentaram discrepâncias inferiores a 7%. Ao analisar o comportamento da curva do fator de concentração de polarização obtida pelo modelo proposto percebeu-se que havia uma similaridade entre as curvas reportadas pela literatura, em que, ao utilizar o coeficiente de Pearson foi possível caracterizar como fortemente correlacionado;
- Os resultados obtidos pela geometria sem espaçador permitiram analisar a sensibilidade do modelo numérico quando se alteravam os parâmetros de operação, como pressão aplicada na saída do canal de alimentação e número de Reynolds da entrada, concluindo através de uma comparação qualitativa que os comportamentos obtidos tinham uma correlação com os resultados constatados na literatura;
- Quanto às simulações com espaçadores, os resultados mostraram o efeito benéfico dos promotores na remoção do soluto da camada de concentração de polarização, cuja essa capacidade é fortemente vinculada a geometria utilizada no espaçador e as condições de operações adotadas no canal de alimentação, uma vez que a geometria do espaçador consegue

alterar a hidrodinâmica do escoamento. Assim, são produzidas perturbações nos fluxos tangenciais das regiões adjacentes a superfície da membrana com energia suficiente para remover o soluto depositado ou deslocá-lo para regiões com menores magnitudes de velocidade do escoamento;

➤ Ao analisar os casos com promotores quadráticos, foi observado o surgimento de zonas de recirculação para os casos com número de Reynolds de 300, em que foi possível notar efeitos benéficos ao processo referente a remoção do soluto na superfície da membrana com o surgimento dessas zonas. Assim, ao comparar os casos com espaçador sem arredondamento para condições de entrada de Re 200 e Re 300, constatou-se que houve uma redução da média do fator Γ de 15,3% entre esses casos;

➤ Para os espaçadores triangulares, foi observado que os casos com espaçadores inclinados (SCI e RCI) tiveram padrões característicos com tendência de instabilidade de escoamento, sendo o caso SCI, o que apresentou uma maior intensidade nessas tendências. Além disso, foi possível analisar que os promotores triangulares têm uma capacidade de gerar mais turbulências e energias para remoção de soluto na superfície do que os promotores quadráticos nas mesmas condições de operação, no entanto, os espaçadores triangulares apresentaram os maiores valores de perdas de pressão por unidade de comprimento quando comparados aos outros casos;

➤ Ao analisar os espaçadores circulares, foi visto que os diâmetros têm influência direta na modificação da hidrodinâmica do canal nos dois tipos de arranjos estudados, em que tem consequência direta na distribuição da fração mássica do soluto ao longo da membrana. Para os casos com esses promotores dispostos no padrão submerso, apenas os espaçadores de maior diâmetro ($d = 1,2$ mm) sob condições de velocidade de entrada superiores a Re 300, conseguiram produzir regiões de recirculação nas zonas adjacentes a superfície da membrana. Ademais, quando se compara as simulações dos casos com espaçadores circulares na configuração zigue-zague e utilizando a métrica de média do fator Γ para condição Re 300 e 1 MPa, percebe-se que há pouca diferença ao modificar o diâmetro do espaçador, apresentando o menor valor dessa variável para a simulação correspondente ao promotor $d = 1,2$ mm ($\bar{\Gamma} = 0,2541$) e a maior média de fator Γ para o espaçador 0,8 mm ($\bar{\Gamma} = 0,2672$), sendo uma variação entre eles de 5,16% em relação ao menor valor;

➤ Ao comparar todos os casos estudados com a média métrica SPMP, foi possível verificar que os espaçadores quadráticos e triangulares tiveram a melhor performance quando estiveram dispostos na configuração em zigue-zague, possuindo como melhores valores correspondentes a 0,35 de SPMP médio para o caso quadrático do tipo SZN e 0,28 para uma geometria triangular

do tipo RZN. Todavia, quando se analisou os casos contendo espaçadores circulares, é visto que as melhores performances, pela métrica da média SPMP, foram obtidas com arranjo submerso, possuindo, inclusive, o espaçador com o maior valor SPMP entre os promotores estudados, no qual foi o espaçador circular com $d = 0,8$ mm submerso sob condição de Re 100 e 2 MPa, com aproximadamente 0,59 para o valor de SPMP;

➤ Devido a métrica SPMP ser bastante afetada pela variável de perda de pressão, foi sugerido alterações nesse parâmetro, em que resultou uma nova métrica, denotada $SPMP_{mod}$, cujo é dado pela razão do fluxo permeado com a perda de pressão em função de casos com e sem espaçadores. Esse parâmetro permitiu concluir que as melhores performances foram obtidas quando os promotores estão dispostos em zigue-zague e que o espaçador de maior valor de $SPMP_{mod}$ foi o promotor circular sob condição Re 100 na seção de entrada do canal de alimentação e a uma pressão aplicada de 1 MPa na saída do concentrado;

➤ Os valores obtidos pelos parâmetros SPMP e $SPMP_{mod}$ mostraram que o espaçador circular tem uma performance predominante perante os promotores quadráticos e triangulares, sendo maior valor SPMP para arranjo submerso e $SPMP_{mod}$ para zigue-zague. Contudo, ao analisar as variáveis de processo (fator F , fluxo permeado e perda de pressão), foi notado que o espaçador circular de maior valor de $SPMP_{mod}$ reuniu as melhores condições de processo do que o promotor circular caracterizado pela SPMP de melhor performance entre os casos simulados;

➤ O modelo numérico proposto foi capaz de prever o comportamento dos fenômenos presentes no processo de dessalinização por osmose reversa também para os casos com geometria tridimensional, em que se observou a hidrodinâmica dos canais e a formação da camada de polarização por concentração;

➤ Ao comparar entre os casos 3D de geometria de canais planos e os casos contendo um segmento de uma espiral, foi observado que houve variações na formação da camada polarizada ao longo do canal de alimentação, em que pode-se atribuir a variação da distância relativa da superfície do espaçador com a membrana e uma maior dificuldade de adaptação do modelo matemático na implementação das UDFs, devido à alteração do tipo de coordenadas e da forma de captação dos parâmetros para essa geometria com fragmento de uma espiral. No entanto, se faz necessário uma maior otimização do modelo numérico para esse tipo geometria em espiral e realização de outros estudos que possa analisar melhor os fenômenos que causaram tal variação e como isso se comporta quando se altera os parâmetros operacionais do processo e as geometrias dos espaçadores.

De modo geral, conclui-se que o modelo numérico desenvolvido neste trabalho propicia uma boa estimativa para predizer os fenômenos existentes no processo, podendo buscar entender os mecanismos de transporte do soluto e a forma como que o escoamento do canal pode intervir no desempenho da membrana. Além disso, foi visto que, com alterações geométricas dos espaçadores e dos canais, foi possível buscar uma otimização no processo, estendendo a vida útil da membrana com a redução da camada polarizada e aumentando o fluxo do produto final que é a água potável.

5.2 Trabalhos futuros

Para trabalhos futuros, pode-se destacar, como sugestão, a realização de estudos para redução da polarização de concentração por meio do efeito vibratório. Propõe-se que isso seja simulado utilizando a técnica de malha móvel, movimentando os espaçadores, assim como as paredes e a membrana. Ademais, recomenda-se o estudo dos efeitos da aplicação de fluxo pulsante em canais com domínio semelhante à deste trabalho, visando na minimização da incrustação na superfície da membrana e nas proximidades dos espaçadores.

Outros ramos de estudos têm relação à modelagem dos tipos de incrustações presentes no processo e seus efeitos na produção e na qualidade do fluxo do permeado. Pode-se estender tais questões à análise dos efeitos hidrodinâmicos de uma das técnicas de redução em que partículas são adicionados junto ao fluxo de alimentação para auxílio da redução dessas incrustações de forma a avaliar a performance da técnica.

Outro ponto que pode ser uma ramificação de estudo é simular a membrana com estrutura em compósito (TFC) conforme o que é encontrado no âmbito industrial.

Uma possível sugestão seria estudar diversos arranjos de promotores possíveis junto com várias geometrias (hexágonos, pentágonos, formato em X, em Y, losangos, trapézios, etc.) a fim de buscar uma gama de opções e a partir de uma otimização topológica conseguir detectar a geometria com melhor desempenho para determinadas aplicações e processos.

Por fim, sugere-se, como trabalhos futuros, a busca pela uma maior otimização do modelo numérico referente ao emprego na geometria tridimensional em espiral. Haja visto que para esses casos, o presente trabalho realizou um estudo básico e não conseguiu aprofundar na modelagem e nos fenômenos presentes nesse tipo de geometria, devido ao custo computacional, tempo extenso de simulação e curto prazo para término do doutorado. Além disso, recomenda-

se a realização de outras pesquisas que possam comparar as duas geometrias tridimensionais utilizadas (plana e com segmento espiral) e, assim, analisar melhor os fenômenos que causaram variações na camada polarizada nessas duas geometrias, além de avaliar o comportamento dessa variação quando se alteram os parâmetros operacionais do processo e as geometrias dos espaçadores.

REFERÊNCIAS

AAS, Gallab; MEA, Ali; HA, Shawky; MSA, Abdel-Mottaleb. Effect of Different Salts on Mass Transfer Coefficient and Inorganic Fouling of TFC Membranes. **Journal of Membrane Science & Technology**, [s. l.], v. 07, n. 02, 2017. Disponível em: <<https://www.omicsonline.org/open-access/effect-of-different-salts-on-mass-transfer-coefficient-and-inorganicfouling-of-tfc-membranes-2155-9589-1000175.php?aid=92457>>

AHMAD, A. L. L.; LAU, K. K.; BAKAR, M. Z. Z. Ab.; SHUKOR, S. R. Abd. Modified Boundary Condition for Membrane Wall Concentration Prediction in Narrow Membrane Channel. **Journal of Applied Membrane Science & Technology**, [s. l.], v. 1, n. 1, 2005. a.

AHMAD, A. L. L.; LAU, K. K.; BAKAR, M. Z. Z. Ab.; SHUKOR, S. R. Abd. Integrated CFD simulation of concentration polarization in narrow membrane channel. **Computers e Chemical Engineering**, [s. l.], v. 29, n. 10, p. 2087–2095, 2005. b. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0098135405001511>>

AHMAD, A. L.; LAU, K. K. Modeling, Simulation, and Experimental Validation for Aqueous Solutions Flowing in Nanofiltration Membrane Channel. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 46, p. 1316–1325, 2007.

AHMAD, A. L.; LAU, K. K.; ABU BAKAR, M. Z. Impact of different spacer filament geometries on concentration polarization control in narrow membrane channel. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 262, n. 1–2, p. 138–152, 2005. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0376738805005260>>

ALEXIADIS, A.; WILEY, D. E.; VISHNOI, A.; LEE, R. H. K.; FLETCHER, D. F.; BAO, J. CFD modelling of reverse osmosis membrane flow and validation with experimental results. **Desalination**, [s. l.], v. 217, n. 1–3, p. 242–250, 2007. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0011916407004870>>

ALMAR WATER SOLUTIONS. Desalination Technologies and Economics: CAPEX, OPEX and Technological Game Changers. **Center for Mediterranean Integration: Mediterranean Regional Technical Meeting**, [s. l.], 2016. Disponível em: <[http://www.cmimarseille.org/sites/default/files/newsite/library/files/en/1.6_Cosin_Desalination technologies and economics_ capex%2C opex and technological game changers to come -ilovepdf-compressed.pdf](http://www.cmimarseille.org/sites/default/files/newsite/library/files/en/1.6_Cosin_Desalination%20technologies%20and%20economics_capex%20opex%20and%20technological%20game%20changers%20to%20come-ilovepdf-compressed.pdf)>

AMOKRANE, M.; SADAoui, D.; KOUTSOu, C. P.; KARABELAS, A. J.;

DUDECK, M. A study of flow field and concentration polarization evolution in membrane channels with two-dimensional spacers during water desalination. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 477, p. 139–150, 2015. Disponível em: <<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0376738814008655>>

AMOKRANE, M.; SADAOU, D.; DUDECK, M. Effect of inter-filament distance on the improvement of Reverse Osmosis desalination process. [s. l.], 2015.

AMOKRANE, Mounir; SADAOU, Djamel; DUDECK, Michel; KOUTSOU, Chrysafenia P. New spacer designs for the performance improvement of the zigzag spacer configuration in spiral-wound membrane modules. **Desalination and Water Treatment**, [s. l.], v. 57, n. 12, p. 5266–5274, 2016.

ANDERSON, John L.; MALONE, Dermot M. Mechanism of Osmotic Flow in Porous Membranes. **Biophysical Journal**, [s. l.], v. 14, n. 12, p. 957–982, 1974.

ANQI, Ali E.; ALKHAMIS, Nawaf; OZTEKIN, Alparslan. Numerical simulation of brackish water desalination by a reverse osmosis membrane. **Desalination**, [s. l.], v. 369, p. 156–164, 2015.

ARAÚJO, Ronaldo Ferreira; CARAN, Gustavo Miranda; SOUZA, Iara Vidal Pereira De. Orientação temática e coeficiente de correlação para análise comparativa entre altmetrics e citações. **Em Questão**, [s. l.], v. 22, n. 3, p. 184, 2016.

ARMOA, M. H.; JUNIOR, M. J. Princípios e aplicações de processos de separação por membranas inorgânicas. **Ciência & Tecnologia: FATEC-JB**, [s. l.], v. 2, n. 1, p. 80–97, 2011.

BAHAR, Rubina; HAWLADER, Mohammad Nurul Alam. Desalination: Conversion of seawater to freshwater. **2nd International Conference on Mechanical, Automotive and Aerospace Engineering (ICMAAE 2013)**, [s. l.], n. July, p. 2–4, 2013.

BAKER, J. S.; DUDLEY, L. Y. Biofouling in membrane systems — A review. **Desalination**, [s. l.], v. 118, n. 1–3, p. 81–89, 1998.

BAKER, Richard W. **Membrane Technology and Applications**. 2. ed. Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd, 2004. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0376738800831397>>

BELFORT, G.; NAGATA, N. Fluid mechanics and cross-flow filtration: some thoughts. **Desalination**, [s. l.], v. 53, n. 1–3, p. 57–79, 1985.

BERNALES, Braulio; QUINTARD, Michel; RODE, Sabine; GUICHARDON, Pierrette; MARTINAND, Denis; HALDENWANG, Pierre. Aix-Marseille Université Modélisation de l'hydrodynamique et des transferts dans les procédés de filtration membranaire. [s. l.], 2013.

BOUDMAR, Mourad Ben. **Performance prediction and optimisation of spiral wound modules**. 1991. UNIVERSITY OF GLASGOW, [s. l.], 1991. Disponível em: <<http://theses.gla.ac.uk/id/eprint/3235>>

BOUSSOUGA, Y. A.; LHASSANI, A. Study of mass transfer mechanisms for reverse osmosis and nanofiltration membranes intended for desalination. **Journal of Materials and Environmental Science**, [s. l.], v. 8, n. 3, p. 1128–1138, 2017.

BOWEN, W. R.; MOHAMMAD, A. W. Characterization and prediction of nanofiltration membrane performance-A general assessment. **Chemical Engineering Research and Design**, [s. l.], v. 76, n. 8 A8, p. 885–893, 1998.

BURGHOFF, H. -G; LEE, K. L.; PUSCH, W. Characterization of transport across cellulose acetate membranes in the presence of strong solute–membrane interactions. **Journal of Applied Polymer Science**, [s. l.], v. 25, n. 3, p. 323–347, 1980.

CAO, Z.; WILEY, D. E.; FANE, A. G. CFD simulations of net-type turbulence promoters in a narrow channel. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 185, n. 2, p. 157–176, 2001.

CAVACO MORÃO, A. I.; SZYMCZYK, A.; FIEVET, P.; BRITES ALVES, A. M. Modelling the separation by nanofiltration of a multi-ionic solution relevant to an industrial process. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 322, n. 2, p. 320–330, 2008.

CAY-DURGUN, Pinar; LIND, Mary Laura. Nanoporous materials in polymeric membranes for desalination. **Current Opinion in Chemical Engineering**, [s. l.], v. 20, p. 19–27, 2018. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.coche.2018.01.001>>

CHEN, Jim C.; LI, Qilin; ELIMELECH, Menachem. In situ monitoring techniques for concentration polarization and fouling phenomena in membrane filtration. **Advances in Colloid and Interface Science**, [s. l.], v. 107, n. 2–3, p. 83–108, 2004.

COSTA, Ana Carolina Miranda. **Desenvolvimento de membranas de osmose inversa resistentes à deposição de matéria orgânica e bioincrustações**. 2009. Universidade Federal do Rio de Janeiro, [s. l.], 2009.

CSÉFALVAY, Edit; PAUER, Viktor; MIZSEY, Peter. Recovery of copper from process waters by nanofiltration and reverse osmosis. **Desalination**, [s. l.], v. 240, n. 1–3, p. 132–142, 2009.

CUNHA, Acto De Lima; RODRIGUES, Severino; NETO, De Farias; GILSON, Antonio; LIMA, Barbosa De; SANTOS, Enivaldo; SOUZA, Josedite Saraiva De. Estudo numérico do processo de separação via membranas porosas. **XI Congresso Iberoamericano de Ingeniería Mecánica**, [s. l.], 2013.

DACH, Hanane. Comparison of nanofiltration and reverse osmosis processes for a selective desalination of brackish water feeds To cite this version : HAL Id : tel-00433513 ET D ' OSMOSE INVERSE POUR LE DESSALEMENT. [s. l.], 2009.

DAVIS, Robert H. Separation & purification reviews modeling of fouling of crossflow microfiltration membranes. [s. l.], n. December 2012, p. 37–41, 2006.

DE MORAIS COUTINHO, Cesar; CHIU, Ming Chih; BASSO, Rodrigo Correa; RIBEIRO, Ana Paula Badan; GONÇALVES, Lireny Aparecida Guaraldo; VIOTTO, Luiz Antonio. State of art of the application of membrane technology to vegetable oils: A review. **Food Research International**, [s. l.], v. 42, n. 5–6, p. 536–550, 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.foodres.2009.02.010>>

DE PINHO, Maria Norberta; SEMIÃO, Viriato; GERALDES, Vítor. Integrated modeling of transport processes in fluid/nanofiltration membrane systems. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 206, n. 1–2, p. 189–200, 2002.

DEEN, W. M. Hindered transport of large molecules in liquid-filled pores. **AIChE Journal**, [s. l.], v. 33, n. 9, p. 1409–1425, 1987.

DENDUKURI, Dhananjay; KARODE, Sandeep K.; KUMAR, Ashwani. Flow visualization through spacer filled channels by computational fluid dynamics-II: Improved feed spacer designs. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 249, n. 1–2, p. 41–49, 2005.

DIJKSTRA, M. F. J.; BACH, S.; EBERT, K. A transport model for organophilic nanofiltration. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 286, n. 1–2, p. 60–68, 2006.

DOMINGUEZ-TAGLE, Carlos; ROMERO-TERNERO, Vicente J.; DELGADO-TORRES, Agustin M. Boron removal efficiency in small seawater Reverse Osmosis systems. **Desalination**, [s. l.], v. 265, n. 1–3, p. 43–48, 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2010.07.028>>

EL-DESSOUKY, Hisham T.; ETTOUNEY, Hisham M. **Multi-Stage Flash Desalination**. [s.l.] : Elsevier, 2002.

FARRELL, Kevin J. **Reduced membrane fouling potential by tailored fluid-structure**, 2008.

FIERRO, Daniel; BOSCHETTI-DE-FIERRO, Adriana; ABETZ, Volker. The solution-diffusion with imperfections model as a method to understand organic solvent nanofiltration of multicomponent systems. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 413–414, p. 91–101, 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.memsci.2012.04.027>>

FIMBRES-WEIHS, G. A.; WILEY, D. E. Review of 3D CFD modeling of flow and mass transfer in narrow spacer-filled channels in membrane modules. **Chemical Engineering**

and Processing: Process Intensification, [s. l.], v. 49, n. 7, p. 759–781, 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2010.01.007>>

FIMBRES-WEIHS, G. A.; WILEY, D. E.; FLETCHER, D. F. Unsteady flows with mass transfer in narrow zigzag spacer-filled channels: A numerical study. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 45, p. 6594–6603, 2006.

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

FOO, K.; LIANG, Y. Y.; WEIHS, G. A. Fimbre. CFD study of the effect of SWM feed spacer geometry on mass transfer enhancement driven by forced transient slip velocity. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 597, p. 117643, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.memsci.2019.117643>>

FRANÇA NETA, Luzia Sergina De. **Análise de técnicas de caracterização da transferência de massa em módulos de microfiltração**. 2009. Universidade Federal do Rio De Janeiro, [s. l.], 2009.

FRITZMANN, C.; LÖWENBERG, J.; WINTGENS, T.; MELIN, T. State-of-the-art of reverse osmosis desalination. **Desalination**, [s. l.], v. 216, n. 1–3, p. 1–76, 2007.

GAO, Yiben; HAAVISTO, Sanna; TANG, Chuyang Y.; SALMELA, Juha; LI, Weiyi. Characterization of fluid dynamics in spacer-filled channels for membrane filtration using Doppler optical coherence tomography. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 448, p. 198–208, 2013.

GERALDES, Vítor; SEMIÃO, Viriato; DE PINHO, Maria Norberta. Flow and mass transfer modelling of nanofiltration. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 191, n. 1–2, p. 109–128, 2001.

GERALDES, Vítor; SEMIÃO, Viriato; DE PINHO, Maria Norberta. Flow management in nanofiltration spiral wound modules with ladder-type spacers. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 203, n. 1–2, p. 87–102, 2002.

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

GIDDINGS, J. Calvin; KUCERA, Eugene; RUSSELL, Christopher P.; MYERS, Marcus N. Statistical theory for the equilibrium distribution of rigid molecules in inert porous networks. Exclusion chromatography. **Journal of Physical Chemistry**, [s. l.], v. 72, n. 13, p. 4397–4408, 1968.

GOMES, Rodrigo Klim; A. **A dessalinização térmica como alternativa para abastecimento de água**. 2011. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, [s. l.], 2011.

GREGOR, Harry P.; GREGOR, Charles D. Synthetic-Membrane Technology applied to such industrial tasks as waste treatment and desalination. [s. l.], 1978.

GU, Boram; ADJIMAN, Claire S.; XU, Xiao Yun. The effect of feed spacer geometry on membrane performance and concentration polarisation based on 3D CFD simulations. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 527, p. 78–91, 2017. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.memsci.2016.12.058>>

GUELL, David Charles. **The Physical Mechanism of Osmosis and Osmotic Pressure; A Hydrodynamic Theory for Calculating the Osmotic Reflection Coefficient**. 1991. Massachusetts Institute of Technology, [s. l.], 1991. Disponível em: <<http://doi.wiley.com/10.1002/aic.690460705%0Ahttp://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/j100859a008>>

H Aidari, A. H.; HEIJMAN, S. G. J.; VAN DER MEER, W. G. J. Optimal design of spacers in reverse osmosis. **Separation and Purification Technology**, [s. l.], v. 192, n. July 2017, p. 441–456, 2018. a. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.seppur.2017.10.042>>

H Aidari, A. H.; HEIJMAN, S. G. J.; VAN DER MEER, W. G. J. Effect of spacer configuration on hydraulic conditions using PIV. **Separation and Purification Technology**, [s. l.], v. 199, p. 9–19, 2018. b. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.seppur.2018.01.022>>

HIDALGO, A. M.; LEÓN, G.; GÓMEZ, M.; MURCIA, M. D.; GÓMEZ, E.; GÓMEZ, J. L. Application of the Spiegler-Kedem-Kachalsky model to the removal of 4-chlorophenol by different nanofiltration membranes. **Desalination**, [s. l.], v. 315, p. 70–75, 2013. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2012.10.008>>

ISMAIL, Fauzi; KHULBE, Kailash Chandra; MATSUURA, Takeshi. **Reverse Osmosis**. Cambridge: Elsevier, 2018. v. 1 Disponível em: <<https://www.elsevier.com/books/reverse-osmosis/ismail/978-0-12-811468-1>>

JAIN, Semant; GUPTA, Sharad K. Analysis of modified surface force pore flow model with concentration polarization and comparison with Spiegler-Kedem model in reverse osmosis systems. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 232, n. 1–2, p. 45–62, 2004.

JEONG, Kwanho; PARK, Minkyu; OH, Seungjae; KIM, Joon Ha. Impacts of flow channel geometry, hydrodynamic and membrane properties on osmotic backwash of RO membranes—CFD modeling and simulation. **Desalination**, [s. l.], v. 476, n. July 2019, p. 114229, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.desal.2019.114229>>

JOHNSON, Jon; BUSCH, Markus. Engineering aspects of reverse osmosis module design. **Desalination and Water Treatment**, [s. l.], v. 15, n. 1–3, p. 236–248, 2010.

JONSSON, G.; MACEDONIO, F. Fundamentals in Reverse Osmosis. **Comprehensive Membrane Science and Engineering**, [s. l.], v. 2, p. 1–22, 2010.

KARIME, Mohamed; BOUGUECHA, S.; HAMROUNI, B. RO membrane autopsy of Zarzis brackish water desalination plant. **Desalination**, [s. l.], v. 220, n. 1–3, p. 258–266, 2008.

KARTHIK, Venkataraman; DASGUPTA, Sunando; DE, Sirshendu. Modeling and simulation of osmotic pressure controlled electro-ultrafiltration in a cross-flow system. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 199, n. 1, p. 29–40, 2002.

KAVIANIPOUR, Omid; INGRAM, Gordon D.; VUTHALURU, Hari B. Investigation into the effectiveness of feed spacer configurations for reverse osmosis membrane modules using Computational Fluid Dynamics. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 526, n. September 2016, p. 156–171, 2017. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.memsci.2016.12.034>>

KAVIANIPOUR, Omid; INGRAM, Gordon D.; VUTHALURU, Hari B. Studies into the mass transfer and energy consumption of commercial feed spacers for RO membrane modules using CFD: Effectiveness of performance measures. **Chemical Engineering Research and Design**, [s. l.], v. 141, p. 328–338, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.10.041>>

KEDEM, O. A Physical Interpretation of the Phenomenological Coefficients of Membrane Permeability. **The Journal of General Physiology**, [s. l.], v. 45, n. 1, p. 143–179, 1961. Disponível em: <<http://www.jgp.org/cgi/doi/10.1085/jgp.45.1.143>>

KEIR, Gregory Peter. Coupled modelling of hydrodynamics and mass transfer in membrane filtration by. **Separation and Purification Technology**, [s. l.], n. Hons I, 2012.

KIM, Suhan; HOEK, Eric M. V. Modeling concentration polarization in reverse osmosis processes. **Desalination**, [s. l.], v. 186, n. 1–3, p. 111–128, 2005.

KOŠUTIĆ, K.; DOLAR, D.; KUNST, B. On experimental parameters characterizing the reverse osmosis and nanofiltration membranes' active layer. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 282, n. 1–2, p. 109–114, 2006.

KOUTSOU, C. P.; YIANTSIOS, S. G.; KARABELAS, A. J. Numerical simulation of the flow in a plane-channel containing a periodic array of cylindrical turbulence promoters. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 231, n. 1–2, p. 81–90, 2004.

KOUTSOU, C. P.; YIANTSIOS, S. G.; KARABELAS, A. J. A numerical and experimental study of mass transfer in spacer-filled channels: Effects of spacer geometrical

characteristics and Schmidt number. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 326, n. 1, p. 234–251, 2009.

KOUTSOU, Chrysafenia; KARABELAS, Anastasios; KOSTOGLOU, Margaritis. Fluid Dynamics and Mass Transfer in Spacer-Filled Membrane Channels: Effect of Uniform Channel-Gap Reduction Due to Fouling. **Fluids**, [s. l.], v. 3, n. 1, p. 12, 2018. Disponível em: <<http://www.mdpi.com/2311-5521/3/1/12>>

KUCERA, Jane. **Reverse Osmosis**. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2015. Disponível em: <<http://doi.wiley.com/10.1002/9781119145776>>

KURIHARA, M.; SASAKI, T. The pursuits of ultimate membrane technology including low pressure seawater reverse osmosis membrane developed by mega-ton water system project. **Journal of Membrane Science and Research**, [s. l.], v. 3, n. 3, p. 157–173, 2017. Disponível em: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85039846702&partnerID=40&md5=d5b73e0e65a49740d37d90de36e89368>>

LAU, K. K.; ABU BAKAR, M. Z.; AHMAD, A. L.; MURUGESAN, T. Feed spacer mesh angle: 3D modeling, simulation and optimization based on unsteady hydrodynamic in spiral wound membrane channel. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 343, n. 1–2, p. 16–33, 2009.

LEVITT, D. G. General continuum analysis of transport through pores. II. Nonuniform pores. **Biophysical Journal**, [s. l.], v. 15, n. 6, p. 553–563, 1975. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0006-3495\(75\)85837-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0006-3495(75)85837-1)>

LI, F.; MEINDERSMA, W.; DE HAAN, A. B.; REITH, T. Optimization of commercial net spacers in spiral wound membrane modules. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 208, n. 1–2, p. 289–302, 2002.

LI, F.; MEINDERSMA, W.; DE HAAN, A. B.; REITH, T. Novel spacers for mass transfer enhancement in membrane separations. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 253, n. 1–2, p. 1–12, 2005.

LI, Mingheng; BUI, Thanh; CHAO, Steven. Three-dimensional CFD analysis of hydrodynamics and concentration polarization in an industrial RO feed channel. **Desalination**, [s. l.], v. 397, p. 194–204, 2016. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2016.07.005>>

LI, Wende; SU, Xu; PALAZZOLO, Alan; AHMED, Shehab; THOMAS, Erwin. Reverse osmosis membrane, seawater desalination with vibration assisted reduced inorganic fouling. **Desalination**, [s. l.], v. 417, n. May, p. 102–114, 2017. Disponível em: <<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0011916416317994>>

LI, Wende; SU, Xu; PALAZZOLO, Alan; AHMED, Shehab. Numerical modeling of concentration polarization and inorganic fouling growth in the pressure-driven membrane filtration process. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 569, n. July 2017, p. 71–82, 2019.

LI, Yu Ling; TUNG, Kuo Lun; CHEN, Yu Shao; HWANG, Kuo Jen. CFD analysis of the initial stages of particle deposition in spiral-wound membrane modules. **Desalination**, [s. l.], v. 287, p. 200–208, 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2011.10.001>>

LI, Yu Ling; TUNG, Kuo Lun. The effect of curvature of a spacer-filled channel on fluid flow in spiral-wound membrane modules. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 319, n. 1–2, p. 286–297, 2008.

LIDE, David R. **CRC Handbook of Chemistry and Physics**. [s.l: s.n.].

LIRA, Raniere Henrique Pereira. **Avaliação dos efeitos fluidodinâmicos em módulos de membranas plana, curva e espiral via CFD**. 2020. Universidade Federal de Campina Grande, [s. l.], 2020. Disponível em: <<http://dspace.sti.ufcg.edu.br:8080/jspui/handle/riufcg/17074>>

LONSDALE, H. K.; MERTEN, U.; RILEY, R. L. Transport properties of cellulose acetate osmotic membranes. **Journal of Applied Polymer Science**, [s. l.], v. 9, n. 4, p. 1341–1362, 1965.

LU, Junfeng; LU, Wen Qiang. A numerical simulation for mass transfer through the porous membrane of parallel straight channels. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, [s. l.], v. 53, n. 11–12, p. 2404–2413, 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.01.043>>

MA, Shengwei; KASSINOS, Stavros; FATTA, Despo. Assessing the accuracy of wall concentration estimation based on averaged permeate velocity in spacer-filled Reverse Osmosis (RO) membrane systems. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 45, n. 24, p. 8134–8144, 2006.

MACEDONIO, F.; DRIOLI, E.; GUSEV, A. A.; BARDOW, A.; SEMIAT, R.; KURIHARA, M. Efficient technologies for worldwide clean water supply. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, [s. l.], v. 51, p. 2–17, 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2011.09.011>>

MAI, Zhaohuan. **Membrane processes for water and wastewater treatment : study and modeling of interactions between membrane and organic matter**. 2014. [s. l.], 2014.

MALAEB, Lilian; AYOUB, George M. Reverse osmosis technology for water treatment: State of the art review. **Desalination**, [s. l.], v. 267, n. 1, p. 1–8, 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2010.09.001>>

MEHDIZADEH, H.; DICKSON, J. M. Theoretical modification of the surface force-pore flow model for reverse osmosis transport. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 42, n. 1–2, p. 119–145, 1989.

MILLER, Sydney; SHEMER, Hilla; SEMIAT, Raphael. Energy and environmental issues in desalination. **Desalination**, [s. l.], v. 366, p. 2–8, 2015. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2014.11.034>>

MOREIRA, André. **Impactos físico-químicos da disposição de rejeito de dessalinizadores das águas de poços em solos do oeste potiguar**. 2016. Universidade Federal Rural do Semi-Árido, [s. l.], 2016.

MOURA, J. P.; MONTEIRO, G. S.; SILVA, J. N.; PINTO, F. A.; FRANÇA, K. P. Aplicações Do Processo De Osmose Reversa Para O Aproveitamento De Água Salobra Do Semi-Árido Nordeste. **Revista águas subterrâneas**, [s. l.], 2008.

MULDER, Marcel. **Basic Principles of Membrane Technology***Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 1996. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/978-94-009-1766-8>>

NIGHTINGALE, E. R. Phenomenological theory of ion solvation. Effective radii of hydrated ions. **Journal of Physical Chemistry**, [s. l.], v. 63, n. 9, p. 1381–1387, 1959.

OREN, Y. S.; BIESHEUVEL, P. M. Theory of Ion and Water Transport in Reverse-Osmosis Membranes. **Physical Review Applied**, [s. l.], v. 9, n. 2, p. 024034, 2018. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevApplied.9.024034>>

PAK, Afshin; MOHAMMADI, Toraj; HOSSEINALIPOUR, S. M.; ALLAHDINI, Vida. CFD modeling of porous membranes. **Desalination**, [s. l.], v. 222, n. 1–3, p. 482–488, 2008.

PANKAJ, Shyama; SAJIKUMAR, N.; KAIMAL, Roopesh. Simulation of Forward Osmosis Using CFD. **Procedia Technology**, [s. l.], v. 24, p. 70–76, 2016. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S2212017316300949>>

PENG, Weihua; ESCOBAR, Isabel C.; WHITE, Donald B. Effects of water chemistries and properties of membrane on the performance and fouling - A model development study. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 238, n. 1–2, p. 33–46, 2004.

PORCIÚNCULA, Cleiton Bittencourt Da. **Simulação fluidodinâmica computacional de processos de separação por membranas**. 2007. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, [s. l.], 2007.

PUSCH, W. Determination of Transport Parameters of Synthetic Membranes by Hyperfiltration Experiments Part I: Derivation of Transport Relationship from the Linear

Relations of Thermodynamics of Irreversible Processes. **Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie**, [s. l.], v. 81, n. 3, p. 269–276, 1977.

QASIM, Muhammad; BADRELZAMAN, Mohamed; DARWISH, Noora N.; DARWISH, Naif A.; HILAL, Nidal. Reverse osmosis desalination: A state-of-the-art review. **Desalination**, [s. l.], v. 459, n. February, p. 59–104, 2019.

RANADE, Vivek V.; KUMAR, Ashwani. Fluid dynamics of spacer filled rectangular and curvilinear channels. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 271, n. 1–2, p. 1–15, 2006.

RENKIN, E. M. Filtration, diffusion, and molecular sieving through porous cellulose membranes. **The Journal of general physiology**, [s. l.], v. 38, n. 2, p. 225–43, 1954. Disponível em:

<<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/13211998>%0A<http://www.pubmedcentral.nih.gov/articlerender.fcgi?artid=PMC2147404>>

RUIZ-GARCÍA, Alejandro; PESTANA, Ignacio de la Nuez. Feed spacer geometries and permeability coefficients. Effect on the performance in BWRO spiral-wound membrane modules. **Water (Switzerland)**, [s. l.], v. 11, n. 1, 2019.

SABLANI, Ss; GOOSEN, Mfa; AL-BELUSHI, R.; WILF, M. Concentration polarization in ultrafiltration and reverse osmosis: A critical review. **Desalination**, [s. l.], v. 141, n. 3, p. 269–289, 2001.

SAEED, Asim. **Effect of feed channel spacer geometry on hydrodynamics and mass transport in membrane modules**. 2012. [s. l.], 2012.

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**, [s. l.], v. 456, p. 21–30, 2014. Disponível em: <<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0376738814000325>>

SANTOS, J. L. C.; GERALDES, V.; VELIZAROV, S.; CRESPO, J. G. Investigation of flow patterns and mass transfer in membrane module channels filled with flow-aligned spacers using computational fluid dynamics (CFD). **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 305, n. 1–2, p. 103–117, 2007.

SCHWINGE, J.; WILEY, D. E.; FLETCHER, D. F. Simulation of the flow around spacer filaments between channel walls. 2. Mass-transfer enhancement. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 41, n. 19, p. 4879–4888, 2002.

SCHWINGE, J.; WILEY, D. E.; FLETCHER, D. F. Simulation of unsteady flow and vortex shedding for narrow spacer-filled channels. **Industrial and Engineering Chemistry**

Research, [s. l.], v. 42, n. 20, p. 4962–4977, 2003.

SEIDEL, Arza; ELIMELECH, Menachem. Coupling between chemical and physical interactions in natural organic matter (NOM) fouling of nanofiltration membranes: Implications for fouling control. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 203, n. 1–2, p. 245–255, 2002.

SHAKAIB, M.; HASANI, S. M. F.; AHMED, Iqbal; YUNUS, Rosli M. A CFD study on the effect of spacer orientation on temperature polarization in membrane distillation modules. **Desalination**, [s. l.], v. 284, p. 332–340, 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2011.09.020>>

SHERWOOD, T. K.; BRIAN, P. L. T.; FISHER, R. E. Desalination by reverse osmosis. **Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals**, [s. l.], v. 6, n. 1, p. 2–12, 1967.

SHU, Liangsuo; LIU, Xiaokang; LI, Yingjie; YANG, Baoxue; HUANG, Suyi; LIN, Yixin; JIN, Shiping. Modified Kedem–Katchalsky equations for osmosis through nano-pore. **Desalination**, [s. l.], v. 399, n. 30, p. 47–52, 2016. Disponível em: <<http://ci.nii.ac.jp/naid/110002928515/>>

SILVA, Akleino Silvestre. **Modelagem e simulação da dessalinização de águas salobras usando um separador ciclônico térmico munido de bicos aspersores akleino silvestre da silva**. 2016. Universidade Federal de Campina Grande, [s. l.], 2016.

SILVA, Gustavo Lima. **Fator de polarização e coeficiente de permeabilidade em um sistema de osmose reversa acionado por gerador fotovoltaico**. 2012. Universidade Federal de Pernambuco, [s. l.], 2012.

SOLTANIEH, Mohammad; GILL, William N. Review of reverse osmosis membranes and transport models. **Chemical Engineering Communications**, [s. l.], v. 12, n. 4–6, p. 279–363, 1981.

SONG, Lianfa; MA, Shengwei. Numerical studies of the impact of spacer geometry on concentration polarization in spiral wound membrane modules. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 44, n. 20, p. 7638–7645, 2005.

SOUSA, Paula; SOARES, Armando; MONTEIRO, Eliseu; ROUBOA, Abel. A CFD study of the hydrodynamics in a desalination membrane filled with spacers. **Desalination**, [s. l.], v. 349, p. 22–30, 2014. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2014.06.019>>

SOUSA, Paula Cristina dos Santos. **Estudo da hidrodinâmica em canais de alimentação de uma membrana de dessalinização**. 2013. Universidade De Trás-Os-Montes E Alto Douro, [s. l.], 2013.

STRATHMANN, H. Membrane separation processes: Current relevance and future opportunities. **AIChE Journal**, [s. l.], v. 47, n. 5, p. 1077–1087, 2001.

SUASSUNA, João. Água potável no semi-árido : escassez anunciada. [s. l.], p. 1–4, 1999. Disponível em: <<http://www.fundaj.gov.br>>

USTA, Mustafa; ANQI, Ali E.; OZTEKIN, Alparslan. Reverse osmosis desalination modules containing corrugated membranes – Computational study. **Desalination**, [s. l.], v. 416, n. May, p. 129–139, 2017. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2017.05.005>>

VERSTEEG, H. K. ..; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics**. 2. ed. [s.l.] : Editora Pearson, 2007.

VOLKOV, A. G.; PAULA, S.; DEAMER, D. W. Two mechanisms of permeation of small neutral molecules and hydrated ions across phospholipid bilayers. **Bioelectrochemistry and Bioenergetics**, [s. l.], v. 42, n. 2, p. 153–160, 1997.

VOUTCHKOV, Nikolay. **Desalination Engineering Planning and Design**. [s.l.] : McGraw Hill, 2013.

VOUTCHKOV, Nikolay. Energy use for membrane seawater desalination - current status and trends. **Desalination**, [s. l.], n. September, p. 0–1, 2017. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2017.10.033>>

VROUWENVELDER, J. S.; PICIOREANU, C.; KRUIHOF, J. C.; VAN LOOSDRECHT, M. C. M. Biofouling in spiral wound membrane systems: Three-dimensional CFD model based evaluation of experimental data. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 346, n. 1, p. 71–85, 2010.

WANG, Jinwen; DLAMINI, Derrick S.; MISHRA, Ajay K.; PENDERGAST, Mary Theresa M.; WONG, Mavis C. Y.; MAMBA, Bhekie B.; FREGER, Viatcheslav; VERLIEFDE, Arne R. D.; HOEK, Eric M. V. A critical review of transport through osmotic membranes. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 454, p. 516–537, 2014. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.memsci.2013.12.034>>

WANG, Lawrence K.; CHEN, Jiaping Paul; YUNG-TSE HUNG; SHAMMAS, Nazih K. **Membrane and Desalination Technologies**. Hmana Pres ed. Totowa, NJ: Humana Press, 2011. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/978-1-59745-278-6>>

WANG, Liyuang; SONG, Lianfa. Flux decline in crossflow microfiltration and ultrafiltration: Experimental verification of fouling dynamics. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 160, n. 1, p. 41–50, 1999.

WANG, Yang; HE, Wei; ZHU, Hai. Computational fluid dynamics (CFD) based modelling of osmotic energy generation using pressure retarded osmosis (PRO). **Desalination**, [s. l.], v. 389, p. 98–107, 2016. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.desal.2016.02.002>>

WEIHS, G. A. Fimbres; WILEY, D. E. CFD analysis of tracer response technique under

cake-enhanced osmotic pressure. **Journal of Membrane Science**, [s. l.], v. 449, p. 38–49, 2014. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.memsci.2013.08.015>>

WERBER, Jay R.; DESHMUKH, Akshay; ELIMELECH, Menachem. The Critical Need for Increased Selectivity, Not Increased Water Permeability, for Desalination Membranes. **Environmental Science and Technology Letters**, [s. l.], v. 3, n. 4, p. 112–120, 2016.

WHO; UNICEF. Progress on household drinking water, sanitation and hygiene 2000-2017. Special focus on inequalities. New York: United Nations Children’s Fund (UNICEF) and World Health Organization, 2019. [s. l.], 2019.

WILLIAMS, Michael E. A Review of Reverse Osmosis Theory. [s. l.], p. 1–40, 2003.

YAKHOT, Victor; ORSZAG, Steven A. Renormalization group analysis of turbulence. I. Basic theory. **Journal of Scientific Computing**, [s. l.], v. 1, n. 1, p. 3–51, 1986.

ZHANG, Wenxiang; LUO, Jianquan; DING, Luhui; JAFFRIN, Michel Y. A review on flux decline control strategies in pressure-driven membrane processes. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, [s. l.], v. 54, n. 11, p. 2843–2861, 2015.

ZOUHRI, Nouredine; IGOUZAL, Mohamed; LARIF, Majdouline; HAFSI, Mahmoud; TAKY, Mohamed; ELMIDAOU, Azzedine. Prediction of salt rejection by nanofiltration and reverse osmosis membranes using Spiegler-Kedem model and an optimisation procedure. **Desalination and Water Treatment**, [s. l.], v. 120, n. September, p. 41–50, 2018.

APÊNDICE A - I

UDFs PARA PROPRIEDADES DA SOLUÇÃO

O Apêndice A - I engloba detalhes das UDFs desenvolvidas para cálculos das propriedades físicas da solução, utilizando as equações apresentadas na seção 3.6.2. As UDFs foram escritas em linguagem C e foram acopladas no software ANSYS FLUENT 15.07. As linhas de comandos das UDFs são mostradas a seguir.

```
/*
*****
/*UDF para determinar a densidade da solução de água pura e cloreto de sódio
*/
/*(Densidade em função da fração mássica do soluto (equação de Geraldes et al
/*al (2001)
*/
*****
*/

#include "udf.h"

DEFINE_PROPERTY(cell_densidade,c,t)
{
    real densidade;
    real massa_soluto;
    /* Fração mássica do soluto*/
    massa_soluto= C_UDSI(c,t,0);
    /* Declaração da Fração mássica do soluto*/
    densidade = 997.1*(1+0.696*massa_soluto);
    /* Equação de Geraldes et al (2001)*/
    //Message("densidade=%f\n",densidade);
    return densidade;
}
/*valor que retorna*/
}
*****
*/
```

```

/*****
/*****
/*UDF para determinar a densidade da solução de água pura e cloreto de sódio
/*
/*(Viscosidade em função da fração mássica do soluto (equação de Geraldles*/
/*et al (2001)
/*****
/*****

#include "udf.h"
/*#include "math.h"*/

DEFINE_PROPERTY(cell_viscosity,c,t)
{
    double viscosidade;
/* viscosidade*/
    real massa_soluto;
/* Fração mássica do soluto*/

    massa_soluto=C_UDSI(c,t,0);
/* Declaração da Fração mássica do soluto*/
    viscosidade=(0.89+1.4507*massa_soluto)*pow(10,-3);
/* Equação de geraldles et al (2001)*
    //Message("viscosidade=%f\n",viscosidade);
    return viscosidade;
/*valor que retorna*/
}
/*****
/*****/
```

```

/*****
/*****
/*UDF para determinar a densidade da solução de água pura e cloreto de sódio
/*
/*(Difusividade D baseado na equação de Gerald es et al (2001) usando*/
/*condição Max()
/*****
/*****

#include "udf.h"

DEFINE_DIFFUSIVITY(diffusivity,c,t,i)
{
real massa_soluto;
/* Fração mássica do soluto*/
real Diff_c;
/* Difusividade para comparação*/
real Diff;
/* Difusividade final*/

massa_soluto=C_UDSI(c,t,0);
/* Declaração da Fração mássica do soluto*/
Diff_c=(1.61*(1-14*massa_soluto))*pow(10,-9);
/* Primeira equação de difusividade*/

if(Diff_c < 1.45*pow(10,-9))
/* Condição representando o comando Max() */
Diff=1.45*pow(10,-9)*C_R(c,t);
/* Condição 1*/
else
Diff=Diff_c*C_R(c,t);
/* Condição 2*/
//Message("diff=%f \n",diff);
return Diff;
}
/*****

```

APÊNDICE A - II

UDFS PARA INICIALIZAÇÃO

As UDFs para inicialização e o arquivo de cabeçalho citadas no tópico 3.7 são expostas no Apêndice A - II, no qual tem-se duas UDFs, uma para cada tipo de processamento, em série e em paralelo. Alguns valores de parâmetros declarados na linha de programação foram coletados de forma manual na própria interface do ANSYS FLUENT, caso os valores forem diferentes, haverá erro de segmentação ao simular. A seguir, as UDFs para inicialização e o arquivo de cabeçalho.

```
/*
*****
*****
UDF PARA IDENTIFICAÇÃO DAS CÉLULAS VIZINHAS E AS SUAS ADJACENTES A SUPERFICIE
DA MEMBRANA NA ZONA DO CANAL DE ALIMENTAÇÃO EM UM MÓDULO DE DESSALINIZAÇÃO
NA POSIÇÃO HORIZONTAL (EM SERIE)
*****
*****
* Criado por: Diego David Silva Diniz
* Universidade Federal de Campina Grande
* Doutorado em Engenharia de Processos
* Orientador: Prof. Dr. Severino Rodriguez
* Software: FLUENT 15.0.7
* Data da criação finalizada do algoritmo: 08/05/2019
*****
*****/

#include "udf.h"
int passador;
/* Variável global */
extern cell_t (*set_c0) = NULL;
/* Declarar array composta por células c0 */
extern cell_t (*set_membrane_p) = NULL;
extern cell_t (*set_membrane) = NULL;
/* Declarar array composta por células next_c0 */
extern cell_t (*set_c0_permate) = NULL;
/* Declarar array composta por células c0_permate */
real delta;
/* Variável que armazena o delta y de centro a centro das faces */
real PEx;
real deltac;
real Ps = 4.36e-09;
real rs = 3.58e-10;
real rp = 3.8e-10;
DEFINE_INIT(cell_adjacency_membrana, d)
{
    Domain *domain = Get_Domain(1);
```

```

/* Domínio de estudo */
    Thread * t_out = Lookup_Thread (domain, 19);
/* Ponteiro da condição de contorno de saída (membrane) */
    Thread * t_out_permate = Lookup_Thread (domain, 22);
/* Ponteiro da condição de contorno de saída (membrane2) */
    face_t f_out;
/* Declarar f_out como face da condição de contorno */
    face_t f_out_permate;
/* Declarar f_out_permate como face da condição de contorno de permeação */
    face_t f_c0;
/* Declarar f_c0 como face pertencente a c0 e condição de contorno */
    cell_t c0;
/* Declarar c0 como célula vizinha a condição de contorno */
    cell_t c0_permate;
/* Declarar c0_permate como célula vizinha a condição de contorno de permeação */
    Thread *t_fc0;
/* Ponteiro da thread da face de c0 */
    Thread *t_c0 = THREAD_T0(t_out);
/* Ponteiro da thread da célula c0 */
    Thread *t_c0_permate = THREAD_T0(t_out_permate);
/* Ponteiro da thread da célula c0_permate */
    real next_fc0[ND_ND];
/* Variável que armazena o centroíde da face next_c0 */
    real x_c0[ND_ND];
/* Variável que armazena o centroíde da face c0 */
    real xa[ND_ND];
    real center_c0[ND_ND];
/* Variável que armazena o centroíde de c0 */
    real A[ND_ND], x[ND_ND], xc[ND_ND];
/* Variável que armazena a area e a centroíde da face */
    real y_face;
/* Variável que armazena a altura do centroíde da condição de contorno */
    real y_face_old;
/* Variável que armazena a altura do centroíde da condição de contorno anterior */
    real x_center[ND_ND];
/* Variável que armazena o centroíde da face da condição de contorno */
    real x_center_permate[ND_ND];
/* Variável que armazena o centroíde da face da condição de contorno de permeação */
    real center_c0_permate [ND_ND];
/* Variável que armazena o centroíde de c0_permate */
    real cond_next_c0, teste[ND_ND];
/* Armazena a condição que determina a face do next_c0 e parâmetro e teste */
    int a;
/* Número de iteração que inicia em 1 */
    int qtd_face;
/* Quantidade de face em y do meu domínio */
    int i, n;
/* Quantidade de face da célula c0 */
    int ID_THREAD_c0 = THREAD_ID(t_c0);
/* ID da thread da célula c0 */
    int kount = 0;
/* Contador de elementos*/
    int b;
/* Contador para indexar o next_c0*/
    int NPEX = 0;

```



```

    int current_iter = (nres == 0) ? (0) : ((int) count2[nres - 1]);
/* Comando para determinar a o numero de interação corrente */
    a = current_iter + 1;
/* Parametro para tornar a primeira interação 1 e nao 0 */

    if(a == 1)
/* Condição para rodar apenas na primeira interação */
    {
        y_face_old = 0;

        begin_f_loop(f_out, t_out);
        {
            kount++;
            F_CENTROID(x, f_out, t_out)
/* Centróide da face pertencente a condição de contorno */
            if (NPEX == 0)
            {
                PEX = x[0];
                NPEX = 1;
                //Message ("centroid PEX=%f \n",PEX);
            }
            y_face = x[0]; /*1*/
            delta = y_face - y_face_old;
/* Tamanho da célula */
            y_face_old = y_face;
        }
        end_f_loop(f_out, t_out)

        passador = 1;
/* Permintindo a passagem no for da outra UDF */
        set_membrane_p = (cell_t*)malloc(kount * sizeof (cell_t));
        set_c0 = (cell_t*)malloc(kount * sizeof (cell_t));
/* Alocando espaço na memória para armazenar c0 */
        set_membrane = (cell_t*)malloc(kount * sizeof (cell_t));
/* Alocando espaço na memória para armazenar next_c0 */
        set_c0_permate = (cell_t*)malloc(kount * sizeof (cell_t));
/* Alocando espaço na memória para armazenar next_c0 */
        qtd_face = kount;
        Message("Quantidade de celula = %d\n delta_face= %e \n ID thread
da célula c0= %d\n", qtd_face, delta, ID_THREAD_c0);
        b = 0;
        begin_f_loop(f_out, t_out)
/* Loop na face da thread do domínio/ condição / Wall de entrada */
        {
            // F_CENTROID(x_center,f_out,t_out);
/* Centróide da face pertencente a condição de contorno */
            set_membrane[b] = f_out;
            F_CENTROID(x_center, set_membrane[b], t_out);
            c0 = F_C0(f_out, t_out);

/* Célula c0 */
            set_c0[b] = c0;
/* Armazenando c0 */
            C_CENTROID(center_c0, set_c0[b], t_c0);
/* Centróide da célula c0 */
            Message("extern CO: x= %f ----- y=%0.9f
\n",center_c0[0],center_c0[1]);
            Message("membrane: x= %f ----- y=%0.9f
\n",x_center[0],x_center[1]);
            c_face_loop(c0, t_c0, n)

```

```

/* Loop das faces da celula c0 */
    {
        f_c0= C_FACE(c0,t_c0,n);
        t_fc0=C_FACE_THREAD (c0,t_c0,n);
/* Thread face da celula c0 */
        F_CENTROID(x_c0,f_c0,t_fc0);
/* Centroide da face c0 */
        cond_next_c0=center_c0[1]+0.5*(center_c0[1]-
x_center[1]);
/* Condição para determinar a face posterior pertencente a next_c0 */
        Message( "condicao: %f \n",cond_next_c0);
        if(x_c0[1]>cond_next_c0)
/* Determinador da face pertencente a next_c0 */
            {
                F_CENTROID(next_fc0,f_c0,t_fc0);

/* Centroide da face pertencente a next_c0 */
                Message("extern  f_c0:      x=      %f      -----      y=%f
\n",next_fc0[0],next_fc0[1]);
                next_c0=F_C1(f_c0,t_fc0);
/* celula next_c0 */
                set_next_c0[b]=next_c0;
/* Armazenando next_c0 */

                C_CENTROID(teste,set_next_c0[b],t_c0);
/* Centroide da célula next_c0 */
                Message("extern  NEXT_CO:   x=      %f      -----      y=%0.9f
\n",teste[0],teste[1]);
            }
        }
    b++;
/* Contador */
    }
    end_f_loop(f_out, t_out)
    b = 0;
    begin_f_loop (f_out_permate, t_out_permate)

    {
        set_membrane_p[b] = f_out_permate;
        c0_permate = F_C0(f_out_permate, t_out_permate);
        set_c0_permate [b] = c0_permate;
        C_CENTROID(center_c0_permate,          set_c0_permate[b],
t_c0_permate);
/* Centroide da célula c0_permate */
        b++;
    }
    end_f_loop(f_out_permate, t_out_permate)
    deltac = center_c0[1] - x_center[1];
}
Message ("serial : PEx= %0.9f -- delta=%0.9f \n", PEx, delta);
for ( i=0; i<kount; i++)

{
    C_CENTROID(xa,set_c0_permate[i],t_c0_permate);
    C_CENTROID(teste,set_next_c0[i],t_c0);
    Message("extern  NEXT_CO:      x=      %f      -----      y=%0.9f
\n",teste[0],teste[1]);
    Message("extern: x= %f ----- y=%0.12f \n",xa[0],xa[1]);
}
}

```

```

/*****
*****
***** UDF
PARA IDENTIFICAÇÃO DAS CÉLULAS VIZINHAS E AS SUAS ADJACENTES A SUPERFÍCIE DA
MEMBRANA NA ZONA DO CANAL DE ALIMENTAÇÃO EM UM MÓDULO DE DESSALINIZAÇÃO NA
POSIÇÃO HORIZONTAL (EM PARALELO)
*****
*****
* Criado por: Diego David Silva Diniz
* Universidade Federal de Campina Grande
* Doutorado em Engenharia de Processos
* Orientador: Prof. Dr. Severino Rodriguez
* Software: FLUENT 15.0.7
* Data da criação finalizada do algoritmo: 08/05/2019
*****
*****/

#include "udf.h"
int passador;
/* Variável global */

extern cell_t (*set_c0) = NULL;
/* Declarar array composta por células c0 */
extern cell_t (*set_next_c0) = NULL;
/* Declarar array composta por células next_c0 */
extern cell_t (*set_c0_permate) = NULL;
/* Declarar array composta por células c0_permate */
real delta;
real PEx;
/* Variável que armazena o delta y de centro a centro das faces */
int kount;
/* Contador de elementos*/

DEFINE_INIT(cell_adjacency_membrana,d)
{
    Domain *domain = Get_Domain(1);
    /* Domínio de estudo */
    Thread * t_out = Lookup_Thread (domain, 31);
    /* Ponteiro da condição de contorno de saída */
    Thread * t_out_permate = Lookup_Thread (domain, 30);
    /* Ponteiro da condição de contorno de saída para o tubo de permeação */
    face_t f_out;
    /* Declarar f_out como face da condição de contorno */
    face_t f_out_permate;
    /* Declarar f_out_permate como face da condição de contorno de permeação */
    face_t f_c0;
    /* Declarar f_c0 como face pertencente a c0 e condição de contorno */
    cell_t c0;
    /* Declarar c0 como célula vizinha a condição de contorno */
    cell_t c0_permate;
    /* Declarar c0_permate como célula vizinha a condição de contorno de permeação */
    cell_t next_c0;
    /* Declarar next_c0 como célula adjacente a c0 */
    Thread *t_fc0;
    /* Ponteiro da thread da face de c0 */
    Thread *t_c0 = THREAD_T0(t_out);
    /* Ponteiro da thread da célula c0 */
    Thread *t_c0_permate = THREAD_T0(t_out_permate);
    /* Ponteiro da thread da célula c0_permate */

```

```

    real next_fc0[ND_ND];
/* Variável que armazena o centroide da face next_c0 */
    real x_c0[ND_ND];
/* Variável que armazena o centroide da face c0 */
    real xa[ND_ND];
    real Tteste[ND_ND];
    real center_c0[ND_ND];
/* Variável que armazena o centroide de c0 */
    real A[ND_ND], x[ND_ND], xc[ND_ND];
/* Variável que armazena a área e o centroide da face */
    real y_face;
/* Variável que armazena a altura do centroide da condição de contorno */
    real y_face_old;
/* Variável que armazena a altura do centroide da condição de contorno anterior */
    real x_center[ND_ND];
/* Variável que armazena o centroide da face da condição de contorno */
    real x_center_permate[ND_ND];
/* Variável que armazena o centroide da face da condição de contorno de permeação */
    real center_c0_permate [ND_ND];
/* Variável que armazena o centroide de c0_permate */
    real cond_next_c0, teste[ND_ND];
/* Armazena a condição que determina a face do next_c0 e parâmetro e teste */
    int a;
/* Número de iteração que inicia em 1 */
    int qtd_face;
/* Quantidade de face em y do meu domínio */
    int i, n;
/* Quantidade de face da célula c0 */
    int ID_THREAD_c0= THREAD_ID(t_c0);
/* ID da thread da célula c0 */
    int b;
/* Contador para indexar o next_c0*/
    int total_kount;
    int NPEx=0;

#ifdef !RP_HOST /* serial e nodes*/
    int current_iter = (nres == 0) ? (0) : ((int) count2[nres - 1]);
/* Comando para determinar a o numero de interação corrente */
    a=current_iter+1;
/* Parametro para tornar a primeira interação 1 e nao 0 */

    if(a==1)
/* Condição para rodar apenas na primeira interação */
    {
        y_face_old=0;

        begin_f_loop(f_out, t_out);
        {
            if PRINCIPAL_FACE_P (f_out, t_out)
            {
                kount++;
                F_CENTROID(x,f_out,t_out);
/* Centroide da face pertencente a condição de contorno */
                if (NPEx==0)
                {
                    PEx=x[0];

```

```

        NPEx=1;
        //Message ("centroid PEx=%f \n",PEx);
    }
    y_face=x[0]; /*1*/
    delta=y_face-y_face_old;
/* Tamanho da célula */
    y_face_old=y_face;
    //Message ("centroid=%f \n",x[0]);
    }
    }
    end_f_loop(f_out, t_out)
}

    qtd_face=kount;
total_kount=qtd_face;
#ifdef RP_NODE

    total_kount= PRF_GRSUM1(qtd_face);
#endif
#endif
    node_to_host_int_1(total_kount);
    node_to_host_real_1(delta);
#ifdef !RP_NODE
    Message("\n Quantidade de celula = %d\n delta_face= %e \n ID thread
da célula c0= %d\n",total_kount, delta,ID_THREAD_c0);
#endif
    #if !RP_HOST /* serial e nodes*/
    passador = 1;
/* Permintindo a passagem no for da outra UDF */
    set_c0 = (cell_t*)malloc(kount * sizeof (cell_t));
/* Alocando espaço na memória para armazenar c0 */
    set_next_c0 = (cell_t*)malloc(kount * sizeof (cell_t));
/* Alocando espaço na memória para armazenar next_c0 */
    set_c0_permate = (cell_t*)malloc(kount * sizeof (cell_t));
/* Alocando espaço na memória para armazenar next_c0 */

    b=0;
    begin_f_loop(f_out,t_out)
/* Loop na face da thread do dominio/ condição / Wall de entrada */
    {
        F_CENTROID(x_center,f_out,t_out);
/* Centroide da face pertencente a condição de contorno */
        c0=F_C0(f_out,t_out);
/* Célula c0 */
        set_c0[b]=c0;
/* Armazenando c0 */
        C_CENTROID(center_c0,set_c0[b],t_c0);
/* Centroide da célula c0 */
        //Message("extern CO: x= %f ----- y=%0.9f
\n",center_c0[0],center_c0[1]);
        c_face_loop(c0, t_c0, n)
/* Loop das face da célula c0 */
        {
            f_c0= C_FACE(c0,t_c0,n);
/* Indexador da face da célula c0 */
            t_fc0=C_FACE_THREAD (c0,t_c0,n);
/* Thread face da célula c0 */
            F_CENTROID(x_c0,f_c0,t_fc0);
/* Centroide da face c0 */
            cond_next_c0=center_c0[1]+0.5*(center_c0[1]-

```

```

x_center[1]);
/* Condição para determinar a face posterior pertencente a next_c0 */
//Message( "condicao: %f \n",cond_next_c0);
if(x_c0[1]>cond_next_c0)
/* Determinador da face pertencente a next_c0 */
{
    F_CENTROID(next_fc0,f_c0,t_fc0);

/* Centroide da face pertencente a next_c0 */
//Message("extern f_c0: x= %f ----
----- y=%f \n",next_fc0[0],next_fc0[1]);
    next_c0=F_C1(f_c0,t_fc0);
/* celula next_c0 */
    set_next_c0[b]=next_c0;
/* Armazenando next_c0 */

    C_CENTROID(teste,set_next_c0[b],t_c0);
// Centroides da célula
next_c0 */
//Message("extern NEXT_CO: x= %f -
----- y=%0.9f \n",teste[0],teste[1]);
    b++;
/* Contador */
}
}
end_f_loop(f_out,t_out)
b=0;
begin_f_loop (f_out_permate, t_out_permate)
/*Loop na face da thread do dominio/ condição de permeação / Wall de entrada
*/
{
    c0_permate=F_C0(f_out_permate,t_out_permate);
    set_c0_permate [b]=c0_permate;

    C_CENTROID(center_c0_permate,set_c0_permate[b],t_c0_permate);
/* Centroides da célula c0_permate */
//Message("permate: x=%f -----y=%f \n",
center_c0_permate[0],center_c0_permate[1]);
    b++;
}
end_f_loop(f_out_permate,t_out_permate)
#ifdef !RP_NODE
Message("total_kount=%d \n",total_kount);
C_CENTROID(xa,set_c0_permate[1],t_c0_permate);
Message("extern HOST: x= %f ----- y=%0.12f \n",xa[0],xa[1]);
for ( i=0; i<total_kount; i++)

/* Print da posição dos centroides c0 */
{
    C_CENTROID(xa,set_c0_permate[i],t_c0_permate);
    C_CENTROID(teste,set_next_c0[i],t_c0);
    Message("passou aki \n");
    Message("extern NEXT_CO HOST: x= %f ----- y=%0.9f
\n",teste[0],teste[1]);
    Message("extern HOST: x= %f ----- y=%0.12f \n",xa[0],xa[1]);
}

#endif
}
/*****

```

```

/*****
*****
UDF PARA IDENTIFICAÇÃO DAS CÉLULAS VIZINHAS E AS SUAS ADJACENTES A SUPERFICIE
DA MEMBRANA NA ZONA DO CANAL DE ALIMENTAÇÃO EM UM MÓDULO DE DESSALINIZAÇÃO
NA POSIÇÃO HORIZONTAL
*****
*****
* Criado por: Diego David Silva Diniz
* Universidade Federal de Campina Grande
* Doutorado em Engenharia de Processos
* Orientador: Prof. Dr. Severino Rodriguez
* Software: FLUENT 15.0.7
* Data da criação finalizada do algoritmo: 08/05/2019
*****
*****
*****/

extern cell_t *set_membrane_p [];
extern cell_t *set_c0 [];
extern cell_t *set_membrane [];
extern cell_t *set_c0_permate [];
extern int passador;
extern real delta;
extern real PEx;
extern real deltac;
extern real Ps;
extern real rp;
extern real rs;

/*****/
```

APÊNDICE A - III

UDFs PARA CONDIÇÕES DE FRONTEIRAS E ZONAS

O Apêndice A - III apresenta as UDFs utilizadas para caracterização das condições de contornos e de zonas dos domínios proposto nessa tese. À frente são apresentadas as UDFs desse grupo.

```
/*
*****
*****
*/
/*
          UDF para fluxo permeado zona 1
          */
*****
*****
*/

#include <udf.h>
#include <mem.h>
#include <unsteady.h>
#include "extern_cells.h"

DEFINE_PROFILE(flujo_feed, thread, position)
{
    Thread *t_c0 = THREAD_T0(thread);
    Domain *domain = Get_Domain(1);
    Thread *t_out_permate = Lookup_Thread (domain, 22);
    /* Ponteiro da condição de contorno de saída para o tubo de permeação */
    Thread *t_c0_permate = THREAD_T0(t_out_permate);
    face_t f;
    real x[ND_ND];
    /* this will hold the position vector */
    real y,Rm,vis_agua, Pf, Pp, Pfi, Ppi, DP, DPi;
    real coef_dist_porebulk, reflection_coef;
    int d;
    int current_iter = (nres == 0) ? (0) : ((int) count2[nres - 1]);
    /* Comando para determinar a o numero de interação corrente */

    Rm=1.562e14;
    vis_agua=0.89*(1+1.63*0)*pow(10,-3);

    #define ratio_solute_pore(rs,rp) (rs/rp)
    coef_dist_porebulk=SQR(1-ratio_solute_pore(rs,rp));
    /* EQ. Manning */
    reflection_coef =SQR(1-coef_dist_porebulk);

    if(current_iter!=0)
    {
        begin_f_loop(f, thread)
        {
            F_CENTROID(x,f,thread);
            d=(x[0]-PEX)/(delta);
        }
    }
}
```



```

Pf=C_P>(*(* (set_c0+0)+d),t_c0);
Pp=C_P>(*(* (set_c0_permate+0)+d),t_c0_permate);
DP=Pf-Pp;

Pfi=805*C_UDSI>(*(* (set_c0+0)+d),t_c0,0)*pow(10,5);
Ppi=805*C_UDSI>(*(* (set_c0_permate+0)+d),t_c0_permate,0)*pow(10,5);
DPi=Pfi-Ppi;

    y = x[1];
F_PROFILE(f, thread, position) = -(1/(Rm*vis_agua))*(DP-
reflection_coef*DPi);
/*fluxo permeado Jv */

}
end_f_loop(f, thread)
}
else
{
    //Message ("passou aki 3 \n");
    begin_f_loop(f, thread)
    {
        F_CENTROID(x,f,thread);
        F_PROFILE(f, thread, position) = 0;
/*0.005 é a metade do inlet*/
    }
    end_f_loop(f, thread)
}
}
/*****/

```

```

/*****
/*****
/*
          UDF para fluxo permeado zona 2
          */
/*****
/*****
#include <udf.h>
#include <mem.h>
#include <unsteady.h>
#include "extern_cells.h"

DEFINE_PROFILE(fluxo_permeate, thread, position)
{
    Domain *domain = Get_Domain(1);
    Thread *t_membrane = Lookup_Thread (domain, 19);
    /* Ponteiro da condição de contorno de saída para o tubo de permeação */
    face_t f;
    real x[ND_ND];

    int d;
    int current_iter = (nres == 0) ? (0) : ((int) count2[nres - 1]);

    /* Comando para determinar a o numero de interação corrente */

    if(current_iter!=0)
    {
        begin_f_loop(f, thread)
        {
            F_CENTROID(x,f,thread);
            d=(x[0]-PEX)/(delta);
            F_PROFILE(f,          thread,          position)          =          -
C_V(*(*(set_membrane+0)+d),t_membrane);
/*fluxo permeado Jv (Amokrane)*/

        }
        end_f_loop(f, thread)
    }
    else
        {
            //Message ("passou aki 3 \n");
            begin_f_loop(f, thread)
            {
                F_CENTROID(x,f,thread);
                F_PROFILE(f, thread, position) = 0;
            }
            end_f_loop(f, thread)
        }
}
/*****

```

```

/*****
/*****
/*
          UDF para concentração zona 1
          */
/*****
/*****

#include <udf.h>
#include <mem.h>
#include <unsteady.h>
#include "extern_cells.h"

DEFINE_PROFILE(concentration, thread, position)
{
  real J,deltac, Diff_c, Diff, map, maf, conc;
  Domain *domain = Get_Domain(1);
  Thread *t_c0 = THREAD_T0(thread);
  real coef_dist_porebulk,reflection_coef;
  real xf[ND_ND], xf0[ND_ND];
  face_t f;
  cell_t c0;

  // Cálculo da rejeição
  #define ratio_solute_pore(rs,rp) (rs/rp)

  coef_dist_porebulk=SQR(1-ratio_solute_pore(rs,rp));
  /* EQ. Manning */
  reflection_coef =SQR(1-coef_dist_porebulk);
  /* EQ Anderson */
  #define coef_rejection(reflection_coef,Ps,J) (1-(((1-reflection_coef)/(1-
reflection_coef*exp(-((1-reflection_coef)*J)/Ps))))))
  /* AHMAD */

  begin_f_loop(f, thread)
  {
    c0=F_C0(f,thread);
    F_CENTROID(xf, f, thread);
    C_CENTROID(xf0,c0,t_c0);
    deltac=xf0[1]-xf[1];
    J=-F_V(f,thread);
    map=5.4e-5;
    Diff_c=(1.61*(1-14*C_UDSI(c0,t_c0,0)))*pow(10,-9);
  /* Primeira equação de difusividade*/

    if(Diff_c < 1.45*pow(10,-9))
  /* Condição representando o comando Max() */
    Diff=1.45*pow(10,-9);
  /* Condição 1*/
    else
    Diff=Diff_c;
  /* Condição 2*/

    F_PROFILE(f, thread, position)
=(exp((J*deltac)/Diff))* (1/(coef_rejection(reflection_coef,Ps,J)+(1-
coef_rejection(reflection_coef,Ps,J))*exp((J*deltac)/Diff)))*C_UDSI(c0,t_c0
,0);
  //deltac 1.25e-7 --- k=Diff/deltac=0.0116 exp(jdeltac/diff)=1.00117
  //Message("delta=%0.12f",deltac);
  }
  end_f_loop(f, thread)
}

```

```

/*****
/*****
/*****
/*          UDF para concentração zona 2          */
/*****
/*****

#include <udf.h>
#include <mem.h>
#include <unsteady.h>
#include "extern_cells.h"

DEFINE_PROFILE(concentration_permate, thread, position)
{
    real J;
    int d;
    real coef_dist_porebulk,reflection_coef;
    Domain *domain = Get_Domain(1);
    Thread *t_membrane = Lookup_Thread (domain, 19);
    real x[ND_ND];
    face_t f;
    cell_t c0;
    int current_iter = (nres == 0) ? (0) : ((int) count2[nres - 1]);
    /* Comando para determinar a o numero de interação corrente */
    #define ratio_solute_pore(rs,rp) (rs/rp)

    coef_dist_porebulk=SQR(1-ratio_solute_pore(rs,rp));
    /* EQ. Manning */
    reflection_coef =SQR(1-coef_dist_porebulk);
    /* EQ Anderson */
    #define      coef_rejection(reflection_coef,Ps,J)          (1-((1-
reflection_coef)/(1-reflection_coef*exp(-(1-reflection_coef)*J)/Ps)))

    /* AHMAD */

    if(current_iter!=0)
    {
        begin_f_loop(f, thread)
        {
            F_CENTROID(x,f,thread);
            d=(x[0]-PEX)/(delta);
            J=fabs(F_V(f,thread));

            F_PROFILE(f,          thread,          position)          =(1-
coef_rejection(reflection_coef,Ps,J))*F_UDSI(*(set_membrane+0)+d),t_membr
ane,0);
        }
        end_f_loop(f, thread)
    }
    else
        {
            begin_f_loop(f, thread)
            {
                F_CENTROID(x,f,thread);
                F_PROFILE(f, thread, position) = 0;
            }
            end_f_loop(f, thread)
        }
}

```

```

/*****
/*****
/*****
/*          UDF para velocidade inlet          */
/*****
/*****

#include <udf.h>

DEFINE_PROFILE(inlet_x_velocity, thread, position)
{
    real x[ND_ND];
    /* vetor posição */
    real y, h, Vm, Re, mai;
    face_t f;

    begin_f_loop(f, thread)
    {
        F_CENTROID(x, f, thread);
        y = x[1];
        h=0.00035;
        /*metade do canal inlet 0.00035 Se 0.001 Ce */
        mai=0.002;
        /*Fração mássica da entrada*/
        Re=100;
        /*Reynolds*/
        Vm=Re*(0.89*(1+1.63*mai)*pow(10,-3))/(4*h*997.1*(1+0.696*mai));
        /* velocidade média*/
        F_PROFILE(f, thread, position) = 6*Vm*(y/(2*h))*(1-(y/(2*h)));
    }
    end_f_loop(f, thread)
}
/*****

```

APÊNDICE A - IV

UDF PARA DEFINIÇÃO DO PASSO DE TEMPO

O Apêndice A - IV apresenta as UDFs utilizadas para definir o delta tempo utilizado durante a simulação. À frente são apresentadas as UDFs desse grupo.

```

/*****
/*****
/*      UDF para delta tempo variável em função da interação por timestep*/
/*****
/*****

#include "udf.h"
#include "unsteady.h"
DEFINE_DELTAT(mydeltat_function_timestep, domain)
{
    real time_step, primeira_fase;
    #define primeira_fase 6000
    if (N_TIME <primeira_fase )
        time_step=0.001;
    else
    {
        time_step=0.01;
    }
    return time_step;
}

```

APÊNDICE A - V

UDF PARA CÁLCULO DA ESPESSURA DA CAMADA

O Apêndice A - V apresenta a UDF utilizada para calcula a espessura da camada de polarização por concentração encontrados nas simulações feitas nesta tese. À frente são apresentas as UDFs desse grupo.

```

/*****
/*****
/*          UDF para cálculo da espessura          */
/*****
/*****

#include "udf.h"
#include "mem.h"
DEFINE_ON_DEMAND(curve_altura_cp)
{
FILE *fp;
int ID_membrane_feed=19;

Domain *domain = Get_Domain(1);

Thread * t_out = Lookup_Thread (domain, ID_membrane_feed);
Thread *t_c0 = THREAD_T0(t_out);
int ID_THREAD_fc0;
Thread *t_fc0;
Thread *t_primeiro;
face_t f_out;
face_t f_primeiro;
face_t f_c0;
cell_t c0;
real x_center[ND_ND];
real center_c0[ND_ND];
real x_c0[ND_ND];
real next_fc0[ND_ND];
real clim;
real center_old;
real fator;
real clim_old;
real cond_next_c0;
int n;
int libera=0;

        fp = fopen("cpteste.txt","w+");

        begin_f_loop(f_out, t_out)

```

```

    {
        //face
        F_CENTROID(x_center,f_out,t_out);
        clim= F_UDSI(f_out, t_out,0);
        //celula
        c0 = F_C0(f_out, t_out);
        clim=C_UDSI(c0,t_c0,0);
        C_CENTROID(center_c0, c0, t_c0);

        if(clim<=0.000202 )
        {
            fprintf (fp,"cp1:  %f :  %0.12f   : %0.12f : %0.12f : %0.12f
\n",center_c0[0],center_c0[1],center_old, clim, clim_old);
            libera =1;
        }
        //faces da célula
        c_face_loop(c0, t_c0, n)

        {
            f_c0= C_FACE(c0,t_c0,n);

            t_fc0=C_FACE_THREAD (c0,t_c0,n);

            ID_THREAD_fc0 = THREAD_ID(t_c0);
            F_CENTROID(x_c0,f_c0,t_fc0);

            cond_next_c0=center_c0[1]+0.5*(center_c0[1]-
x_center[1]);

            if(x_c0[1]>cond_next_c0)

                {
                    F_CENTROID(next_fc0,f_c0,t_fc0);

                    f_primeiro=f_c0;
                    t_primeiro=t_fc0;
                }

        }
        libera =0;

        while (libera==0)
        {
            F_CENTROID(x_center,f_primeiro,t_primeiro);

            c0 = F_C1(f_primeiro, t_primeiro);

            clim=C_UDSI(c0,t_c0,0);

```



```

        C_CENTROID(center_c0, c0, t_c0);

        if(clim<=0.000202)
        {
            fprintf (fp,"cp1:  %f :  %0.12f   : %0.12f : %0.12f   : %0.12f
\n",center_c0[0],center_c0[1],center_old, clim, clim_old);
            libera =1;
        }

        c_face_loop(c0, t_c0, n)

        {
            f_c0= C_FACE(c0,t_c0,n);

            t_fc0=C_FACE_THREAD (c0,t_c0,n);

            F_CENTROID(x_c0,f_c0,t_fc0);

            cond_next_c0=center_c0[1]+0.5*(center_c0[1]-
x_center[1]);
                if(x_c0[1]>cond_next_c0)
                    {
                        F_CENTROID(next_fc0,f_c0,t_fc0);

                        f_primeiro=f_c0;
                    }
                }
            center_old=center_c0[1];
            clim_old=clim;
        }

        }

        }
end_f_loop(f_out, t_out)
fclose(fp);
Message(" SALVO \n");
}



```

APÊNDICE B - I

QUADRO DETALHADO DAS SIMULAÇÕES








Quadro 5.1 – Simulações realizadas e suas condições de operações

(continua)

Domínio	Tipo de geometria	Condições de operação	
Bidimensional sem espaçador		$Re^{inlet} = 1000; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}; C. \text{ convergência} = 10^{-4}$	
		$Re^{inlet} = 1000; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}; C. \text{ convergência} = 10^{-6}$	
		$Re^{inlet} = 1000; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}; C. \text{ convergência} = 10^{-8}$	
		$Re^{inlet} = 1000; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}; C. \text{ convergência} = 10^{-10}$	
		$Re^{inlet} = 1000; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}; C. \text{ convergência} = 10^{-12}$	
		$Re^{inlet} = 1000; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}; \text{ malha } 12 \times 26$	
		$Re^{inlet} = 1000; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}; \text{ malha } 25 \times 54$	
		$Re^{inlet} = 1000; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}; \text{ malha } 70 \times 150$	
		$Re^{inlet} = 1000; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}; \text{ malha } 140 \times 300$	
		$Re^{inlet} = 1300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$	
		$Re^{inlet} = 1300; P_a^{outlet} = 2 \text{ MPa}$	
		$Re^{inlet} = 1300; P_a^{outlet} = 3 \text{ MPa}$	
		$Re^{inlet} = 500; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}, \text{ com perfil de velocidade desenvolvido}$	
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}, 2 \text{ MPa e } 3 \text{ MPa}$	
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}, 2 \text{ MPa e } 3 \text{ MPa}$	
		$Re^{inlet} = 500; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}, 2 \text{ MPa e } 3 \text{ MPa}$	
		$Re^{inlet} = 1500; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}, 2 \text{ MPa e } 3 \text{ MPa}$	
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$	
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$	
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$	
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$	
		$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$	
			$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
			$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$







Quadro 5.1 – Simulações realizadas e suas condições de operações

(continuação)

Domínio	Tipo de geometria	Condições de operação
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$		
$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$		
$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$		
$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$		
	$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$	
	$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$	
	$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$	





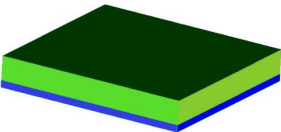
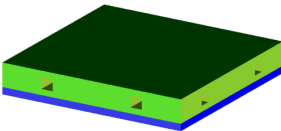
Quadro 5.1 – Simulações realizadas e suas condições de operações

(continuação)

Domínio	Tipo de geometria	Condições de operação
Bidimensional com espaçador		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		
	$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$	
	$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$	
	$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$	
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$

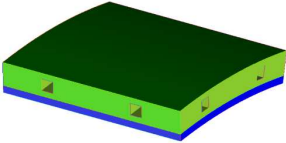
Quadro 5.1 – Simulações realizadas e suas condições de operações

(continuação)

Domínio	Tipo de geometria	Condições de operação
		$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 200; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 300; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 50; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
$Re^{inlet} = 150; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$		
Tridimensional		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa}$
		$Re^{inlet} = 100; P_a^{outlet} = 1 \text{ MPa e } 2 \text{ MPa}$

Quadro 5.1 – Simulações realizadas e suas condições de operações

(conclusão)

Domínio	Tipo de geometria	Condições de operação
		$Re^{\text{inlet}} = 100$; $P_a^{\text{outlet}} = 1 \text{ MPa}$ e 2 MPa

Fonte: Própria do autor.