



ANÁLISE DA TRI-COGERAÇÃO DE ENERGIA ELÉTRICA, ÁGUA
DESSALINIZADA E GÁS HIDROGÊNIO A PARTIR DE UM MICRO REATOR
NUCLEAR DE ÁGUA PRESSURIZADA

Guilherme Gottems

Projeto de Graduação apresentado ao Curso
de Engenharia Nuclear da Escola Politécnica,
Universidade Federal do Rio de Janeiro, como
parte dos requisitos necessários à obtenção do
título de Engenheiro.

Orientadores: Su Jian

Renato Machado Cotta

Rio de Janeiro

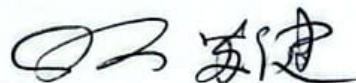
Julho de 2025

ANÁLISE DA TRI-COGERAÇÃO DE ENERGIA ELÉTRICA, ÁGUA
DESSALINIZADA E GÁS HIDROGÊNIO A PARTIR DE UM MICRO REATOR
NUCLEAR DE ÁGUA PRESSURIZADA

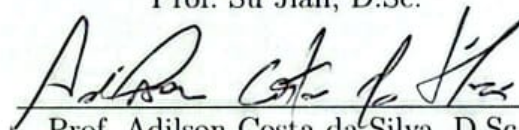
Guilherme Gottens

PROJETO DE GRADUAÇÃO SUBMETIDO AO CORPO DOCENTE DO
CURSO DE ENGENHARIA NUCLEAR DA ESCOLA POLITÉCNICA
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE
DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE
ENGENHEIRO NUCLEAR.

Examinado por:



Prof. Su Jian, D.Sc.



Prof. Adilson Costa da Silva, D.Sc.

Prof. Kleber Marques Lisboa, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
JULHO DE 2025

Gottens, Guilherme

Análise da tri-cogeração de energia elétrica, água dessalinizada e gás hidrogênio a partir de um micro reator nuclear de água pressurizada/Guilherme Gottens. – Rio de Janeiro: UFRJ/ Escola Politécnica, 2025.

XIII, 105 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Su Jian

Renato Machado Cotta

Projeto de Graduação – UFRJ/ Escola Politécnica/
Curso de Engenharia Nuclear, 2025.

Referências Bibliográficas: p. 101 – 105.

1. Cogeração Nuclear. 2. Dessalinização. 3. Eletrolise PEM. I. Jian, Su *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola Politécnica, Curso de Engenharia Nuclear. III. Título.

Aos meus Pais.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer, primeiramente, aos meus pais, que sempre me deram todo o apoio e suporte necessários para que eu seguisse meus sonhos e tivesse a melhor formação. Que mantiveram contato e fizeram chamadas de vídeo todas as noites durante o período em que estive longe de casa, me ajudando a lidar com todas as situações.

À Júlia, minha namorada, que foi minha parceira desde que entrou na minha vida, quando eu era monitor de Cálculo I da sua turma, e continua me apoiando até hoje, sendo meu braço direito em todas as questões e contribuindo com conversas valiosas que me ajudaram a chegar até aqui.

Aos professores Renato e Carolina, que me acolheram no LabMEMS e me ajudaram a conduzir esta pesquisa de maneira ética, compartilhando seus conhecimentos e contribuindo imensamente para a minha formação. Terei sempre enorme gratidão pela confiança, pelas conversas inspiradoras e por tudo que aprendi ao lado de vocês.

Ao professor Kleber, que me orientou durante o estágio no LabMEMS e foi essencial no desenvolvimento deste projeto.

Ao professor Su Jian, que aceitou a coorientação com o professor Renato e foi sempre solícito, compartilhando conselhos e dicas valiosas ao longo do desenvolvimento deste trabalho.

Aos colegas do LabMEMS, em especial ao Emerson, por todo o auxílio desde o início da pesquisa.

À família da Júlia, por terem se tornado minha segunda família, me incluindo nos momentos de confraternização e me acolhendo com tanto carinho.

Aos professores que fizeram parte da minha formação nestes últimos cinco anos na UFRJ, em especial àqueles do DNC, que me mostraram o quão incrível e necessária é a engenharia nuclear.

A todos os servidores e funcionários da UFRJ, pelos serviços prestados.

E, finalmente, aos meus avós Hildemar e Dulce, que, infelizmente, não conseguiram estar aqui para me ver formando engenheiro nuclear. Vocês estarão para sempre no meu coração.

Resumo do Projeto de Graduação apresentado à Escola Politécnica/ UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro Nuclear.

ANÁLISE DA TRI-COGERAÇÃO DE ENERGIA ELÉTRICA, ÁGUA
DESSALINIZADA E GÁS HIDROGÊNIO A PARTIR DE UM MICRO REATOR
NUCLEAR DE ÁGUA PRESSURIZADA

Guilherme Gottems

Julho/2025

Orientadores: Su Jian

Renato Machado Cotta

Curso: Engenharia Nuclear

Este trabalho analisa a viabilidade técnica de um sistema de tri-cogeração baseado no micro reator nuclear de água pressurizada DESSAL, com potência térmica de 75 MW_t. O sistema proposto integra a produção simultânea de energia elétrica, água dessalinizada e hidrogênio. A metodologia baseia-se em simulações termodinâmicas do ciclo de potência utilizando o código DE-TOP/IAEA, identificação dos pontos de extração de vapor e avaliação do desempenho de diferentes tecnologias de dessalinização térmica (MED e MSF) e osmose reversa (RO), além da modelagem de um sistema DCMD no Wolfram Mathematica e de um eletrolisador PEM em Python para estimar a produção de hidrogênio a partir da eletricidade remanescente. Os resultados indicam que a configuração com múltiplas extrações de vapor permite maior flexibilidade operacional e eficiência global, com produção significativa de água e hidrogênio, e consumo elétrico específico competitivo. Conclui-se que a tri-cogeração nuclear representa uma solução promissora para regiões com escassez hídrica e demanda energética diversificada, promovendo maior sustentabilidade, segurança no suprimento de recursos essenciais e evidenciando o papel estratégico da energia nuclear na transição energética limpa.

Abstract of Undergraduate Project presented to POLI/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Engineer.

ANALYSIS OF THE TRI-COGENERATION OF ELECTRIC ENERGY,
DESALINATED WATER AND HYDROGEN GAS USING A PRESSURIZED
WATER MICRO NUCLEAR REACTOR

Guilherme Gottems

July/2025

Advisors: Su Jian

Renato Machado Cotta

Course: Nuclear Engineering

This work analyzes the technical feasibility of a tri-generation system based on the DESSAL small pressurized water nuclear reactor, with a thermal power of 75 MW_t. The proposed system integrates the simultaneous production of electricity, desalinated water, and hydrogen. The methodology is based on thermodynamic simulations of the power cycle using the DE-TOP/IAEA code, identification of steam extraction points, and performance evaluation of different thermal desalination technologies (MED and MSF) and reverse osmosis (RO). Additionally, a DCMD system is modeled in Wolfram Mathematica, and a PEM electrolyzer is implemented in Python to estimate hydrogen production from the remaining electricity. The results indicate that configurations with multiple steam extractions allow greater operational flexibility and overall efficiency, enabling significant production of water and hydrogen with competitive specific electricity consumption. It is concluded that nuclear tri-generation represents a promising solution for regions facing water scarcity and diversified energy demand, enhancing sustainability, resource supply security, and demonstrating the essential role of nuclear energy in the clean energy transition.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xiii
1 Introdução	1
1.1 Motivação	1
1.1.1 Crise Hídrica e Dessalinização	1
1.1.2 Crise Energética e Usinas Nucleares	2
1.1.3 Tri-Cogeração: Energia Elétrica, Água Dessalinizada e Hidro- gênio a partir de Reatores Nucleares	3
1.2 Objetivos	5
1.3 Organização do Trabalho	6
2 Fundamentação Teórica	7
2.1 Dessalinização	7
2.1.1 Flash em Múltiplos Estágios (MSF)	9
2.1.2 Destilação por Múltiplos Efeitos (MED)	10
2.1.3 Osmose Reversa (RO)	12
2.1.4 Destilação por Membranas (MD)	14
2.2 Produção de Hidrogênio	16
2.2.1 Formas de Produção de Hidrogênio	16
2.2.2 Eletrólise da Água	18
2.3 Cogeração Nuclear	19
2.3.1 Aspectos Gerais da Cogeração Nuclear	19
2.3.2 Casos de Estudo	20
3 Metodologia	25
3.1 DE-TOP	25
3.1.1 Acoplamento com a Dessalinização Térmica	26
3.1.2 Modelo de Cálculo e Avaliação de Desempenho	26
3.1.3 Seleção dos Pontos de Extração de Vapor	28
3.1.4 Análise de Eficiência e Consumo Elétrico Específico	29

3.1.5	Operação do DE-TOP	30
3.2	DEEP/IAEA	37
3.2.1	Operação do DEEP	38
3.3	Destilação por Membranas	43
3.3.1	Modelo Matemático	43
3.3.2	Implementação Computacional no Wolfram Mathematica . . .	54
3.4	Produção de Hidrogênio	55
3.4.1	Modelo Matemático	55
3.4.2	Código Implementado em Python	72
4	Resultados e Discussões	75
4.1	Ciclo de Potência e Pontos de Extração de Vapor	75
4.2	Destilação por Múltiplos Efeitos	80
4.3	<i>Flash Multiestágios</i>	82
4.4	Osmose Reversa	84
4.5	Destilação por Membranas por Contato Direto	87
4.6	Eletrólise da Água - Produção de Hidrogênio	92
5	Conclusões e Recomendações	98
	Referências Bibliográficas	101

Lista de Figuras

2.1	Diagrama esquemático de uma planta de MSF.	9
2.2	Diagrama esquemático de uma planta de MED.	10
2.3	Diagrama esquemático de uma planta de RO.	12
2.4	Mecanismo de dessalinização de uma planta de MD e suas diferentes configurações.	14
3.1	Tela principal do DE-TOP com as quatro etapas da simulação.	30
3.2	Layout geral do programa DE-TOP.	30
3.3	Formulário principal de entrada de dados da planta de potência.	31
3.4	Formulário para cálculo da pressão de condensação a partir da temperatura da água de resfriamento.	32
3.5	Aba de parâmetros avançados para personalização do modelo termodinâmico.	33
3.6	Resultados da simulação da planta de potência de referência.	34
3.7	Formulário de entrada para parâmetros da unidade de dessalinização térmica.	35
3.8	Tela de configuração do acoplamento térmico entre reator e dessalinização.	36
3.9	Exemplo de configuração com múltiplos pontos de extração de vapor.	36
3.10	Relatório final da simulação com acoplamento MED.	37
3.11	Tela inicial do DEEP.	39
3.12	Formulário de entrada de dados da planta de energia e da unidade de dessalinização.	40
3.13	Aba de navegação de resultados e análises.	40
3.14	Resultados numéricos e diagrama esquemático da planta de dessalinização.	41
3.15	Análise de sensibilidade dos parâmetros principais da planta de RO.	41
3.16	Aba de análise financeira do DEEP.	42
3.17	Comparação gráfica de diferentes cenários simulados no DEEP.	42
3.18	Exportação e inspeção detalhada dos resultados da simulação.	43

3.19	Representação esquemática do módulo com três fases: (a) modelo poroso para o <i>lumen</i> , (b) corte transversal das três fases do módulo, (c) modelo poroso para o <i>shell</i> [1].	44
3.20	Geometria dos modelos de meio poroso: (a) modelo para o lado <i>lumen</i> , (b) modelo para o lado <i>shell</i> . O escoamento de água ocorre da esquerda para a direita no <i>lumen</i> , e no sentido oposto no <i>shell</i> [1]. . .	45
3.21	Ilustração de metade da fibra oca. Inclui perfil de temperatura, convenção de sinais para o fluxo de vapor d'água destilada e dimensões da seção transversal da membrana [1].	50
3.22	Sistema de dessalinização com trocador de calor externo para recuperação térmica [1].	53
3.23	Fluxos mássicos no interior da célula eletrolítica PEM. Adaptado de [2].	61
3.24	Modelo de rede de resistores para o cálculo da resistência ôhmica dos eletrodos e placa. [2].	67
3.25	Transformações para simplificar o cálculo da resistência equivalente. [2].	69
3.26	Circuito simplificado para o cálculo da resistência elétrica do conjunto do eletrodo e placa. [2].	70
3.27	Esboço do conjunto circular com canais de tamanho variados e do conjunto retangular equivalente com canais de tamanho constante. [2].	71
3.28	Vista frontal dos canais do conjunto membrana-eletrodo circular. [2].	72
4.1	Esquema do ciclo de Rankine com regeneração utilizado no reator DESSAL.	76
4.2	Localização dos pontos de extração de vapor (sangrias) no ciclo de potência.	76
4.3	Tela de entrada do DE-TOP: parâmetros principais do reator DESSAL. Adaptado de [3].	78
4.4	Tela de entrada do DE-TOP: parâmetros avançados do reator DESSAL. Adaptado de [3].	79
4.5	Tela de entrada do DE-TOP: parâmetros do condensador. Adaptado de [3].	80
4.6	Curva de produção de água por MED e potência remanescente do reator DESSAL.	81
4.7	Curva de produção de água por MSF e potência remanescente do reator DESSAL.	83
4.8	Curvas de produção de água por MED e MSF e potência remanescente do reator DESSAL.	84

4.9	Curva de produção de água por RO e potência remanescente do reator DESSAL.	86
4.10	Diagrama esquemático das duas unidades de RO acopladas ao reator DESSAL.	87
4.11	Curva de produção de água por DCMD e potência remanescente do reator DESSAL.	91
4.12	Curva de produção de água pelas técnicas térmicas e potência remanescente do reator DESSAL.	92
4.13	Curvas de polarização: comparação entre dados experimentais e resultados do modelo para dois cenários.	93
4.14	Resíduos da tensão prevista pelo modelo em relação aos dados experimentais.	93
4.15	Gráfico da produção de hidrogênio com alimentação de água pelo destilado via MED a partir do ponto de extração 2 em função da densidade de corrente e da pressão no cátodo.	95
4.16	Gráfico da produção de hidrogênio com alimentação de água pelo destilado via DCMD a partir do ponto de extração 3 em função da densidade de corrente e da pressão no cátodo.	96

Lista de Tabelas

3.1	Coeficientes termodinâmicos das espécies gasosas envolvidas na eletrólise da água [4].	58
3.2	Coeficientes adimensionais para uso na equação (3.91) [2].	63
4.1	Parâmetros termodinâmicos nos pontos de extração de vapor: vazão mássica, temperatura, pressão e entalpia específica.	77
4.2	Avaliação dos pontos de extração de vapor para produção de água por MED a partir do reator DESSAL.	81
4.3	Avaliação dos pontos de extração de vapor para produção de água por MSF a partir do reator DESSAL.	82
4.4	Análise da influência da temperatura da salmoura de alimentação no processo de RO.	85
4.5	Avaliação de duas unidades de RO para produção de água dessalinizada a partir do reator DESSAL: a primeira captando água aquecida que passou pelo condensador da planta nuclear e a segunda captando água diretamente do mar.	85
4.6	Parâmetros para as simulações de DCMD, adaptado de [1]	88
4.7	Avaliação do ponto de extração de vapor 2, com eficiência ideal do trocador de calor ($\phi = 1.00$), para produção de água por DCMD a partir do reator DESSAL variando a vazão da água do lado do casco.	89
4.8	Avaliação do ponto de extração de vapor 2, com eficiência do trocador de calor ($\phi = 0.98$), para produção de água por DCMD a partir do reator DESSAL variando a vazão da água do lado do casco.	89
4.9	Avaliação do ponto de extração de vapor 3, com eficiência ideal do trocador de calor ($\phi = 1.00$), para produção de água por DCMD a partir do reator DESSAL variando a vazão da água do lado do casco.	90
4.10	Avaliação do ponto de extração de vapor 3, com eficiência do trocador de calor ($\phi = 0.98$), para produção de água por DCMD a partir do reator DESSAL variando a vazão da água do lado do casco.	90
4.11	Resultados das simulações de produção de hidrogênio a partir da água de alimentação destilada por MED e DCMD.	96

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

1.1.1 Crise Hídrica e Dessalinização

A crescente pressão sobre os recursos hídricos tem acentuado a crise global de abastecimento de água potável. Embora a Terra seja composta por cerca de 70% de água em sua superfície, apenas 2,5% corresponde à água doce, sendo que quase 80% deste volume está retido em geleiras e calotas polares. Assim, menos de 1% da água disponível é acessível para uso humano direto [5]. Combinado ao crescimento populacional, urbanização desordenada, intensificação agrícola e impactos das mudanças climáticas, este cenário tem levado mais de dois bilhões de pessoas a viverem sob estresse hídrico severo [6].

No Brasil, apesar da ampla disponibilidade hídrica em termos absolutos — cerca de 12% da água doce superficial do planeta — a distribuição é extremamente desigual. Regiões como o semiárido nordestino enfrentam escassez crônica de água, caracterizada por longos períodos de seca, baixa regularização dos cursos d'água e restrita infraestrutura hídrica. O Relatório de Conjuntura dos Recursos Hídricos no Brasil (2022) destaca que eventos extremos como secas e estiagens prolongadas têm se tornado mais frequentes e intensos, exigindo soluções estruturais e tecnológicas para garantir o abastecimento humano e a segurança hídrica regional [7].

Nesse contexto, a dessalinização emerge como uma alternativa tecnológica relevante, particularmente em áreas costeiras, insulares e regiões semiáridas. O processo de dessalinização consiste na separação dos sais dissolvidos presentes em águas salobras ou salinas, tornando-as adequadas ao consumo humano, agrícola ou industrial. Trata-se de uma solução que transforma um recurso abundante - a água do mar - em fonte viável de água potável [8].

Atualmente, as tecnologias de dessalinização dividem-se, em linhas gerais, entre processos térmicos e processos por membrana. Dentre os térmicos, destacam-se a

destilação por múltiplos estágios (MSF), a destilação por múltiplos efeitos (MED) e a compressão de vapor (VC). Esses métodos baseiam-se na evaporação da água e subsequente condensação, sendo preferencialmente aplicados em regiões com abundância de calor residual ou acesso a fontes térmicas de baixo custo [8]. Já a osmose reversa (RO), principal tecnologia por membrana, responde atualmente por mais de 60% da capacidade mundial de dessalinização, graças à sua maior eficiência energética e viabilidade em plantas modulares [5].

Apesar dos avanços técnicos e da expansão global do setor, os desafios operacionais e ambientais da dessalinização permanecem significativos. Os altos custos energéticos, a emissão de gases de efeito estufa em sistemas alimentados por combustíveis fósseis e a disposição inadequada da salmoura concentrada no meio ambiente marinho são questões que demandam soluções integradas. Entre as alternativas em desenvolvimento, destacam-se os sistemas híbridos, que combinam diferentes tecnologias, e o aproveitamento de fontes renováveis de energia, como solar e eólica [5, 9].

Nesse sentido, a aplicação da energia nuclear tem ganhado destaque como uma opção promissora para suprir a demanda energética dos processos de dessalinização em larga escala. Reatores nucleares, especialmente os do tipo modular (SMRs), são capazes de fornecer calor e eletricidade de forma contínua e com baixa emissão de carbono, viabilizando plantas de cogeração em regiões costeiras com elevada demanda hídrica e energética [9].

Assim, a dessalinização, especialmente quando integrada a fontes energéticas limpas e seguras, representa uma estratégia complementar fundamental para mitigar os efeitos da escassez hídrica e promover o desenvolvimento sustentável em regiões vulneráveis.

1.1.2 Crise Energética e Usinas Nucleares

Paralelamente à crise hídrica, o mundo enfrenta uma profunda crise energética, agravada pela crescente demanda por eletricidade, pela volatilidade dos preços de combustíveis fósseis e pelas pressões da transição energética. A busca por soluções sustentáveis, resilientes e de baixa emissão de carbono tem levado à reavaliação do papel da energia nuclear no cenário energético global [10].

A energia nuclear representa atualmente cerca de 10% da eletricidade gerada mundialmente, sendo utilizada em mais de 30 países como fonte estável e de alta densidade energética. Ao contrário de fontes intermitentes como a solar e a eólica, a geração nuclear não depende de condições climáticas, o que a torna essencial para garantir a estabilidade das redes elétricas e a segurança energética dos sistemas nacionais [11, 12].

Além disso, as usinas nucleares contribuem de forma significativa para a mitigação das mudanças climáticas. De acordo com a Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA), a geração nuclear evitou a emissão de cerca de 70 Gt de CO₂ nas últimas cinco décadas. As projeções indicam que, para alcançar as metas climáticas do Acordo de Paris, a capacidade instalada de energia nuclear poderá ter que dobrar até 2050, inclusive com maior participação de reatores modulares pequenos (SMRs) em sistemas energéticos descentralizados [12].

Os SMRs vêm ganhando destaque por oferecerem maior flexibilidade operacional, menor tempo de construção, modularidade e maior segurança intrínseca. Esses reatores são particularmente atrativos para aplicações combinadas de eletricidade, calor e hidrogênio, em regiões com infraestrutura energética limitada ou alta variabilidade climática [13]. Além disso, seu uso em projetos de smart grids e cidades inteligentes fortalece o papel da energia nuclear em uma matriz energética moderna e multifuncional.

Do ponto de vista geopolítico e econômico, a dependência de combustíveis fósseis importados tem colocado diversos países em situação de vulnerabilidade energética. A energia nuclear, por utilizar combustível de alta densidade e com longos ciclos de reabastecimento, oferece uma alternativa estratégica para reduzir a exposição a choques de oferta e instabilidades de preços no mercado internacional [14].

Portanto, a expansão do uso da energia nuclear no contexto da transição energética não se limita à geração elétrica tradicional, mas envolve seu papel como vetor de descarbonização em múltiplos setores, desde a cogeração industrial até a produção de hidrogênio verde e a dessalinização de água. Sua capacidade de integração com outras fontes, bem como de fornecer eletricidade de base de forma segura, faz da energia nuclear uma aliada estratégica para a construção de um futuro energético limpo, resiliente e sustentável [11, 13].

Diante desses desafios interligados, soluções integradas que aliem segurança hídrica, energética e sustentabilidade ambiental ganham cada vez mais relevância. Nesse contexto, a tri-cogeração nuclear surge como uma proposta promissora, conforme explorado a seguir.

1.1.3 Tri-Cogeração: Energia Elétrica, Água Dessalinizada e Hidrogênio a partir de Reatores Nucleares

Diante da coexistência de crises hídricas e energéticas, surge a necessidade de soluções integradas que combinem segurança no abastecimento com sustentabilidade ambiental. A crescente demanda por soluções integradas que respondam simultaneamente às necessidades de segurança energética, hídrica e ambiental tem impulsionado o conceito de tri-cogeração a partir de reatores nucleares. Essa abordagem

consiste no uso do calor e/ou eletricidade gerados por um reator para produzir, de forma acoplada, energia elétrica, água dessalinizada e hidrogênio, proporcionando maior eficiência no uso dos recursos energéticos e facilitando a descarbonização de múltiplos setores.

A produção simultânea de energia elétrica e água potável em sistemas de cogeração nuclear vem sendo estudada há décadas, com destaque para iniciativas que utilizam o calor residual do reator para acionar processos térmicos de dessalinização, como o Multi-Effect Distillation (MED) e o Multi-Stage Flash (MSF) [9, 15]. Recentemente, esse conceito tem sido estendido para incluir a produção de hidrogênio, formando sistemas de tri-cogeração capazes de gerar eletricidade, água e combustível limpo a partir de uma única fonte primária [16, 17].

A viabilidade técnica e econômica desses sistemas é fortemente influenciada pelo tipo de reator utilizado, pela tecnologia de dessalinização adotada e pelo método de produção de hidrogênio escolhido. Estudos apontam que os Small Modular Reactors (SMRs), devido à sua flexibilidade operacional e capacidade de carga variável, são particularmente adequados para aplicações híbridas, como acoplamento com eletrolisadores de alta temperatura (HTSE) e ciclos termoquímicos, além de unidades de dessalinização térmica [18, 19].

O projeto brasileiro DESSAL, por exemplo, explora o uso de um reator de pequeno porte de tecnologia nacional para atender, simultaneamente, demandas de energia elétrica e dessalinização de água, reforçando seu potencial para aplicação em regiões semiáridas do Nordeste [20, 21]. O presente trabalho tomará o reator DESSAL como planta nuclear de referência para o estudo da tri-cogeração, investigando sua capacidade de integração com processos de dessalinização térmica e RO e produção de hidrogênio via eletrólise, a partir da energia elétrica e térmica geradas pelo sistema. A integração de um sistema de produção de hidrogênio nesse tipo de planta pode ampliar ainda mais sua utilidade estratégica, fornecendo um vetor energético versátil e de baixo carbono para aplicações industriais e mobilidade.

Além de vantagens técnicas, a tri-cogeração nuclear apresenta benefícios econômicos e ambientais relevantes, como o aproveitamento de sinergias térmicas, redução de custos marginais de produção, menor emissão de gases de efeito estufa e maior resiliência frente à intermitência de fontes renováveis [22, 23]. Tais características colocam a tri-cogeração como uma alternativa promissora para transições energéticas integradas, especialmente em contextos onde a confiabilidade do suprimento e a multifuncionalidade da planta são essenciais. A seguir, são apresentados os objetivos deste trabalho, que visam avaliar, por meio de simulações computacionais, o desempenho integrado da planta DESSAL na produção conjunta de eletricidade, água potável e hidrogênio.

1.2 Objetivos

O presente trabalho tem como objetivo geral analisar a viabilidade técnica da tri-cogeração de energia elétrica, água dessalinizada e gás hidrogênio a partir de um microrreator nuclear de água pressurizada (PWR), por meio da simulação termodinâmica do circuito secundário e do acoplamento subsequente de sistemas de dessalinização e eletrólise.

A proposta insere-se no contexto de soluções nucleares multifuncionais, capazes de atender simultaneamente às demandas por eletricidade, segurança hídrica e produção de vetores energéticos limpos. Neste escopo, o estudo busca contribuir para o desenvolvimento de arquiteturas tecnológicas integradas com potencial de aplicação em regiões costeiras, semiáridas ou isoladas, caracterizadas por vulnerabilidade hídrica e baixa confiabilidade no suprimento energético.

Os objetivos específicos do trabalho estão estruturados da seguinte forma:

- Simular o ciclo termodinâmico do circuito secundário do micro reator PWR, modelando um ciclo de Rankine composto com regeneração, com o intuito de determinar a potência elétrica líquida máxima gerável de forma contínua. A simulação permitirá a análise dos parâmetros operacionais, da eficiência térmica global e da distribuição de energia disponível para uso externo;
- Investigar o acoplamento do reator nuclear com diferentes tecnologias de dessalinização, incluindo osmose reversa (RO), destilação por múltiplos efeitos (MED), destilação flash multiestágios (MSF) e destilação por membranas por contato direto (DCMD). A análise contemplará as demandas energéticas (térmica e elétrica) de cada método, suas eficiências específicas, condições operacionais e viabilidade de integração com o sistema gerador;
- Avaliar a produção de gás hidrogênio por meio da eletrólise da água utilizando a energia elétrica excedente gerada pelo ciclo nuclear, com foco na tecnologia de eletrólise por membrana de troca de prótons (PEM). O estudo considerará a conversão da água dessalinizada em hidrogênio limpo e estimará a taxa de produção horária com base na energia disponível;
- Comparar o desempenho energético e a integração entre os subsistemas envolvidos na tri-cogeração, verificando a compatibilidade térmica e elétrica entre eles, bem como os possíveis gargalos operacionais e perdas energéticas.

Dessa forma, o trabalho visa demonstrar o potencial de pequenos reatores como plataformas energéticas compactas e versáteis, contribuindo não apenas para a geração elétrica, mas também para o fortalecimento da segurança hídrica e a transição energética limpa.

1.3 Organização do Trabalho

Este trabalho contém 5 capítulos, incluindo a presente seção de introdução.

O capítulo 2 apresenta a fundamentação teórica necessária para a compreensão do tema, abordando as principais tecnologias de dessalinização, as diferentes rotas de produção de hidrogênio e os conceitos associados à cogeração nuclear.

O capítulo 3 descreve a metodologia adotada para a análise da tri-cogeração, detalhando os modelos e ferramentas computacionais utilizados para simular o ciclo termodinâmico do microrreator nuclear, os processos de dessalinização por MED, MSF, RO e DCMD, e a produção de hidrogênio por eletrólise do tipo PEM.

O capítulo 4 apresenta os resultados obtidos a partir das simulações realizadas, discutindo o desempenho dos diferentes arranjos de cogeração considerados. São avaliadas a eficiência térmica e elétrica do sistema, a produção de água potável e de hidrogênio, e os fluxos energéticos entre os subsistemas.

Por fim, o capítulo 5 traz as considerações finais do trabalho, destacando as conclusões mais relevantes e as perspectivas para futuras aplicações da tri-cogeração nuclear em contextos reais.

Capítulo 2

Fundamentação Teórica

2.1 Dessalinização

A crescente escassez de recursos hídricos potáveis tem impulsionado o desenvolvimento e a implantação de tecnologias de dessalinização como alternativa viável para o suprimento de água em regiões áridas, semiáridas ou de alta densidade populacional. A dessalinização é o processo de remoção de sais e outros minerais dissolvidos da água do mar ou de águas salobras, produzindo água doce apta para consumo humano, uso agrícola ou industrial. As tecnologias de dessalinização são geralmente classificadas em dois grandes grupos: os processos térmicos, que envolvem mudanças de fase da água (evaporação e condensação), e os processos baseados em membranas, que operam por separação física, muitas vezes impulsionada por gradientes de pressão ou potencial elétrico [17, 24, 25].

A escolha da tecnologia adequada depende de uma série de fatores, como a salinidade da água de alimentação, a disponibilidade de fontes térmicas ou elétricas, os requisitos de qualidade da água tratada, os custos operacionais e de capital, as condições ambientais locais e os objetivos da planta [26]. Embora a osmose reversa represente a maior parcela da capacidade instalada no mundo, os processos térmicos ainda são amplamente utilizados, especialmente em regiões onde há disponibilidade de calor residual ou subsídios energéticos [5].

No Brasil, a aplicação da dessalinização permanece concentrada em sistemas de pequeno porte, especialmente em comunidades rurais do Semiárido nordestino. Esses sistemas, apesar de modestos em escala, representam uma estratégia importante para garantir segurança hídrica em regiões sujeitas a secas prolongadas e escassez de infraestrutura de abastecimento convencional [8]. Entretanto, a ampliação dessas tecnologias exige soluções para desafios como o custo energético, a durabilidade dos componentes e o descarte adequado do rejeito salino.

Um dos principais entraves à expansão da dessalinização é justamente a gestão

ambiental da salmoura residual, principalmente nos sistemas baseados em membranas. O lançamento indiscriminado de rejeitos salinos pode causar sérios impactos ambientais, como a salinização de corpos hídricos e do solo, afetando a biodiversidade e os usos múltiplos da água [27]. Tais impactos reforçam a necessidade de estratégias integradas que considerem reuso, concentração de rejeitos ou integração com outras cadeias produtivas.

Dada a natureza energética da dessalinização — com consumo significativo de energia térmica ou elétrica, a depender do processo —, cresce o interesse por sistemas de cogeração capazes de integrar a produção de água potável com outras aplicações úteis. A energia nuclear, em especial, tem se destacado como fonte estável, limpa e de alta densidade energética, com potencial para suprir tanto a energia térmica quanto elétrica necessária para processos de dessalinização [24, 25]. A integração entre reatores nucleares e tecnologias de dessalinização pode contribuir para melhorar a eficiência exergética dos sistemas, reduzir custos operacionais e ampliar a segurança hídrica em diversas regiões do planeta [28, 29].

Documentos técnicos da IAEA apontam que o acoplamento de plantas nucleares com processos de dessalinização deve ser considerado como uma das principais aplicações não elétricas da energia nuclear nas próximas décadas. O relatório NP-T-1.17 destaca, por exemplo, que pequenos reatores modulares (SMRs) podem operar de forma contínua e segura, fornecendo calor de baixa e média temperatura para plantas térmicas ou energia elétrica para unidades por membrana [15]. Já o relatório TRS 410 ressalta que, em países com alta pressão por demanda hídrica e eletricidade, a cogeração nuclear pode trazer benefícios econômicos, sociais e ambientais significativos [9].

Neste contexto, a análise técnica e econômica de tecnologias de dessalinização acopladas a reatores nucleares deve considerar não apenas a eficiência e o rendimento de cada processo, mas também a flexibilidade operacional, o impacto ambiental, a confiabilidade da produção e a sinergia com outras aplicações, como a geração de energia elétrica e a produção de hidrogênio. As subseções a seguir apresentam as principais tecnologias de dessalinização com potencial de integração a sistemas de cogeração nuclear, organizadas em processos térmicos e de membranas.

2.1.1 Flash em Múltiplos Estágios (MSF)

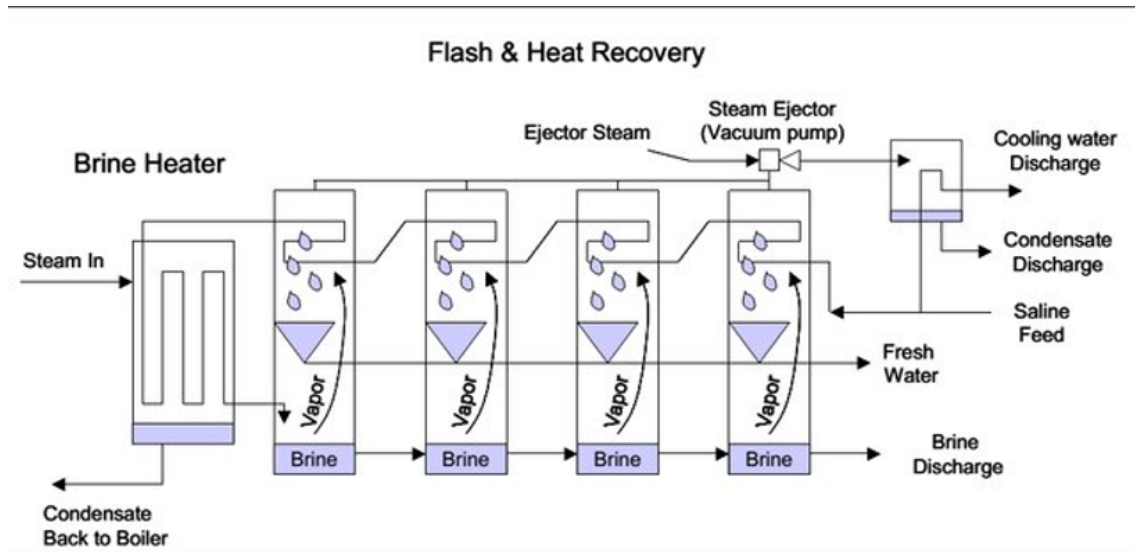


Figura 2.1: Diagrama esquemático de uma planta de MSF.

O processo de destilação por múltiplos estágios com evaporação rápida, conhecido como Multi-Stage Flash (MSF), mostrado na Figura 2.1, é uma das tecnologias térmicas de dessalinização mais consolidadas e amplamente utilizadas, especialmente em países do Oriente Médio. Seu princípio de funcionamento baseia-se na súbita vaporização (“flash”) de água do mar previamente aquecida ao ser introduzida em uma série de câmaras com pressões decrescentes. Nestas câmaras, parte da água instantaneamente entra em ebulição, liberando vapor que é condensado em trocadores de calor internos, produzindo água doce [5, 24, 25].

Cada estágio do sistema MSF é responsável por uma parte da produção total de destilado. A água de alimentação é primeiramente pré-aquecida em trocadores de calor e, após atingir temperaturas entre 90°C e 120°C, entra sucessivamente nos estágios flash, onde ocorre a evaporação instantânea parcial devido à redução controlada de pressão em cada estágio subsequente [8]. O vapor formado é condensado em trocadores resfriados pela própria água de entrada, promovendo a recuperação térmica e aumentando a eficiência global do processo [5].

Plantas MSF modernas alcançam índices de performance (Gain Output Ratio - GOR) entre 6 e 10, o que representa a quantidade de água produzida por unidade de vapor consumido. Esse rendimento é geralmente menor que o das plantas de múltiplo efeito (MED), mas a simplicidade operacional e a robustez das instalações tornam o MSF atrativo para aplicações de larga escala com alta confiabilidade operacional [9, 29].

Apesar de sua confiabilidade, o processo MSF apresenta desafios associados à eficiência energética, ao elevado consumo térmico e à necessidade de manutenção de

grandes volumes de água em altas temperaturas. Além disso, as instalações requerem áreas extensas, consumo de materiais resistentes à corrosão e controle rigoroso de incrustações nos trocadores de calor [26]. O controle da qualidade da água de alimentação e o pré-tratamento adequado são cruciais para evitar a deposição de sais e o comprometimento do desempenho da planta [8].

Do ponto de vista energético, a destilação MSF demanda grande quantidade de calor de baixa qualidade (temperaturas em torno de 100°C), o que a torna uma candidata ideal para acoplamento com fontes de calor residual, como é o caso de reatores nucleares. Relatórios técnicos da IAEA sugerem que o acoplamento entre reatores de pequeno porte e plantas MSF pode viabilizar uma produção sustentável e contínua de água dessalinizada, com boa sinergia térmica e flexibilidade operacional [9, 15].

Por fim, vale destacar que a integração da tecnologia MSF com sistemas de cogeração nuclear representa uma oportunidade estratégica de aplicação da energia nuclear para fins não elétricos. Essa abordagem pode contribuir significativamente para aumentar a resiliência hídrica de regiões áridas ou isoladas, além de melhorar a eficiência exergética global dos sistemas nucleares.

2.1.2 Destilação por Múltiplos Efeitos (MED)

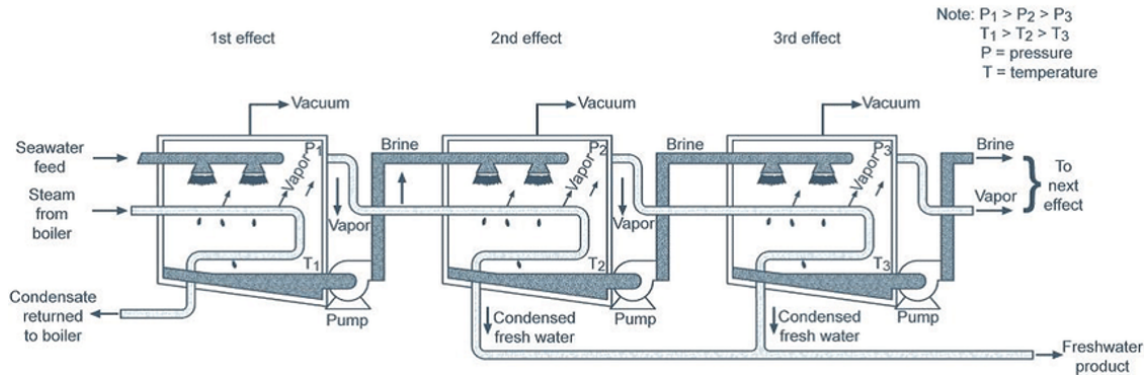


Figura 2.2: Diagrama esquemático de uma planta de MED.

A tecnologia de destilação por múltiplos efeitos (MED), mostrada na Figura 2.2, consiste em uma série de câmaras ou “efeitos” onde o vapor gerado em um estágio é utilizado como fonte de calor para o estágio subsequente, promovendo a ebulição progressiva da água do mar sob pressões decrescentes. Isso permite a utilização eficiente da energia térmica, reduzindo a necessidade de fornecimento contínuo de calor externo após o primeiro estágio [5, 8].

Em sistemas MED típicos, a água de alimentação é pulverizada sobre a superfície externa de tubos aquecidos internamente por vapor, formando uma película que

facilita a evaporação. O vapor gerado em cada estágio é então condensado em trocadores de calor, liberando energia para evaporar parte da água no estágio seguinte. Esse processo se repete ao longo dos efeitos, que usualmente variam de 8 a 16 em instalações comerciais [8, 26].

Uma das vantagens marcantes da MED em relação à MSF é sua maior eficiência térmica, refletida em maiores índices de ganho (GOR), além de menor temperatura de operação (60-75°C), o que favorece o uso de fontes térmicas de baixa qualidade e reduz a tendência de incrustações [24]. Estudos também indicam que plantas MED apresentam menor consumo específico de energia térmica, viabilizando seu acoplamento a fontes como energia solar, calor residual industrial ou energia nuclear [30].

A tecnologia MED é particularmente adequada para cogeração com reatores nucleares, sobretudo reatores modulares pequenos (SMRs), cuja faixa de operação térmica é compatível com os requisitos do processo. Relatórios da IAEA destacam que plantas MED acopladas a SMRs podem oferecer maior modularidade, segurança e menor impacto ambiental [9].

A análise termoenergética de sistemas MED em configuração de alimentação paralela, como a estrutura horizontal HTTF (horizontal tube, thin-film), evidencia desempenho eficiente e economia energética relevante. Essa configuração permite boa transferência de calor e recirculação otimizada dos concentrados, fatores que contribuem para a viabilidade técnica da MED mesmo em condições tropicais [30].

Além disso, a crescente integração da MED com fontes renováveis, especialmente energia solar, tem impulsionado pesquisas em plantas híbridas, com destaque para arranjos combinados com bombas de calor, sistemas de adsorção e compressão térmica de vapor. Essa tendência reforça o caráter versátil e eficiente da MED, consolidando-a como uma das opções mais promissoras de dessalinização térmica de grande porte [26].

2.1.3 Osmose Reversa (RO)

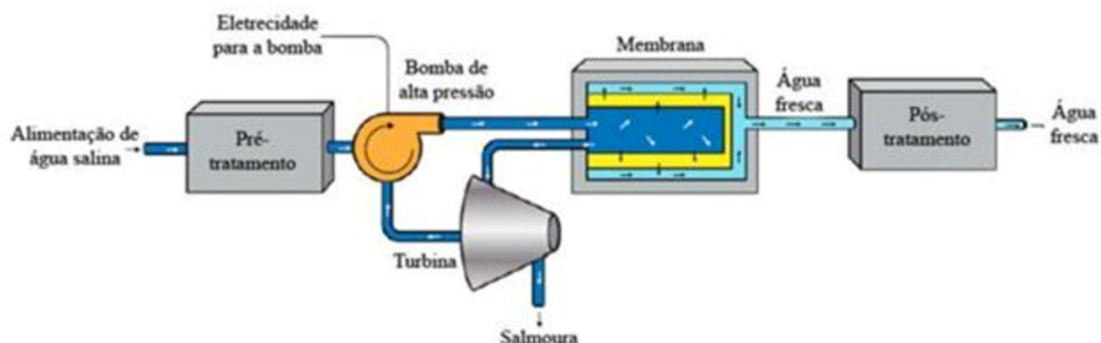


Figura 2.3: Diagrama esquemático de uma planta de RO.

A osmose reversa (RO), processo conforme a Figura 2.3, é atualmente a tecnologia de dessalinização mais amplamente utilizada no mundo, tanto em número de instalações quanto em capacidade instalada. Segundo dados da IAEA, mais de 60% das plantas de dessalinização globais empregam RO, especialmente em aplicações urbanas e industriais que exigem água de alta qualidade com baixos teores de salinidade residual [9]. Seu princípio de funcionamento baseia-se na aplicação de uma pressão superior à pressão osmótica de uma solução salina, forçando a água a atravessar uma membrana semipermeável que retém os íons dissolvidos [5, 26].

As membranas utilizadas no processo de RO são usualmente compostas de materiais poliméricos e dispostas em configurações helicoidais ou de fibra oca, encapsuladas em recipientes pressurizados. A pressão requerida depende da salinidade da água de alimentação, variando de 17 a 27 bar para águas salobras e de 54 a 80 bar para água do mar [8]. O sistema inclui também etapas de pré-tratamento (filtração e ajuste químico), além de pós-tratamento para estabilização da água produzida.

Apesar de sua eficiência em remover sais, vírus e bactérias, o processo de osmose reversa gera um subproduto: o rejeito salino concentrado. O manejo inadequado desse efluente pode ocasionar impactos ambientais significativos, como salinização de corpos hídricos e do solo. A elevada carga iônica do rejeito, se descartada em rios ou utilizada indiscriminadamente em irrigação, pode comprometer a qualidade do solo e das águas subterrâneas, além de afetar a vegetação nativa e cultivos agrícolas [27].

Diversas estratégias de mitigação têm sido estudadas para a gestão do rejeito, incluindo bacias de evaporação, uso de plantas halófitas, cristalização solar de sais e injeção profunda em aquíferos confinados [27]. Entretanto, essas alternativas dependem de variáveis climáticas, disponibilidade de terreno e viabilidade econômica. No Brasil, a aplicação da RO é amplamente disseminada no Semiárido nordestino,

como parte de políticas públicas voltadas à segurança hídrica. O Programa Água Doce (PAD), instituído pelo Ministério do Meio Ambiente em 2004, foi responsável pela instalação de centenas de sistemas de dessalinização baseados em RO em comunidades rurais da região. Esse programa representa uma das principais ações estruturantes de democratização do acesso à água tratada em áreas críticas de escassez hídrica [21].

Apesar de seus benefícios sociais, a maioria desses sistemas opera com baixa eficiência energética e enfrenta dificuldades na manutenção, descarte do concentrado e capacitação técnica local. Além disso, a ausência de integração entre os sistemas RO e outras fontes de energia renovável ou cogeração limita seu desempenho sustentável em longo prazo [21].

O baixo consumo energético específico da RO — em torno de 3–6 kWh/m³ — a torna atrativa para acoplamento com fontes renováveis e sistemas de cogeração elétrica. A IAEA destaca que, embora a RO não requeira calor, sua demanda elétrica constante pode ser suprida por reatores nucleares em regimes de carga base, principalmente se integrados a sistemas híbridos de dessalinização que combinem processos térmicos e por membranas [15].

O desenvolvimento de novas membranas de alta performance, associadas a sistemas de recuperação de energia e controle automatizado, tem ampliado a viabilidade da RO em larga escala, mantendo a qualidade da água produzida com redução dos custos operacionais [26]. A tecnologia, portanto, representa uma solução robusta, escalável e tecnicamente madura para a dessalinização de águas de diferentes graus de salinidade, sendo fundamental em estratégias de segurança hídrica e uso racional de recursos naturais.

2.1.4 Destilação por Membranas (MD)

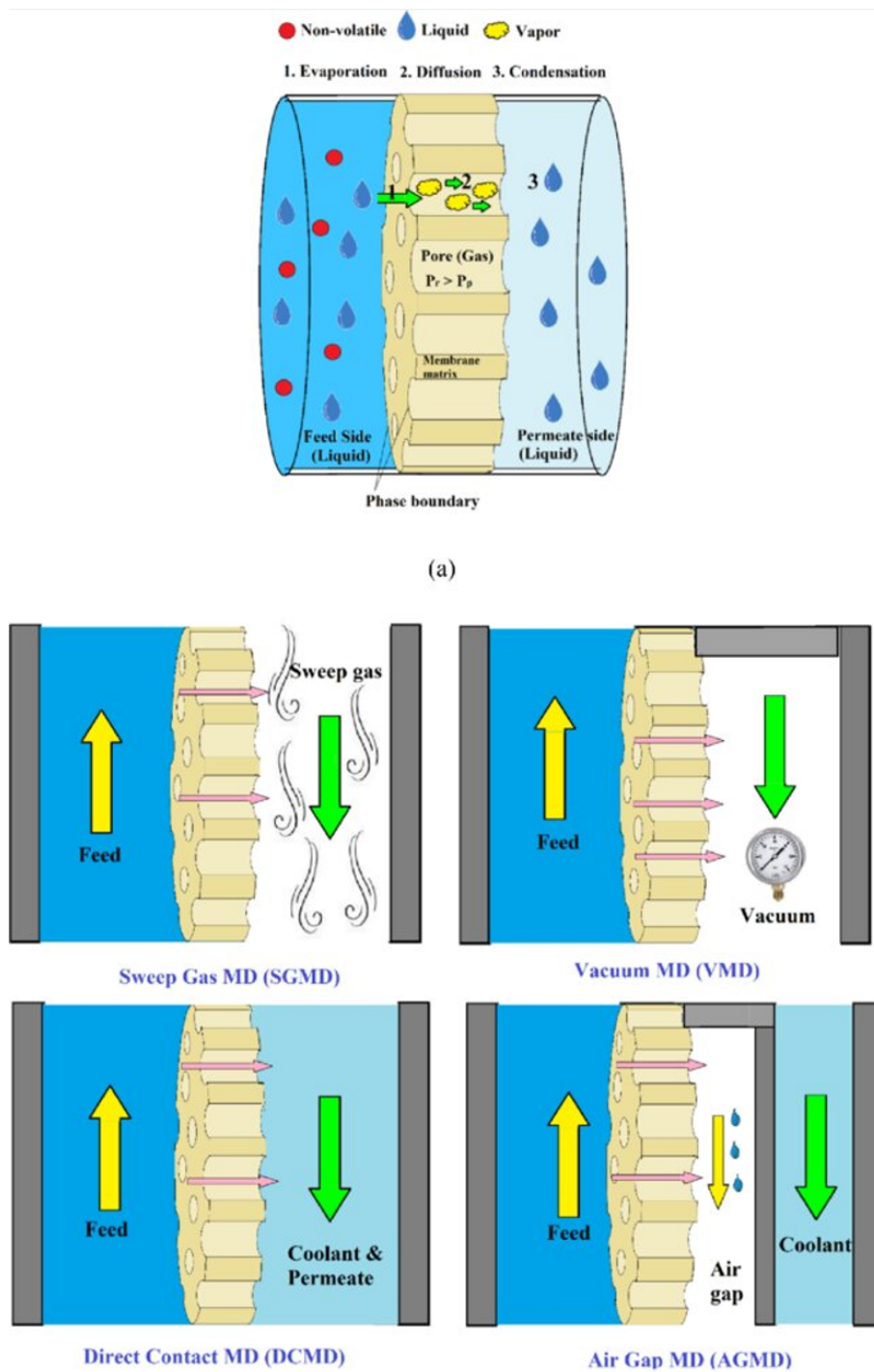


Figura 2.4: Mecanismo de dessalinização de uma planta de MD e suas diferentes configurações.

A destilação por membranas (MD) é uma técnica térmica emergente de separação, na qual uma membrana hidrofóbica microporosa atua como barreira física, permitindo a passagem do vapor d'água enquanto impede a transferência da fase líquida. O processo é impulsionado por uma diferença de pressão de vapor entre o lado da alimentação aquecida e o lado do permeado resfriado, viabilizando o transporte de vapor através dos poros da membrana e sua subsequente condensação [31–34]. A Figura 2.4 ilustra o processo de MD e as diferentes configurações que podem ser adotadas.

Entre suas principais vantagens, destacam-se a alta taxa de rejeição de sais e contaminantes não-voláteis, operação a pressões próximas à atmosférica, compatibilidade com fontes de calor de baixa qualidade (como rejeitos térmicos ou energia solar), menor agressividade química sobre os materiais e possibilidade de obtenção de água com elevada pureza. Essas características tornam a MD atrativa para aplicações em sistemas descentralizados, ambientes isolados e processos de cogeração com fontes térmicas alternativas [20, 21, 34].

As principais configurações de MD incluem a destilação por membrana de contato direto (DCMD), por membrana com espaço de ar (AGMD), com arraste gasoso (SGMD) e a vácuo (VMD). A DCMD destaca-se pela simplicidade construtiva, sendo amplamente utilizada em estudos experimentais. Uma das referências clássicas sobre o tema oferece uma análise abrangente da evolução da MD, abordando critérios para seleção de membranas, resistências térmicas e difusivas, bem como os efeitos da polarização de temperatura e concentração [34].

No contexto brasileiro, avanços significativos têm ocorrido no âmbito do Lab-MEMS da COPPE/UFRJ, com destaque para estudos experimentais e numéricos que demonstraram o desempenho de membranas comerciais de PVDF, PE e PTFE em módulos DCMD e AGMD, validando modelos termohidráulicos de transferência de calor e massa [1, 35, 36]. A análise do comportamento térmico e da performance de membranas com diferentes porosidades, espessuras e ângulos de contato reforça a importância do equilíbrio entre eficiência térmica e fluxo permeado. Membranas mais finas tendem a apresentar maior vazão, mas sofrem com perdas térmicas superiores. Já as mais espessas reduzem o fluxo, mas melhoram o isolamento térmico e evitam o molhamento da membrana [33, 34].

O consumo térmico específico da MD é superior ao da osmose reversa, porém seu consumo elétrico é notavelmente inferior. Essa característica permite seu acoplamento com fontes de calor residual de reatores nucleares. Relatórios da IAEA destacam o potencial da MD em cogeração com SMRs, dada sua compatibilidade com calor de baixa temperatura [9, 15].

Propostas de integração da MD ao circuito secundário do projeto DESSAL visam o aproveitamento do calor rejeitado do reator para produção de água dessalinizada,

aliando segurança hídrica à eficiência energética. Estudos recentes discutem estratégias de integração entre MD e reatores nucleares modulares, enfatizando o potencial da tecnologia como componente central em sistemas de cogeração de água potável e hidrogênio [20, 21].

A viabilidade da operação contínua de sistemas MD depende da durabilidade das membranas e da resistência ao molhamento [1, 36]. Além disso, a eficiência global do processo pode ser aumentada por meio de estratégias de recuperação térmica e controle de intrusão líquida [33]. A literatura internacional aponta uma tendência crescente de aplicação da MD em plantas híbridas com fontes renováveis ou calor residual, com vistas à maximização da eficiência exergética e à redução do impacto ambiental [31].

Diante desse panorama, a integração da MD com sistemas nucleares compactos — como o reator DESSAL — desponta como alternativa promissora para a cogeração de água potável em cenários de alta vulnerabilidade hídrica e baixa disponibilidade energética.

2.2 Produção de Hidrogênio

2.2.1 Formas de Produção de Hidrogênio

A produção de hidrogênio pode ser realizada por diferentes rotas tecnológicas, que variam quanto à fonte de energia utilizada, aos insumos empregados e aos impactos ambientais associados. As tecnologias convencionais dominam o mercado global, com destaque para métodos baseados em fontes fósseis, embora as alternativas renováveis e nucleares venham ganhando relevância diante dos compromissos de descarbonização e sustentabilidade.

a) Rotas a partir de combustíveis fósseis: A reforma a vapor do metano (SMR — *Steam Methane Reforming*) é atualmente a tecnologia mais empregada para a produção de hidrogênio, especialmente em processos industriais como a fabricação de amônia e metanol. Esse método utiliza gás natural como matéria-prima, promovendo a quebra das moléculas de hidrocarbonetos em presença de vapor de água para gerar hidrogênio e dióxido de carbono. Embora apresente elevada maturidade tecnológica e baixo custo de produção, a SMR é intensiva em emissões de gases de efeito estufa [37, 38].

Outras alternativas fósseis incluem a gasificação de carvão ou biomassa, processo que envolve a conversão termoquímica de materiais carbonáceos em gás de síntese rico em H_2 , e a reforma autotérmica, que combina parcialmente oxidação e reforma catalítica. Essas rotas, no entanto, também enfrentam desafios ambientais e logísticos significativos [16].

b) Rotas baseadas em eletrólise da água: A eletrólise é um processo eletroquímico que separa a água em hidrogênio e oxigênio mediante a aplicação de corrente elétrica. Quando a eletricidade utilizada provém de fontes renováveis ou nucleares, trata-se de uma forma de produção de hidrogênio com baixíssimo impacto ambiental. As principais variantes incluem:

- *Eletrólise alcalina:* tecnologia madura e amplamente utilizada comercialmente, emprega eletrodos separados por uma solução aquosa de KOH ou NaOH. Apresenta custos operacionais relativamente baixos, mas resposta lenta a variações de carga.
- *Eletrólise por membrana de troca de prótons (PEM):* utiliza membranas poliméricas sólidas e permite altas densidades de corrente, operação dinâmica e maior compactidade. É adequada para acoplamento com fontes intermitentes e nucleares [2, 39].
- *Eletrólise por óxido sólido (SOEC):* opera em temperaturas elevadas (600–850 °C), aproveitando calor para reduzir o consumo elétrico total. Possui potencial de alta eficiência, mas ainda enfrenta desafios de durabilidade e viabilidade econômica em larga escala [18, 23].

c) Rotas termoquímicas de alta temperatura: Esses processos utilizam calor para impulsionar reações químicas cíclicas que produzem hidrogênio a partir da água. O ciclo iodo-enxofre (I-S), por exemplo, requer temperaturas acima de 800 °C, sendo viável apenas com reatores nucleares de alta temperatura (HTGRs). Embora promissores em termos de eficiência e ausência de emissões, esses ciclos ainda se encontram em fase de desenvolvimento tecnológico [37, 40].

d) Tecnologias emergentes: Diversas abordagens em fase de pesquisa buscam alternativas mais eficientes e sustentáveis para a produção de hidrogênio. Entre elas destacam-se a fotocatalise, que utiliza luz solar para dividir a molécula de água com o auxílio de catalisadores semicondutores, e a pirólise de gás natural ou biomassa, que produz hidrogênio com emissão reduzida de CO₂ [38].

e) Integração com fontes não convencionais de água: O uso de água não potável, como salobra, residual ou dessalinizada, tem sido investigado como solução complementar para produção de hidrogênio em contextos de escassez hídrica. Estudos recentes propõem o uso combinado de tecnologias de separação por membranas (como MD) com eletrólise, promovendo integração térmica e hídrica em plantas sustentáveis [41].

O conjunto dessas rotas tecnológicas reflete um cenário em transição, no qual a diversificação das fontes energéticas e a sinergia com setores estratégicos — como o

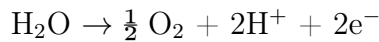
nuclear e o de dessalinização — assumem papel central para viabilizar uma economia do hidrogênio de baixo carbono em escala global [23].

2.2.2 Eletrólise da Água

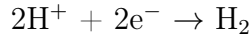
Entre as diversas rotas de produção de hidrogênio com baixa emissão de carbono, a eletrólise da água se destaca por sua versatilidade e sinergia com fontes de energia limpa, como a nuclear. Dentre as tecnologias eletrolíticas existentes, a eletrólise por membrana de troca de prótons (PEM — *Proton Exchange Membrane*) foi a opção escolhida neste trabalho devido à sua compatibilidade com geração elétrica estável, elevada eficiência, operação dinâmica e adequação ao uso de água dessalinizada de alta pureza. Esta seção apresenta seu funcionamento, vantagens e limitações.

A célula eletrolítica PEM é composta por dois eletrodos (ânodo e cátodo) separados por uma membrana polimérica sólida, geralmente de Nafion. Essa membrana atua como eletrólito, permitindo a condução de prótons do ânodo ao cátodo e impedindo a difusão dos gases gerados. As reações que ocorrem na célula são:

- **Ânodo (oxidação da água):**



- **Cátodo (redução de prótons):**



A operação típica ocorre em temperaturas entre 50°C e 80°C e pressões de até 30 bar, com eficiências elétricas superiores a 60% e hidrogênio de pureza acima de 99,999% [2, 39].

Entre as principais vantagens dos eletrolisadores PEM, destacam-se:

- Alta densidade de corrente, permitindo maior produção por unidade de área;
- Start-up rápido e operação a frio, ideal para integração com fontes variáveis ou nucleares;
- Design compacto e modular, adaptável a aplicações descentralizadas;
- Produção de hidrogênio de alta pureza com baixa contaminação cruzada.

Por outro lado, desafios tecnológicos persistem, como a durabilidade limitada das membranas sob condições de operação agressivas e o custo elevado dos eletrocatalisadores à base de metais nobres, como platina e irídio [2, 18].

No contexto da tri-cogeração analisada neste trabalho, os eletrolisadores PEM demonstram-se particularmente adequados. Sua operação eficiente com eletricidade

de base, sua resposta dinâmica e sua compatibilidade com água dessalinizada proveniente de processos térmicos os tornam ideais para integração com pequenos reatores nucleares modulares. A literatura especializada aponta diversas sinergias potenciais, incluindo flexibilidade de carga, segurança energética e elevada eficiência exergética [18, 39].

Os modelos computacionais utilizados neste trabalho baseiam-se na simulação termoelétrica de células PEM, considerando parâmetros físico-químicos, sobrepotenciais ôhmicos, de ativação e difusivos, além da variação de temperatura da água de alimentação. Esses modelos fornecem a base para o cálculo da vazão mássica de hidrogênio produzida a partir da fração elétrica disponível do reator, considerando o uso da água dessalinizada pelos processos estudados na Seção 2.1.

2.3 Cogeração Nuclear

2.3.1 Aspectos Gerais da Cogeração Nuclear

A cogeração nuclear refere-se ao aproveitamento simultâneo da energia térmica e elétrica gerada por reatores nucleares para aplicações adicionais além da geração de eletricidade, como a dessalinização de água e a produção de hidrogênio. Essa abordagem amplia significativamente a eficiência exergética dos sistemas nucleares, promovendo uma utilização mais racional e sustentável da energia disponível [9, 24, 28].

Em contraste com usinas térmicas convencionais que rejeitam grande parte do calor gerado, a cogeração permite o aproveitamento do calor residual para processos industriais ou aplicações de interesse estratégico. No contexto de regiões áridas ou com alta demanda energética, a cogeração nuclear oferece soluções integradas para dois dos maiores desafios globais contemporâneos: segurança hídrica e transição energética [15, 17].

O conceito de trigerção — que engloba a produção conjunta de eletricidade, água potável dessalinizada e hidrogênio — representa uma evolução do paradigma da cogeração tradicional. Essa integração é particularmente viável em reatores nucleares de pequeno e médio porte (SMRs), que apresentam maior flexibilidade operacional, segurança intrínseca e modularidade, características que os tornam ideais para aplicações descentralizadas e acoplamento com processos térmicos e eletroquímicos [20, 21].

A literatura destaca que tecnologias de dessalinização térmica, como a destilação por múltiplos efeitos (MED) e o flash em múltiplos estágios (MSF), são particularmente compatíveis com o uso de calor de baixa e média temperatura proveniente do ciclo secundário dos reatores nucleares. Já a produção de hidrogênio por eletrólise

da água, especialmente via eletrolisadores do tipo PEM, pode ser alimentada pela energia elétrica produzida de forma contínua pelos SMRs [9, 24, 28].

Entre as vantagens apontadas da cogeração nuclear destacam-se:

- Redução do consumo específico de combustível por unidade de serviço útil;
- Menor impacto ambiental, com emissões praticamente nulas de gases de efeito estufa;
- Sinergia entre produção energética e segurança hídrica;
- Melhoria na competitividade econômica dos reatores, ao diversificar os produtos gerados [15, 25].

Um dos aspectos mais promissores da cogeração nuclear reside em sua capacidade de complementar fontes renováveis intermitentes, como solar e eólica, no fornecimento de energia elétrica confiável. A variabilidade natural dessas fontes pode comprometer a estabilidade da rede elétrica, exigindo soluções de compensação que respondam em tempo real às flutuações de carga. Nesse cenário, plantas nucleares integradas a processos de dessalinização e/ou produção de hidrogênio oferecem flexibilidade operacional: nos momentos em que há excesso de energia renovável, o sistema pode direcionar energia para produzir água ou hidrogênio; já nos momentos de déficit, o reator pode redirecionar sua potência elétrica para suprir a rede, reduzindo o despacho de fontes fósseis [19]. Essa capacidade de ajuste dinâmico transforma os sistemas de cogeração nuclear em elementos estratégicos para garantir segurança energética e estabilidade de rede em matrizes energéticas com elevada penetração de renováveis.

2.3.2 Casos de Estudo

Diversos estudos de caso têm sido conduzidos ao redor do mundo com o objetivo de demonstrar a viabilidade técnica, econômica e ambiental da integração entre reatores nucleares e sistemas de cogeração de eletricidade, dessalinização de água e produção de hidrogênio. Tais iniciativas abrangem diferentes configurações de reatores, tecnologias de separação e contextos geográficos, oferecendo uma base diversificada e relevante para a consolidação da tri-cogeração nuclear como alternativa estratégica. Neste trabalho, foram selecionados casos que apresentam relevância tecnológica, abordagens complementares e, em alguns casos, vínculos diretos com o projeto brasileiro que será utilizado como planta nuclear de referência.

Dentre os projetos de pequenos reatores modulares (SMRs) mais estudados na literatura, destaca-se o NuScale, desenvolvido nos Estados Unidos. Embora ainda

não tenha sido implementado comercialmente, o NuScale tem servido como referência tecnológica em diversos estudos de viabilidade termoenergética e análise de cogeração nuclear, especialmente devido ao seu design compacto, segurança passiva e escalabilidade modular. Sua potência nominal de 60 MWe, operação em regime de carga base e possibilidade de integração com sistemas auxiliares externos o tornam um candidato ideal para aplicações combinadas com unidades de dessalinização, sobretudo em regiões com alta demanda hídrica e baixa disponibilidade de energia térmica de qualidade [42].

No contexto brasileiro, o NuScale foi adotado como modelo de referência em simulações que avaliam seu acoplamento com sistemas de dessalinização térmica por membranas. Estudos conduzidos por [43–45] investigaram sua integração com a tecnologia de destilação por membranas em contato direto (DCMD), utilizando modelagens termo-hidrodinâmicas, simulações transientes e validações experimentais. Em comparação, o estudo de [42] analisou o desempenho do NuScale acoplado a três diferentes tecnologias de dessalinização - MED, MSF e RO - com foco em aspectos termoeconômicos e estratégias de escalabilidade. Enquanto o trabalho internacional destaca a versatilidade do reator em múltiplos cenários, os estudos brasileiros aprofundam a compreensão do comportamento térmico da DCMD acoplada ao calor de rejeito do NuScale, demonstrando alto rendimento e viabilidade operacional em condições climáticas típicas do Semiárido. Essa abordagem reforça o potencial do NuScale como base para aplicações regionais de cogeração nuclear voltadas à segurança hídrica.

O reator de alta temperatura HTR-PM (High Temperature Reactor - Pebble-bed Module), desenvolvido na China, tem sido objeto de estudos para aplicações em cogeração nuclear voltada à produção simultânea de energia elétrica, água potável e hidrogênio. Em [46], foi realizada uma análise exergética detalhada de uma planta de trigeração acoplada ao HTR-PM, avaliando sua integração com uma unidade de dessalinização térmica do tipo flash em múltiplos estágios (MSF) e um sistema de produção de hidrogênio via eletrólise de vapor em alta temperatura (High Temperature Steam Electrolysis – HTSE). O estudo considerou diferentes cenários operacionais e estratégias de distribuição da energia térmica e elétrica entre as três finalidades, com foco na maximização do rendimento global do sistema. Os resultados apontaram eficiências exergéticas superiores a 40% e destacaram a vantagem de utilizar reatores de alta temperatura para alimentar diretamente processos termoquímicos e eletroquímicos com menor penalidade energética. Além disso, observou-se que a flexibilidade na alocação de energia entre eletricidade, hidrogênio e água dessalinizada permite ajustar o sistema de acordo com a demanda e condições externas, tornando-o particularmente atrativo para regiões com recursos hídricos escassos e necessidade de produção energética estável e limpa.

O estudo de [47] propõe a integração entre um reator nuclear, o ciclo híbrido Cu-Cl para produção de hidrogênio e diferentes tecnologias de dessalinização térmica e por membranas. Foram analisadas cinco configurações com as seguintes técnicas: humidificação-desumidificação (HD), destilação por múltiplos efeitos (MED), destilação flash multiefeito (MSF), compressão de vapor (VC) e osmose reversa (RO), escolhidas conforme a origem da energia utilizada — como calor residual, energia recuperada do ciclo Cu-Cl, eletricidade em horários de baixa demanda e energia solar. Um destaque é a configuração alimentada por energia solar, que utiliza a técnica de compressão de vapor (VC), oferecendo uma solução sustentável e aplicável em regiões remotas com alta insolação. A análise termodinâmica mostrou que o uso integrado do ciclo Cu-Cl com uma técnica de dessalinização bem selecionada pode elevar significativamente a eficiência exergética do sistema, permitindo a cogeração simultânea de hidrogênio e água potável com baixos impactos ambientais.

O trabalho de [48] analisou a integração entre o reator nuclear APR1400 e um eletrolisador PEM de grande escala para produção contínua de hidrogênio. O estudo contemplou modelagens termoenergéticas e exergetivas tanto do ciclo termodinâmico do reator quanto do eletrolisador, considerando a conversão da eletricidade gerada em hidrogênio por eletrólise da água. A integração foi avaliada sob diferentes condições operacionais, resultando em eficiências energéticas e exergetivas globais de 22,9% e 53,5%, respectivamente. A taxa de produção de hidrogênio atingiu cerca de 651 t/dia, demonstrando o elevado potencial do APR1400 para aplicações em larga escala. O estudo também destacou a recuperação do calor de rejeito para aquecimento da água de alimentação e a possibilidade de produção simultânea de oxigênio em alta pureza, reforçando a viabilidade da cogeração de hidrogênio e seus subprodutos a partir de reatores PWR avançados.

O estudo de [49] avaliou a viabilidade técnico-econômica de acoplar uma planta de osmose reversa de água do mar (SWRO) à usina nuclear de Diablo Canyon (DCNPP), na Califórnia. A proposta utiliza a eletricidade de base livre de carbono gerada pelos reatores para alimentar a unidade de dessalinização, além de compartilhar a infraestrutura de captação e descarte do sistema de resfriamento. Por não exigir modificações no ciclo térmico da usina, esse tipo de acoplamento é de fácil implementação e pode ser aplicado em centrais nucleares já existentes, reduzindo custos e facilitando a aceitação pública. Os resultados indicaram que o custo nivelado da água varia entre US\$0,77 e US\$0,98/m³ — significativamente inferior ao de plantas convencionais — com redução estimada de até 47 ktCO₂/ano. Além disso, o uso da água de resfriamento previamente aquecida melhora o desempenho das membranas de RO, ampliando a eficiência global do sistema.

Em [50], foi analisada uma configuração de trigeração integrada a uma usina nuclear convencional, combinando a produção de eletricidade, hidrogênio e água

dessalinizada para aplicações de peak shaving — estratégia voltada à redução de picos de demanda elétrica. O sistema utiliza o excedente de eletricidade gerado fora dos horários de pico para alimentar um eletrolisador alcalino, enquanto o calor residual do condensador é aproveitado por uma planta de dessalinização do tipo MED. A análise termoeconômica demonstrou que essa configuração reduz significativamente os custos operacionais e melhora a eficiência energética do sistema. Entre os principais resultados, destacam-se a flexibilidade na operação do eletrolisador conforme a demanda e a sinergia entre os subsistemas, que permite maior aproveitamento do calor de rejeito e estabilidade na oferta de insumos estratégicos, como hidrogênio e água potável.

O trabalho de [51] analisou uma planta de trigerção integrada a um reator nuclear supercrítico (SCWR), combinando a geração de eletricidade, a produção de hidrogênio por meio do ciclo termoquímico Na - O - H e a dessalinização de água do mar utilizando a tecnologia de múltiplos efeitos (MED). A planta foi modelada termodinamicamente com base em uma arquitetura de alta eficiência energética, aproveitando o calor do SCWR para acionar diretamente os processos térmicos. Os resultados mostraram que o sistema proposto alcança eficiências térmicas de até 47% e exergeticamente superiores a 45%, com destaque para a sinergia entre os subsistemas. A análise também indicou que o uso do ciclo Na-O-H elimina a dependência de eletricidade para a produção de hidrogênio, ao mesmo tempo em que permite o aproveitamento do calor residual para dessalinização, configurando uma solução robusta e eficiente para cogeração de insumos estratégicos com baixa emissão de carbono.

Os trabalhos de [20, 21] apresentam o Projeto DESSAL, uma iniciativa brasileira voltada ao desenvolvimento de um pequeno reator modular (SMR) dedicado à cogeração de energia elétrica e água dessalinizada. Derivado do reator LABGENE da Marinha do Brasil e adaptado para a cogeração, o DESSAL adota um reator tipo PWR compacto de 75 MW(t), com geração elétrica de 24 MW(e), acoplado a tecnologias como osmose reversa (RO), destilação por múltiplos efeitos (MED) e destilação por membranas (MD). Simulações realizadas com o software DEEP da AIEA indicam que, utilizando 18 MW(e) e parte do calor de rejeito do circuito secundário, é possível alcançar uma produção de até 132.000 m³/dia de água dessalinizada, suficiente para abastecer cerca de 1,2 milhão de pessoas, de acordo com o consumo médio populacional da região Nordeste do Brasil. O processo de MD também é destacado por sua capacidade de recuperar calor residual e tratar a salmoura concentrada da RO, elevando a eficiência e reduzindo impactos ambientais. Dada sua concepção nacional, compatibilidade com cogeração híbrida e potencial de aplicação no semiárido brasileiro, o reator DESSAL será adotado como planta nuclear de referência para este trabalho.

Nos trabalhos de [3, 52], o pequeno reator nuclear pressurizado de 75 MW(t) foi acoplado a diferentes configurações de sistemas de dessalinização térmica com recuperação de calor. Em [3], propõe-se a cogeração de água dessalinizada e eletricidade por meio da integração do DESSAL com uma planta de Destilação por Membrana de Contato Direto (DCMD), onde parte do calor utilizado provém do vapor extraído da turbina de baixa pressão e parte do calor residual do condensador é reaproveitado. Utilizando os códigos DE-TOP e DESAL-PLANT, os autores demonstram que o sistema é capaz de produzir simultaneamente 24,80 MW(e) e 1502,4 m³/dia de água dessalinizada. Já em [52], explora-se uma solução híbrida combinando a tecnologia térmica DCMD com a osmose reversa da água do mar (SWRO), ambas operando de forma independente e supridas pela mesma planta nuclear. O calor necessário ao processo DCMD é inteiramente aproveitado a partir dos dois condensadores de ciclos Rankine paralelos, dispensando laços de isolamento térmico, enquanto a energia elétrica para a operação da planta SWRO é fornecida diretamente pelo DESSAL. Como resultado, obtém-se uma produção total de 15.154 m³/dia de água, com consumo elétrico específico global de 6,24 kW(e)h/m³. Esses estudos evidenciam a versatilidade do DESSAL em esquemas de cogeração, além de reforçarem sua adequação às condições climáticas do Nordeste brasileiro, alinhando-se plenamente aos objetivos deste trabalho.

Com base nas tecnologias, arranjos de acoplamento e potencialidades descritas neste capítulo, o próximo passo consiste em aplicar modelos termodinâmicos e ferramentas computacionais para simular os fluxos de energia e massa associados à tri-cogeração proposta. A modelagem do ciclo termodinâmico do reator DESSAL, o dimensionamento dos subsistemas de dessalinização e eletrólise, e a avaliação da produção integrada de eletricidade, água e hidrogênio são apresentados no Capítulo 3.

Capítulo 3

Metodologia

Este capítulo descreve a metodologia adotada para a análise da viabilidade técnico-energética da tri-cogeração de energia elétrica, água dessalinizada e hidrogênio a partir de um microrreator nuclear de água pressurizada (PWR). O trabalho foi estruturado de forma integrada, com o objetivo de avaliar o desempenho conjunto de diferentes tecnologias acopladas à planta nuclear de referência.

Inicialmente, foram realizadas simulações do ciclo termodinâmico da planta nuclear a fim de identificar os fluxos de energia disponíveis para as diferentes aplicações. A partir disso, foram estudadas técnicas térmicas e de membrana para dessalinização da água do mar, bem como a utilização da energia elétrica e da água dessalinizada na produção de hidrogênio por eletrólise.

Para a condução dos estudos, foram utilizadas ferramentas computacionais consolidadas na área de cogeração nuclear e modelos numéricos desenvolvidos com base na literatura técnica. As próximas seções detalham os procedimentos específicos adotados em cada etapa da análise.

3.1 DE-TOP

A análise do desempenho termodinâmico do ciclo de potência do DESSAL foi conduzida com o auxílio do programa DE-TOP (Desalination Thermodynamic Optimization Program), desenvolvido pela Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA). O DE-TOP permite modelar o circuito secundário de reatores de água pressurizada (PWR) com reaquecimento, simulando o ciclo Rankine regenerativo completo com base nas propriedades termodinâmicas da formulação IAPWS-IF97.

O modelo computacional considera os principais componentes da planta - gerador de vapor, turbinas de alta e baixa pressão, aquecedores regenerativos, condensador e bombas - resolvendo os balanços de massa e energia em cada ponto do circuito. A partir disso, o programa fornece dados como pressão, temperatura, entalpia e vazão

mássica em diversos pontos da planta, permitindo identificar os pontos mais adequados para extrações de vapor e acoplamentos térmicos com sistemas não elétricos.

3.1.1 Acoplamento com a Dessalinização Térmica

Com o ciclo termodinâmico da planta nuclear simulado no DE-TOP, foram avaliadas diferentes configurações de extração de vapor com o objetivo de alimentar processos de dessalinização térmica, com ênfase nas tecnologias de Destilação por Múltiplos Efeitos (MED) e Flash Multiestágio (MSF). Ambas as técnicas estão integradas ao programa e foram simuladas de forma semelhante, respeitando os requisitos mínimos de temperatura de alimentação específicos de cada processo.

As extrações foram analisadas em diversos pontos do ciclo termodinâmico, sendo aceitas apenas aquelas cuja temperatura de saturação do vapor fosse compatível com os limites operacionais de cada tecnologia. De acordo com Berquó (2022) [3], a temperatura mínima de vapor requerida é de 70.5 °C para MED e 120.5 °C para MSF, considerando uma margem adicional de segurança para perdas térmicas no circuito de isolamento. Para garantir essa margem e prevenir qualquer risco de contaminação radioativa, considerou-se uma diferença mínima de 10,5 °C entre a temperatura do vapor extraído e a da salmoura, conforme valor padrão adotado no DE-TOP.

O calor do vapor extraído é transferido ao processo de dessalinização por meio de um trocador de calor intermediário, e o condensado gerado é reinjetado no ciclo do reator. Esse acoplamento reduz a potência elétrica líquida da planta, uma vez que parte do vapor deixa de expandir na turbina. Essa perda elétrica é contabilizada pelo programa como consumo equivalente de energia elétrica pelo processo de dessalinização.

Além das tecnologias integradas ao DE-TOP, os mesmos pontos de extração avaliados foram posteriormente utilizados para estimar o potencial de acoplamento térmico com a Destilação por Membranas (MD), técnica que será analisada externamente, uma vez que os códigos da IAEA não abordam essa técnica.

3.1.2 Modelo de Cálculo e Avaliação de Desempenho

A avaliação do desempenho dos processos de dessalinização térmica no DE-TOP é baseada em dois parâmetros fundamentais: o *Gain Output Ratio* (GOR) e o consumo elétrico específico (SEC) de energia elétrica (kWh/m³). O GOR é definido como a razão entre a massa de água dessalinizada produzida e a massa de vapor de aquecimento consumida, representando a eficiência térmica do processo. Já o SEC reflete a perda líquida de potência elétrica por metro cúbico de água produzida,

sendo calculado com base na redução da geração elétrica da planta nuclear devido à extração de vapor.

Para a tecnologia MED, o modelo de cálculo adotado pelo DE-TOP segue a mesma lógica do programa DEEP/IAEA, estimando o GOR a partir do número de efeitos e de um coeficiente de eficiência térmica da planta, geralmente assumido como 0,8. A equação básica é dada por:

$$GOR_{MED} = \eta_{MED} \cdot N_{\text{efeitos}}, \quad (3.1)$$

onde η_{MED} representa a eficiência térmica do sistema (valor típico de 0,8) e N_{efeitos} é o número de efeitos da planta, calculado com base na diferença de temperatura disponível:

$$N_{\text{efeitos}} = \frac{T_{\text{brine}}^{\text{máx}} - T_{\text{cond}} - \Delta T_{\text{reject}}}{\Delta T_{\text{efeito}}}, \quad (3.2)$$

em que $T_{\text{brine}}^{\text{máx}}$ é a temperatura máxima da salmoura (top brine temperature), T_{cond} é a temperatura de rejeito do condensador, ΔT_{efeito} é a queda média de temperatura entre efeitos consecutivos e ΔT_{reject} é a faixa de resfriamento no último estágio.

Para a tecnologia MSF, o GOR é estimado por uma equação mais detalhada, que leva em consideração as propriedades térmicas da salmoura, a capacidade calorífica da água de alimentação e o efeito da elevação do ponto de ebulição:

$$GOR_{MSF} = \frac{\lambda_h}{c_h \cdot (\Delta T_{bh} + \Delta T_{bpe})} \cdot (1 - e^{\frac{c_{vm} \cdot \Delta T_{ao}}{\lambda_m}}), \quad (3.3)$$

onde:

- λ_h é o calor latente do vapor de aquecimento (kJ/kg);
- λ_m é o calor latente médio nas câmaras de evaporação (kJ/kg);
- c_h é o calor específico da água de alimentação (kJ/kg·K);
- c_{vm} é o calor específico médio da salmoura (kJ/kg·K);
- ΔT_{bh} é o ganho de temperatura no aquecedor de salmoura (°C);
- ΔT_{bpe} é a elevação do ponto de ebulição (°C);
- ΔT_{ao} é a variação de temperatura de trabalho geral (°C).

Os valores de referência utilizados pelo DE-TOP para esses parâmetros são oriundos de bancos de dados técnicos da IAEA e podem ser ajustados em modo avançado.

Com a estimativa do GOR para cada configuração e tecnologia, o programa calcula a quantidade de calor necessária para atingir determinada produção de água

dessalinizada, o impacto sobre a potência líquida da planta e o consumo elétrico específico equivalente de energia elétrica (kWh/m³), permitindo a comparação entre diferentes cenários de acoplamento.

3.1.3 Seleção dos Pontos de Extração de Vapor

O programa DE-TOP permite a seleção interativa dos pontos de extração de vapor e de retorno do condensado no diagrama do ciclo termodinâmico. Essa funcionalidade é essencial para configurar corretamente o acoplamento entre a planta nuclear e os processos de dessalinização térmica, já que diferentes pontos de extração oferecem distintas condições de pressão e temperatura, impactando tanto a viabilidade operacional das técnicas utilizadas quanto a eficiência global do sistema.

A seleção dos pontos viáveis é limitada àqueles cuja temperatura de saturação do vapor seja superior ao valor mínimo requerido por cada tecnologia de dessalinização, garantindo o atendimento térmico do processo e respeitando margens operacionais de segurança.

Além da temperatura, a vazão de vapor extraída deve ser suficiente para fornecer a quantidade de energia térmica necessária à planta de dessalinização (\dot{Q}_{dessal}), sendo esse valor determinado a partir da produção de água desejada e do calor latente envolvido no processo. O DE-TOP permite que o usuário defina manualmente a vazão de extração, ou utilize a função automática *Calculate Steam Flows*, que estima a vazão ideal para atender à carga térmica requerida.

Cada extração resulta em uma redução da potência elétrica líquida da planta nuclear, uma vez que o vapor desviado deixa de expandir nas turbinas. Essa perda de geração é computada como penalidade energética do sistema de cogeração, e é expressa por meio do índice *power lost ratio*, definido como:

$$\text{Power Lost Ratio} = \frac{\Delta W_{\text{el}}}{\dot{Q}_{\text{dessal}}}, \quad (3.4)$$

onde ΔW_{el} é a diferença entre a potência elétrica líquida da planta de referência (sem extração) e da planta com cogeração, e \dot{Q}_{dessal} é o fluxo de calor útil fornecido à unidade de dessalinização.

Ao final da simulação, o DE-TOP apresenta os efeitos da extração sobre o desempenho global da planta, permitindo ao usuário avaliar a eficiência do acoplamento e comparar diferentes configurações de extração. Essa análise é fundamental para selecionar os pontos mais vantajosos sob os critérios de viabilidade técnica e desempenho termoenergético.

3.1.4 Análise de Eficiência e Consumo Elétrico Específico

A partir das simulações realizadas com o DE-TOP, foram avaliados diversos pontos de extração de vapor e seus impactos tanto na produção de água dessalinizada quanto na geração elétrica líquida da planta. Para cada ponto de extração viável, o programa calcula a perda de potência elétrica associada ao desvio de vapor que deixa de expandir na turbina e, em paralelo, estima a quantidade de água que pode ser produzida pelo sistema de dessalinização térmica associado.

Com base nesses dados, foi possível determinar o consumo elétrico específico (SEC) de cada cenário de acoplamento, permitindo construir gráficos e tabelas comparativas em função do ponto de extração. O SEC (em kWh/m³) representa a quantidade de energia elétrica equivalente sacrificada por metro cúbico de água dessalinizada produzido, sendo calculado por:

$$SEC = \frac{\Delta W_{el} \cdot 86400}{V_{\text{água}} \cdot 3,6 \times 10^6}, \quad (3.5)$$

onde:

- SEC é o consumo específico (kWh/m³);
- ΔW_{el} é a diferença de potência elétrica entre a planta de referência (sem extração) e a planta com cogeração, somada ao consumo elétrico da planta de dessalinização (trabalho de bombas hidráulicas, por exemplo) (em W);
- $V_{\text{água}}$ é o volume diário de água dessalinizada produzido (em m³/dia);
- O fator 86400 converte W para J por dia (1 dia = 86400 s);
- O denominador $3,6 \times 10^6$ converte J para kWh (1 kWh = $3,6 \times 10^6$ J).

Assim, a equação pode ser simplificada para:

$$SEC = \frac{\Delta W_{el}}{V_{\text{água}}} \cdot \frac{24}{1000}, \quad (3.6)$$

onde a multiplicação por 24 converte de W para Wh/dia e a divisão por 1000 converte para kWh.

Essa abordagem permite identificar as configurações de acoplamento térmico mais eficientes, isto é, aquelas que resultam em maior produção de água com menor penalidade elétrica. Tais resultados são fundamentais para a seleção de cenários otimizados de cogeração, orientando decisões de projeto e operação da planta nuclear acoplada a sistemas de dessalinização.

3.1.5 Operação do DE-TOP

O programa DE-TOP apresenta uma interface gráfica amigável e estruturada em etapas sequenciais, que orientam o usuário na configuração completa do ciclo termodinâmico e do acoplamento com aplicações não-elétricas. Esta subseção descreve o processo de utilização do programa, com o auxílio de capturas de tela extraídas do manual oficial do software.

A tela inicial do programa (Figura 4.3) apresenta o fluxo lógico do processo de simulação, dividido em quatro etapas principais: definição da planta de potência, definição da aplicação não elétrica, seleção do acoplamento e geração do relatório final.

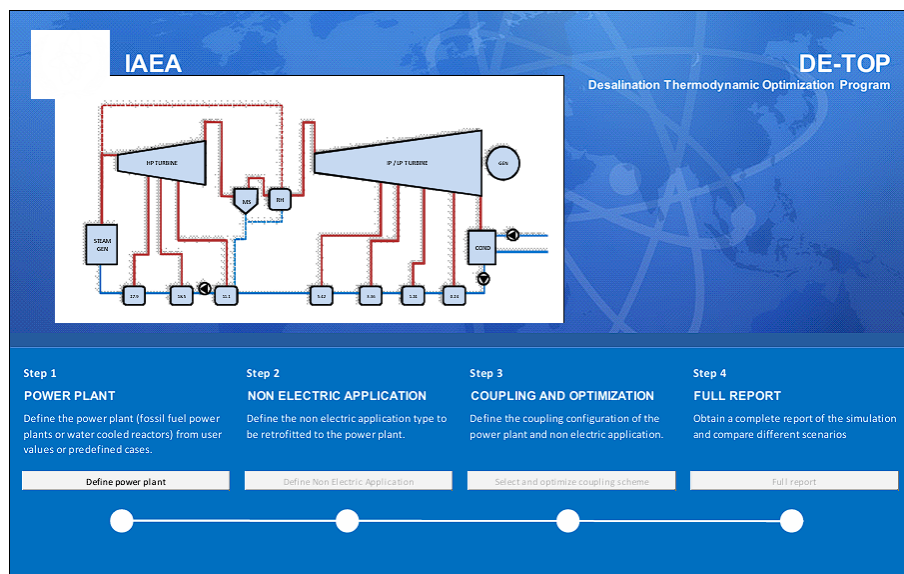


Figura 3.1: Tela principal do DE-TOP com as quatro etapas da simulação.

A estrutura geral da interface do programa pode ser vista na Figura 3.2, que mostra a organização dos menus e das áreas de entrada de dados e resultados.

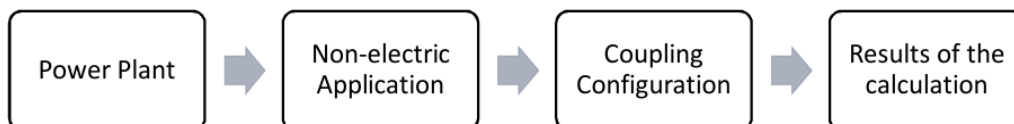


Figura 3.2: Layout geral do programa DE-TOP.

A entrada de dados da planta de potência é feita por meio de formulários específicos, como mostrado na Figura 3.3. Nesta etapa, são definidos os principais parâmetros do ciclo termodinâmico, como potência térmica, pressão e temperatura do vapor vivo, dados de reaquecimento e número de aquecedores regenerativos.

Power Plant Description

Select a case from the list below. Once you have selected a case, you can customize all parameters to adjust it to your case.

Case: **Nuclear Power Plant PWR (1600 MWe)**

Main Parameters | **Advanced Parameters**

Steam Generator

Thermal Input [MW(th)]

Live steam pressure [bar] ☐ Saturated ☐ Superheated

Live steam temperature [°C] $T_{sat} = 270\text{ °C}$

Reheat

Reheat Type: **Moisture separator and reheater (Nuclear power plant)**

Pressure (HP Turbine exhaust) [bar]

Temperature [°C]

Feedwater line

Final Feedwater temperature [°C] $P_{sat} = 26,5\text{ bar}$

Number feedwater preheaters (including deaerator)

Deaerator position in the feedwater line

Main cooling condenser

Condensing steam pressure [bar]

Figura 3.3: Formulário principal de entrada de dados da planta de potência.

Caso o usuário opte por calcular automaticamente a pressão de condensação com base nas condições ambientais, uma tela adicional permite a entrada dos parâmetros do sistema de resfriamento, conforme ilustrado na Figura 3.4.

Power Plant Condenser calculations

Cooling System

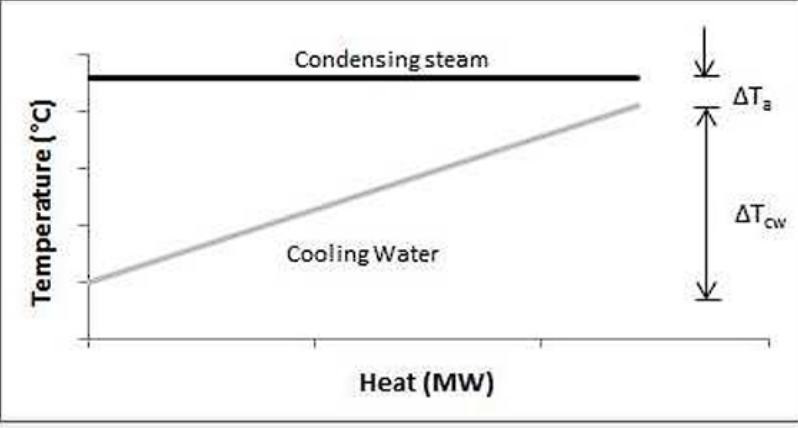
Type of cooling system: once through cooling

Cooling water temperature [°C]: 22.8

Cooling water temperature rise in condenser (ΔT_{cw}) [°C]: 5

Condenser approach temperature (ΔT_a) [°C]: 5

Condensing steam pressure [bar]: 0.05



Cancel Apply

Figura 3.4: Formulário para cálculo da pressão de condensação a partir da temperatura da água de resfriamento.

Parâmetros adicionais da planta de potência podem ser definidos na aba avançada, como mostra a Figura 3.5. Nela, é possível ajustar eficiências de turbinas e bombas, perdas auxiliares e pressões dos aquecedores.

Power Plant Description

Select a case from the list below. Once you have selected a case, you can customize all parameters to adjust it to your case.

Case:

Main Parameters | **Advanced Parameters**

Component efficiencies

Steam Generator Efficiency [%]	<input type="text" value="0.85"/>	Generator Efficiency [%]	<input type="text" value="0.98"/>
HP turbine Efficiency [%]	<input type="text" value="0.88"/>	Pump efficiency [%]	<input type="text" value="0.85"/>
LP/IP turbine efficiency [%]	<input type="text" value="0.8"/>		
Power plant Auxiliary loads [%]	<input type="text" value="0.05"/>		

Feedwater Preheating Line (Pressures of steam extractions to preheaters)

Preheater 1 [bar]	<input type="text" value="0.2"/>	Preheater 5 [bar]	<input type="text" value="15"/>
Preheater 2 [bar]	<input type="text" value="1"/>	Preheater 6 [bar]	<input type="text" value="60"/>
Preheater 3 [bar]	<input type="text" value="2.5"/>	Preheater 7 [bar]	<input type="text" value="89.56"/>
Preheater 4 [bar]	<input type="text" value="5.8"/>	Preheater 8 [bar]	<input type="text" value="0"/>

[View complete model](#)

Figura 3.5: Aba de parâmetros avançados para personalização do modelo termodinâmico.

Após a inserção dos dados, o DE-TOP simula a planta de referência e apresenta os principais resultados termodinâmicos, conforme mostrado na Figura 3.6.

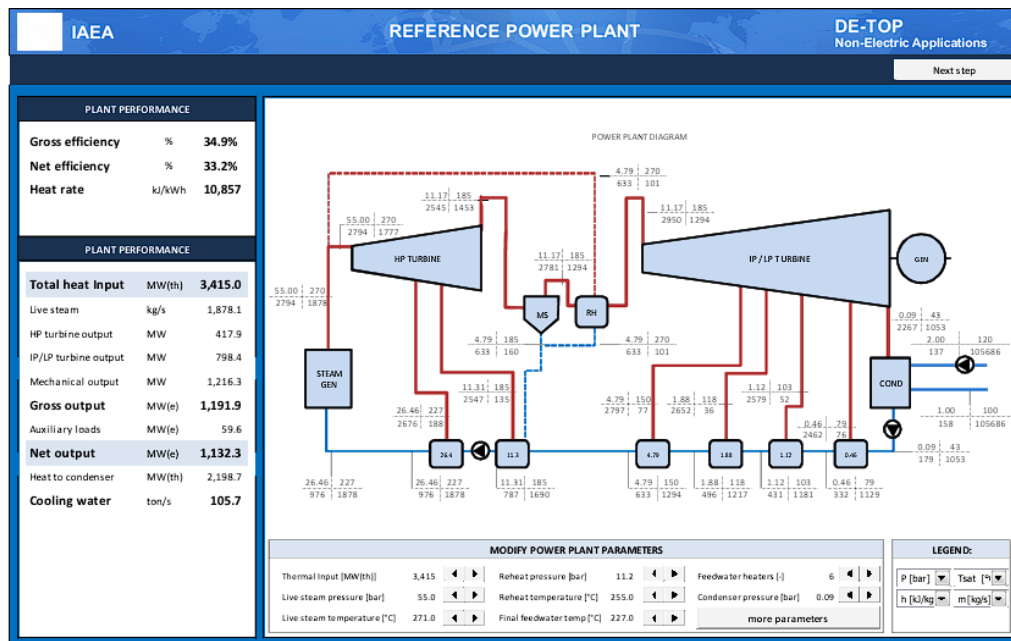


Figura 3.6: Resultados da simulação da planta de potência de referência.

Na etapa seguinte, o usuário define a aplicação não-elétrica. No caso da dessalinização térmica, o formulário da Figura 3.7 permite seleccionar a tecnologia (MED, MSF ou MED-TVC), definir a salinidade da água de alimentação e a temperatura máxima da salmoura.

Non-Electric Application Description

Select new case or a predefined case from the list below. Predefined cases can be customized by the user.

Application:

Desalination | District Heating

Desalination technology:

Basic parameters

Desalination plant capacity [m3/day]	50000
Seawater TDS [ppm]	20
Top brine temperature [°C]	115

[View complete model](#)

Cancel Apply

Figura 3.7: Formulário de entrada para parâmetros da unidade de dessalinização térmica.

Em seguida, o acoplamento entre o reator e a unidade de dessalinização é configurado por meio da tela da Figura 3.8, onde o usuário seleciona os pontos de extração de vapor e retorno do condensado. A interface apresenta graficamente os pontos viáveis com base nos requisitos térmicos da aplicação.

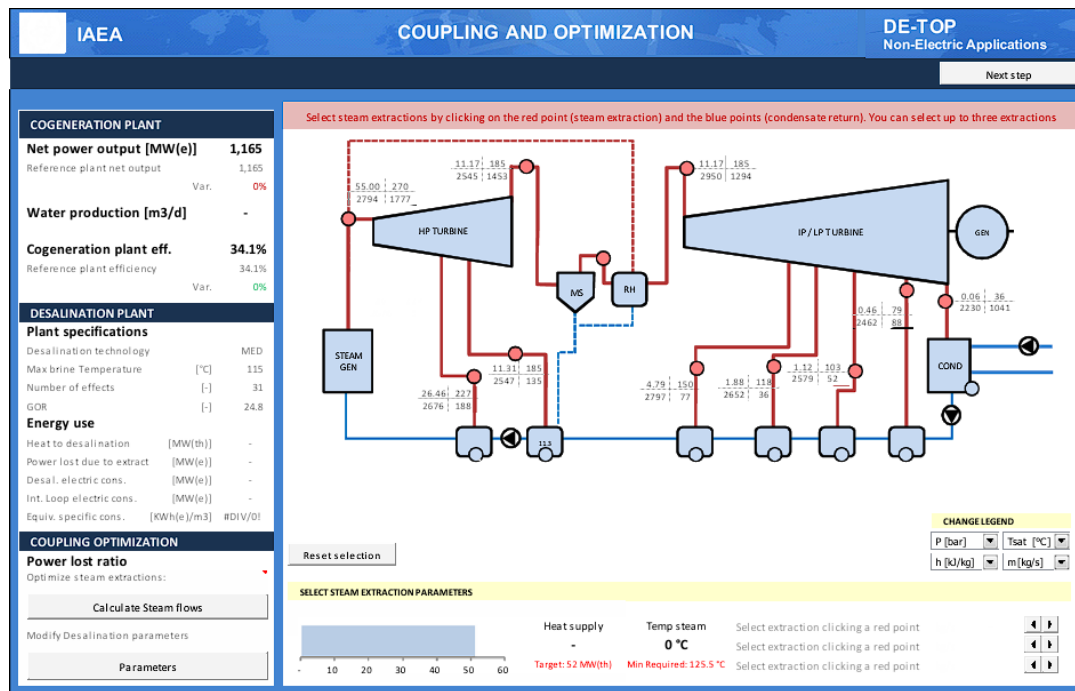


Figura 3.8: Tela de configuração do acoplamento térmico entre reator e dessalinização.

O DE-TOP também permite a seleção de múltiplos pontos de extração, como ilustrado na Figura 3.9. Essa funcionalidade é útil para aplicações que requerem fornecimento térmico em estágios, como aquecimento distrital ou estratégias de dessalinização com controle térmico mais preciso.

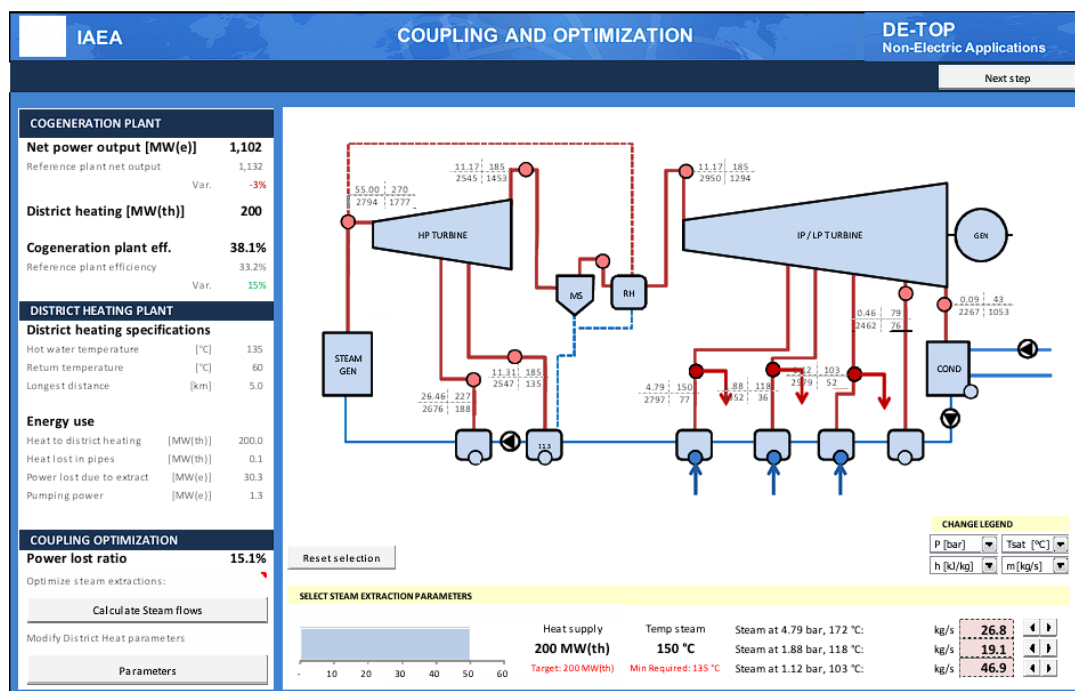


Figura 3.9: Exemplo de configuração com múltiplos pontos de extração de vapor.

Por fim, o programa gera um relatório completo com os resultados do cenário de cogeração simulado, comparando-o com a planta de referência. A Figura 3.10 ilustra um exemplo de relatório final para um acoplamento com tecnologia MED, contendo parâmetros de desempenho da planta, SEC, GOR e massa de vapor extraído.

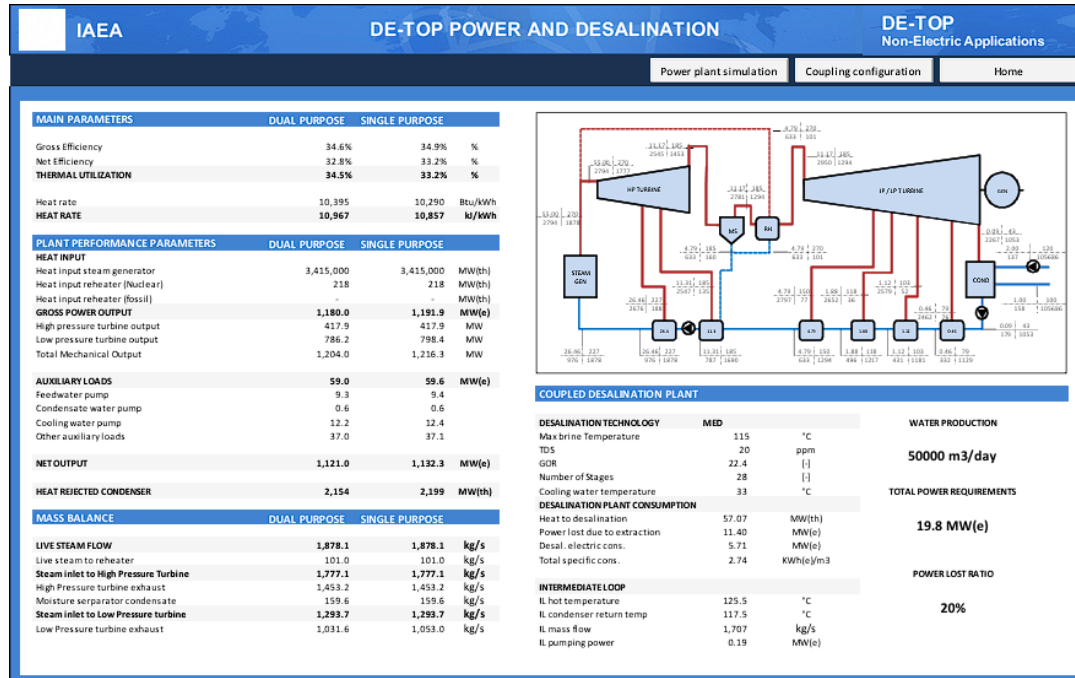


Figura 3.10: Relatório final da simulação com acoplamento MED.

O conjunto dessas funcionalidades torna o DE-TOP uma ferramenta robusta para a análise termodinâmica e otimização de sistemas de cogeração envolvendo reatores nucleares e aplicações térmicas não elétricas, como a dessalinização.

3.2 DEEP/IAEA

O programa DEEP (Desalination Economic Evaluation Program), desenvolvido pela Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA), é uma ferramenta computacional destinada à análise comparativa de tecnologias de dessalinização acopladas a diversas fontes de energia. Neste trabalho, o DEEP foi utilizado exclusivamente para a avaliação técnica da produção de água dessalinizada por osmose reversa (RO), utilizando a energia fornecida pela planta nuclear de referência.

Os dados de entrada da planta de potência - como potência térmica, eficiência global e características do ciclo termodinâmico - foram obtidos a partir das simulações previamente realizadas no software DE-TOP. A partir desses parâmetros, o DEEP permite estimar a capacidade de produção de água, o consumo energético específico e o desempenho do sistema de dessalinização.

A osmose reversa é um processo de separação por membranas amplamente empregado na dessalinização de água do mar. Nele, a água salina é pressurizada contra uma membrana semipermeável que retém a maior parte dos sais dissolvidos, permitindo a passagem da água doce. O desempenho do processo depende de variáveis como a salinidade da água de entrada, a pressão de operação, a taxa de recuperação, a rejeição salina da membrana e, em especial, a temperatura da solução.

No DEEP, a modelagem da unidade de RO é baseada em um conjunto de relações técnicas que consideram a energia elétrica consumida por metro cúbico de água produzida e os parâmetros operacionais mencionados acima. O usuário pode especificar diferentes condições de temperatura da água de alimentação, o que permite analisar cenários térmicos diversos - como a captação convencional da água do mar em temperatura ambiente ou o aproveitamento da água de resfriamento aquecida após passagem pelo condensador da planta nuclear.

Conforme discutido no manual do DEEP [29], a variação da temperatura da água de alimentação exerce efeitos contraditórios sobre o desempenho do sistema de RO:

- **Efeito positivo:** O aumento da temperatura reduz a viscosidade da solução salina e aumenta a difusividade molecular, o que eleva a taxa de permeação da membrana. Isso pode resultar em maior vazão de água dessalinizada sob a mesma pressão, ou permitir operar com pressões mais baixas mantendo a produção. Tal efeito tende a melhorar a eficiência energética do processo.
- **Efeito negativo:** A elevação da temperatura também reduz a seletividade da membrana, comprometendo sua capacidade de rejeitar sais dissolvidos. Com isso, a qualidade da água produzida pode ser afetada, especialmente em sistemas com alta taxa de recuperação. Além disso, temperaturas elevadas podem impactar negativamente a durabilidade da membrana.

Dessa forma, a influência da temperatura na osmose reversa envolve um balanço entre quantidade e qualidade da água obtida. No presente trabalho, foram simulados diferentes cenários com temperaturas variadas de alimentação, visando comparar as condições de captação direta da água do mar com a alternativa de utilização do efluente térmico do sistema de resfriamento. Os resultados obtidos serão discutidos no capítulo seguinte.

3.2.1 Operação do DEEP

A operação do programa DEEP é baseada em uma sequência lógica de etapas, organizadas em uma interface gráfica de fácil navegação. O usuário é guiado desde a inserção dos dados técnicos da planta e da unidade de dessalinização até a visualização e exportação dos resultados. Esta subseção apresenta uma visão geral das

funcionalidades do software, ilustrada com capturas de tela extraídas do manual oficial da IAEA [29].

A Figura 3.11 mostra a tela inicial do DEEP, onde é possível criar novos projetos, importar casos anteriores ou iniciar simulações com configurações padrão.



Figura 3.11: Tela inicial do DEEP.

Na etapa de entrada de dados, o usuário insere as características da planta de energia e da unidade de dessalinização. A Figura 3.12 apresenta a interface de configuração dos parâmetros técnicos principais, como potência térmica, eficiência, tipo de tecnologia de dessalinização, temperatura e salinidade da água de alimentação.

Specify Case and Configuration

Project Name: DEEP v4.0 February 2011

Case Name: My Case

Power Plant

Type: ☒ Steam Cycle ☐ Gas Cycle ☐ Combined Cycle

Fuel: ☒ Nuclear ☐ Oil/Gas ☐ Coal

Site spot: 5 °C

Reference Thermal Power: 1800 MWt

Reference net efficiency: 35 %

Desalination Plant

Technology: Distillation Plant

Desalination Capacity: 100000 m3/d 26.4 MGD

Water Salinity (TDS): 35000 ppm

☒ Intermediate Loop

Thermal Desalination process

Distillation type: Multi Effect Distillat ☐ Thermal Vapor compression

Max brine Temperature: 70 °C

Seawater Temperature: ☒ Same as power plant cooling water temperature ☐ 25 °C

Discount rate: 5 % Interest: 5 % Fuel Escalation: 3 %

☐ Backup Heat Source ☐ Carbon Tax ☐ Transport Costs

Get the Results! **Cancel**

Select desalination technology

Calculate initial case

Figura 3.12: Formulário de entrada de dados da planta de energia e da unidade de dessalinização.

Após a simulação, os resultados podem ser acessados e navegados pela aba *Navigate Results / Analysis*, conforme mostrado na Figura 3.13.

NAVIGATE RESULTS / ANALYSIS

Results and Schematic diagram: Inspect results of the calculations and further customize the selected configuration.

Report: Read, print or save as PDF a full report which summarizes the assumptions and results of the examined case

Sensitivity analysis: Examine the effect of a parameter (eg. capital costs, fuel cost, discount rate) to a dependent variable (eg. power cost, water cost)

Financial analysis: Perform cash flow analysis and explore the effect of uncertain financial parameters to the project viability

Compare Cases: Compare different cases based on case results i.e. cost from different energy sources and different desalination technologies

Advanced mode: **WARNING!** Any modifications here might alter the original DEEP source. View, modify and customize formulas and parameters as needed

Disclaimer: The International Atomic Energy Agency does not bear any responsibility for the accuracy of the results obtained using this code.

Figura 3.13: Aba de navegação de resultados e análises.

A aba *Results and Schematic Diagram* apresenta os dados numéricos da simula-

ção em conjunto com um diagrama esquemático da planta, permitindo uma compreensão visual da estrutura do sistema. Essa funcionalidade é ilustrada na Figura 3.14.

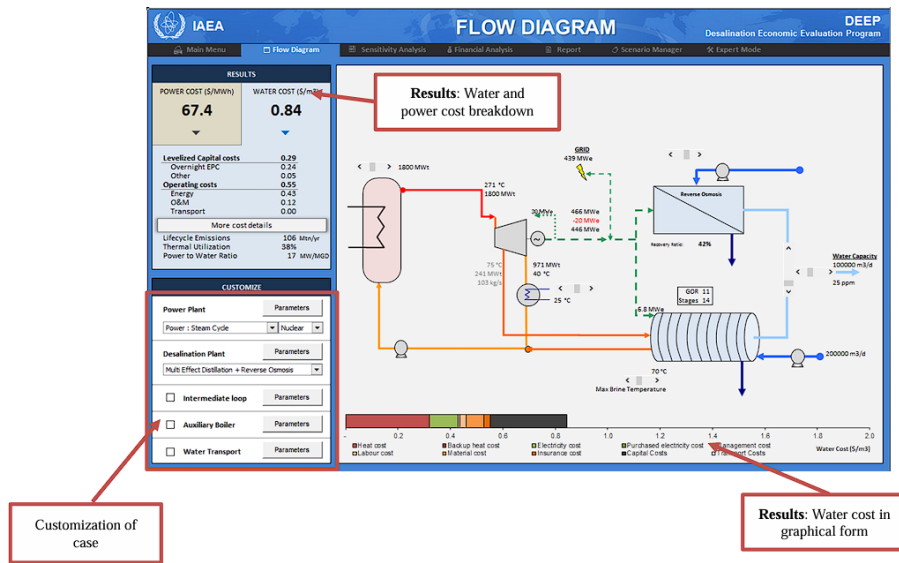


Figura 3.14: Resultados numéricos e diagrama esquemático da planta de dessalinização.

A ferramenta também permite realizar análises de sensibilidade para parâmetros-chave, como salinidade, temperatura e pressão de operação, como mostrado na Figura 3.15.

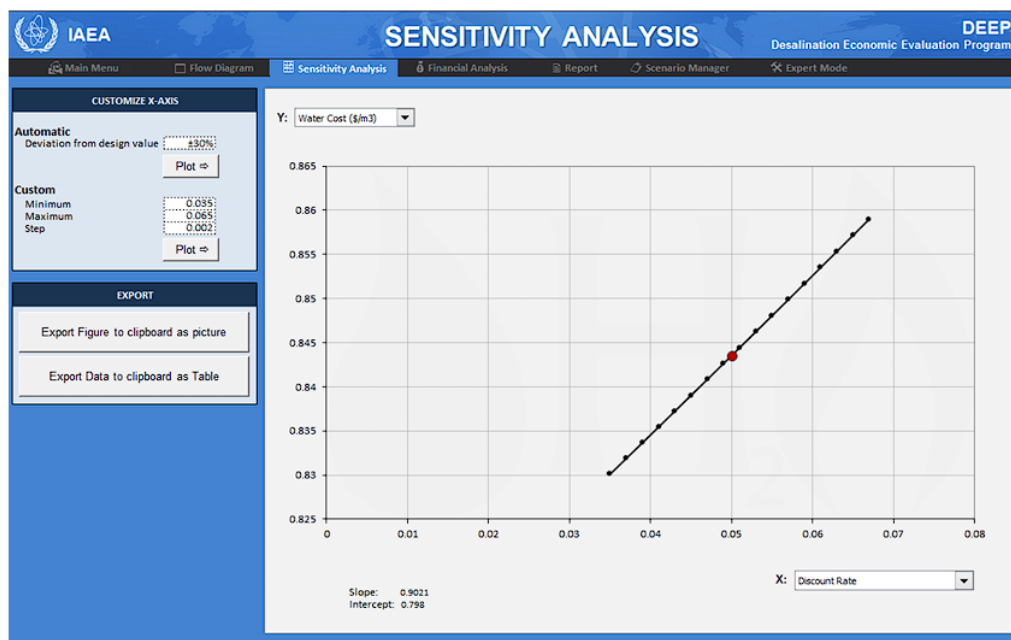


Figura 3.15: Análise de sensibilidade dos parâmetros principais da planta de RO.

A Figura 3.16 mostra a aba de análise financeira, disponível no software. Embora não tenha sido utilizada neste trabalho, essa funcionalidade permite a avaliação de custos de capital, operação e manutenção.

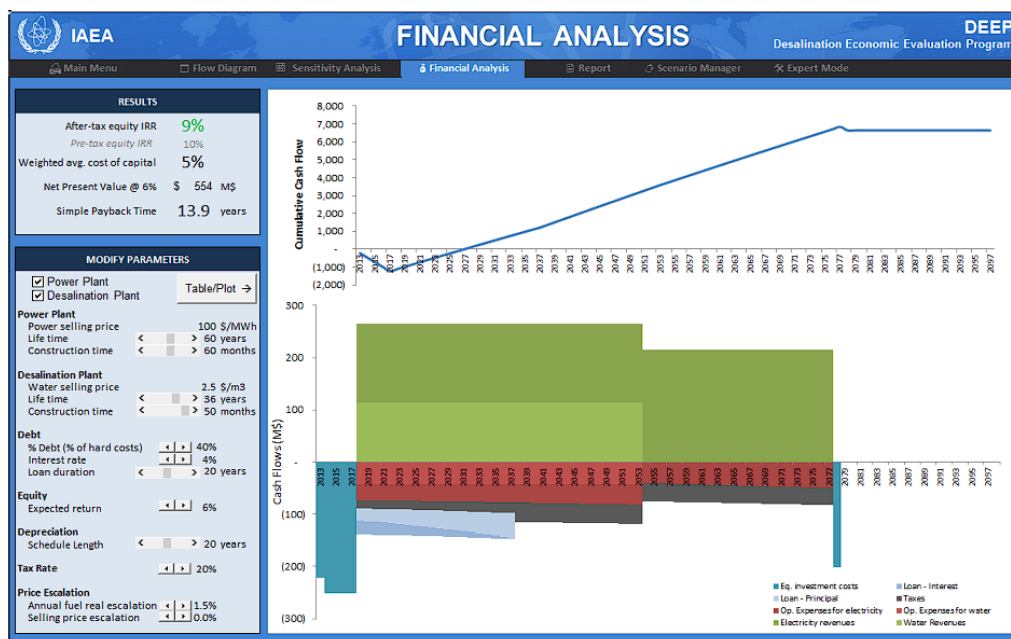


Figura 3.16: Aba de análise financeira do DEEP.

Casos distintos simulados no programa podem ser comparados graficamente por meio da aba *Compare Cases*, conforme ilustra a Figura 3.17.

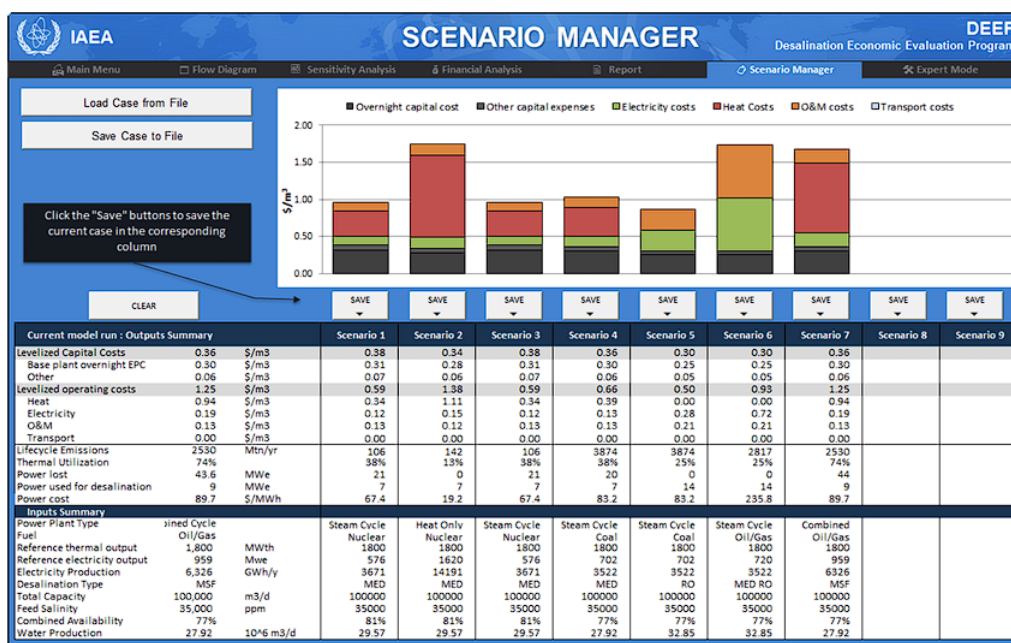


Figura 3.17: Comparação gráfica de diferentes cenários simulados no DEEP.

Por fim, os resultados da simulação podem ser exportados ou inspecionados em maior profundidade por meio da aba *Export and Inspect Results*, como mostrado na Figura 3.18.

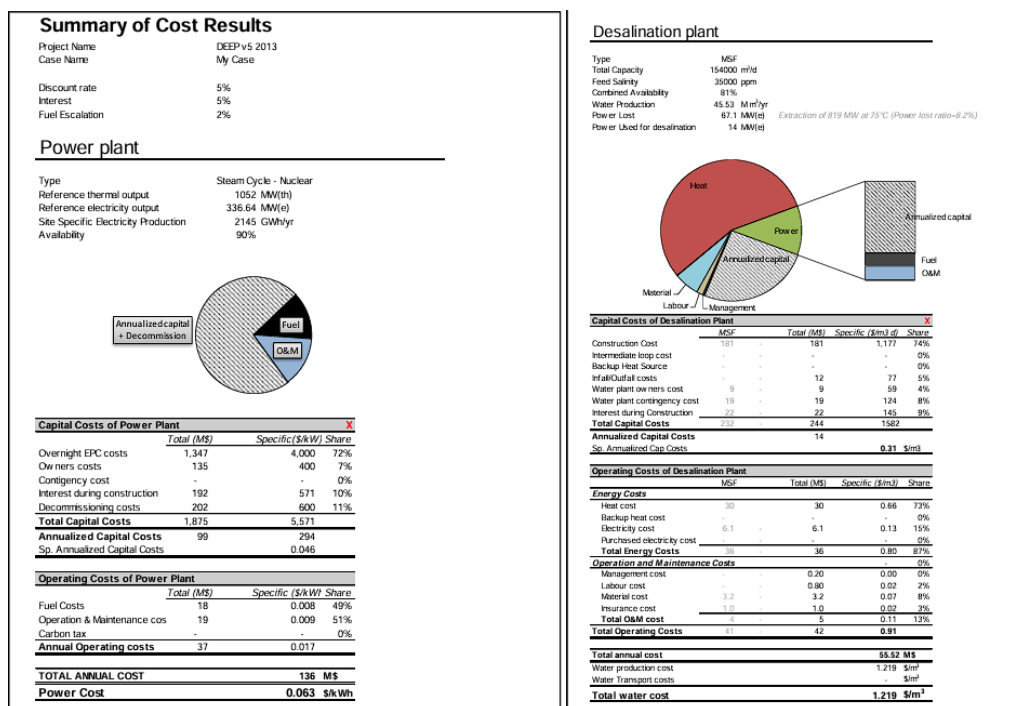


Figura 3.18: Exportação e inspeção detalhada dos resultados da simulação.

Essa estrutura modular do DEEP permite ao usuário explorar diferentes configurações e realizar análises detalhadas do desempenho técnico de unidades de dessalinização acopladas a fontes nucleares, com flexibilidade e transparência nos resultados obtidos.

3.3 Destilação por Membranas

3.3.1 Modelo Matemático

A Destilação por Membranas por Contato Direto (DCMD) é uma técnica de separação termo-hidrodinâmica baseada no transporte simultâneo de calor e massa através de uma membrana hidrofóbica microporosa. O processo é conduzido pela diferença de pressão de vapor de água entre os dois lados da membrana, induzida por um gradiente de temperatura entre os fluidos de alimentação quente e resfriamento.

O modelo utilizado neste trabalho segue a formulação desenvolvida por [1], que trata os domínios de escoamento no canal de alimentação (shell side), no canal de permeado (lumen side) e no interior da membrana como meios porosos unidimensionais, acoplando as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia.

Meio Poroso

A simulação direta de feixes de fibras ocas em módulos de destilação por membranas é uma tarefa computacionalmente intensiva, o que dificulta análises de otimização e integração com outros sistemas. Para tornar a modelagem mais viável computacionalmente, Kleber et al. [1] propõem um modelo de meio poroso para representar todo o módulo de fibras ocas. Segundo os autores, trata-se da primeira aplicação desse tipo de modelo para análise de módulos de destilação por membranas com fibras ocas, embora abordagens semelhantes já tenham sido utilizadas com sucesso em áreas como extração de petróleo, reatores nucleares e dispersão de contaminantes.

O módulo é concebido com três fases: *shell*, *lumen* e membrana, conforme ilustrado na Figura 3.19. No entanto, a fase da membrana é modelada separadamente, não sendo incluída no modelo poroso. Assim, os modelos de meio poroso são aplicados apenas às fases *shell* e *lumen*, conforme representado nas Figuras 3.19a e 3.19c. Cada uma dessas fases tem suas equações de conservação associadas ao modelo poroso.

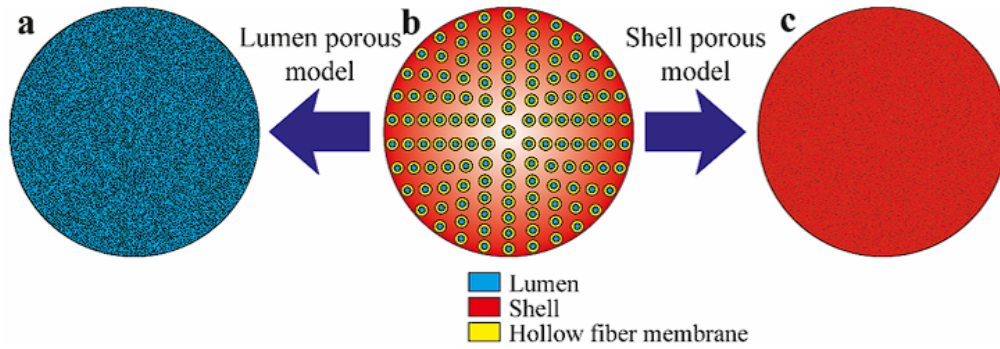


Figura 3.19: Representação esquemática do módulo com três fases: (a) modelo poroso para o *lumen*, (b) corte transversal das três fases do módulo, (c) modelo poroso para o *shell* [1].

Os domínios completos dos modelos porosos para o lado *lumen* e *shell* são representados por cilindros que coincidem com a forma interna do recipiente que contém o feixe de fibras ocas. Assume-se que as fibras estão distribuídas uniformemente ao longo da seção transversal do módulo, com seus eixos paralelos ao eixo do recipiente. A geometria detalhada desses modelos é apresentada na Figura 3.20.

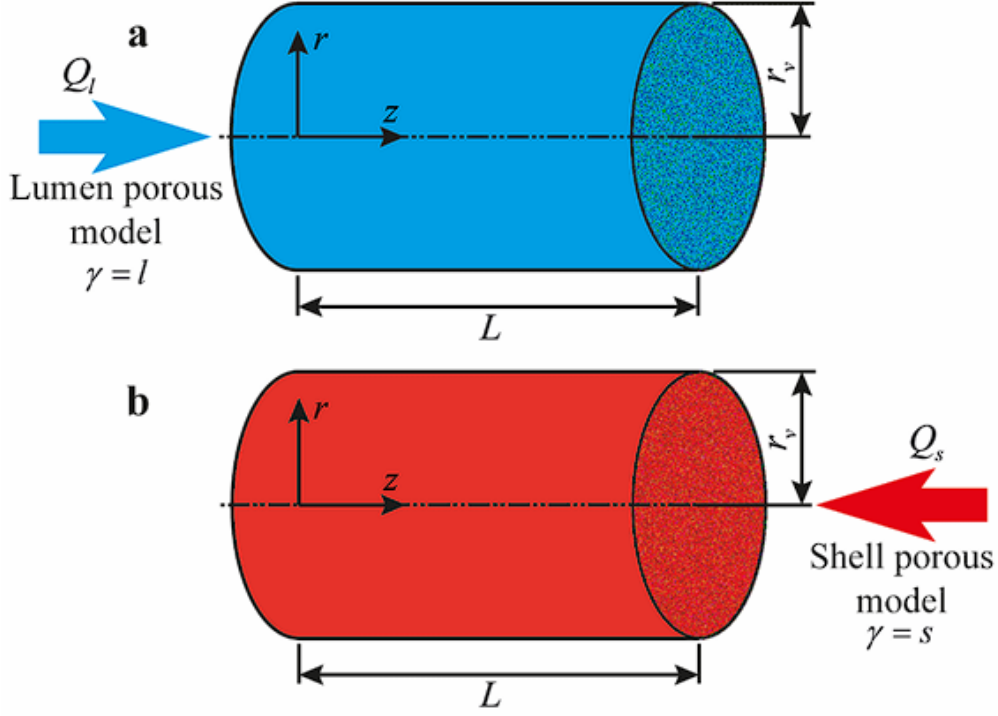


Figura 3.20: Geometria dos modelos de meio poroso: (a) modelo para o lado *lumen*, (b) modelo para o lado *shell*. O escoamento de água ocorre da esquerda para a direita no *lumen*, e no sentido oposto no *shell* [1].

A porosidade da fase γ (com $\gamma = l$ para o *lumen* e $\gamma = s$ para o *shell*) é definida como a razão entre o volume ocupado pelo fluido e o volume total do recipiente. As expressões para a porosidade são:

$$\varepsilon_{\gamma} = \begin{cases} 1 - \frac{N_{\text{fbr}} r_s^2}{r_v^2}, & \text{se } \gamma = s \\ \frac{N_{\text{fbr}} r_l^2}{r_v^2}, & \text{se } \gamma = l \end{cases} \quad (3.7)$$

onde N_{fbr} é o número de membranas de fibras ocas, r_s é o raio externo das membranas, r_l o raio interno das membranas e r_v o raio do vaso do módulo.

A área superficial específica da fase γ , definida como a razão entre a área disponível para os fenômenos de transporte e o volume do recipiente, é dada por:

$$a_{\gamma} = \frac{2N_{\text{fbr}} r_{\gamma}}{r_v^2}, \quad (3.8)$$

onde r_{γ} é o raio de interesse em cada fase (externa ou interna da fibra, conforme o domínio).

Essas definições geométricas e estruturais do meio poroso formam a base do modelo unidimensional adotado para descrever os escoamentos nos canais *lumen* e *shell*, que serão detalhados na próxima subsubseção.

Modelo de Escoamento

O escoamento nos domínios *shell* (casco) e *lumen* (tubo) é modelado por meio da Lei de Darcy para meios porosos anisotrópicos, assumida como apropriada para representar o comportamento do fluido no interior do módulo contendo o feixe de membranas [1]. A equação de conservação de massa é expressa por:

$$\nabla \cdot \vec{u}_\gamma = 0, \quad (3.9)$$

e o campo de velocidades médias é definido por:

$$\vec{u}_\gamma = \frac{K_\gamma}{\mu_\gamma} \nabla p_{f,\gamma}, \quad (3.10)$$

onde \vec{u}_γ é a velocidade média da fase no domínio γ , $p_{f,\gamma}$ é a pressão média da fase, μ_γ é a viscosidade dinâmica do fluido e K_γ é o tensor de permeabilidade do meio poroso.

As condições de contorno são dadas por:

$$\vec{u}_\gamma = \vec{u}_{e,\gamma}, \quad \text{na entrada} \quad (3.11)$$

$$\vec{u}_\gamma \cdot \hat{n} = 0, \quad \text{nas paredes} \quad (3.12)$$

onde $\vec{u}_{e,\gamma}$ é a velocidade média de entrada da fase γ e \hat{n} é o versor normal às paredes.

Assume-se que o escoamento é completamente desenvolvido, axisimétrico e do tipo "plug flow", ou seja, com perfil de velocidade axial uniforme. A partir disso e do princípio de conservação de massa, a componente axial da velocidade média pode ser escrita como:

$$u_\gamma = \begin{cases} -\frac{Q_s}{\pi r_v^2}, & \text{se } \gamma = s \\ \frac{Q_l}{\pi r_v^2}, & \text{se } \gamma = l \end{cases} \quad (3.13)$$

onde u_γ é a componente axial da velocidade média da fase γ , Q_γ é a vazão volumétrica da fase e r_v é o raio do vaso do módulo.

Modelo de Transferência de Calor

A transferência de calor nos domínios porosos do módulo DCMD — representando os lados casco e tubo — é modelada por uma equação de energia em regime permanente que considera convecção axial e difusão térmica radial. A forma geral da equação é dada por:

$$\rho_\gamma c_{p,\gamma} \vec{u}_\gamma \cdot \nabla T_\gamma = \nabla \cdot (k_\gamma \varepsilon_\gamma \nabla T_\gamma) - a_\gamma h_\gamma (T_\gamma - T_{m,\gamma}), \quad (3.14)$$

onde ρ_γ , $c_{p,\gamma}$, k_γ , T_γ e $T_{m,\gamma}$ são, respectivamente, a densidade, o calor específico, a condutividade térmica da água, a temperatura média do fluido e a temperatura na interface com a membrana, e h_γ é o coeficiente de transferência de calor por convecção.

Considerando isolamento térmico das paredes, as condições de contorno são dadas por:

$$T_\gamma = T_{e,\gamma}, \quad \text{na entrada} \quad (3.15)$$

$$\nabla T_\gamma \cdot \hat{n} = 0, \quad \text{nas paredes e na saída} \quad (3.16)$$

onde $T_{e,\gamma}$ é o perfil de temperatura na entrada.

Assumindo que o meio poroso é homogêneo, o campo de temperatura é axisimétrico, o número de Péclet é suficientemente alto para a condução axial ser ignorada, e que as propriedades termofísicas da água são constantes, a equação (3.14) em coordenadas cilíndricas é simplificada para:

$$\rho_\gamma c_{p,\gamma} u_\gamma \frac{\partial T_\gamma}{\partial z} = \frac{k_\gamma \varepsilon_\gamma}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_\gamma}{\partial r} \right) - a_\gamma h_\gamma (T_\gamma - T_{m,\gamma}), \quad (3.17)$$

onde z e r são, respectivamente, as coordenadas axial e radial.

Assumindo que o campo de temperatura na entrada é uniforme, as condições de contorno (3.15) e (3.16), em coordenadas cilíndricas, se tornam:

$$T_\gamma(r, mL) = T_{e,\gamma}, \quad (3.18)$$

$$\left. \frac{\partial T_\gamma}{\partial r} \right|_{r=0} = 0; \quad \left. \frac{\partial T_\gamma}{\partial r} \right|_{r=r_v} = 0, \quad (3.19)$$

onde m é definido como:

$$m = \begin{cases} 1, & \text{se } \gamma = s \\ 0, & \text{se } \gamma = l \end{cases} \quad (3.20)$$

Com base nas condições de contorno (entrada com temperatura uniforme e simetria radial), obtém-se um perfil de temperatura uniforme no sentido radial. Assim, o modelo reduz-se à forma unidimensional:

$$\rho_\gamma c_{p,\gamma} u_\gamma \frac{dT_\gamma}{dz} = -a_\gamma h_\gamma (T_\gamma - T_{m,\gamma}), \quad (3.21)$$

com condição de contorno:

$$T_\gamma(mL) = T_{e,\gamma} \quad (3.22)$$

Para fins de generalização, são definidas as seguintes variáveis adimensionais:

$$\begin{aligned} z^* &= \frac{2z}{\text{Per}_v}, & u_\gamma^* &= \frac{u_\gamma}{u_c}, & T_\gamma^* &= \frac{T_\gamma - T_{e,l}}{T_{e,s} - T_{e,l}}, \\ \rho_\gamma^* c_{p,\gamma}^* &= \frac{\rho_\gamma c_{p,\gamma}}{\rho_c c_{p,c}}, & k_\gamma^* &= \frac{k_\gamma}{k_c}, & T_{m,\gamma}^* &= \frac{T_{m,\gamma} - T_{e,l}}{T_{e,s} - T_{e,l}}, \\ \text{Pe} &= \frac{2\rho_c c_{p,c} u_c r_v}{k_c}, & \text{Nu}_\gamma &= \frac{2h_\gamma r_\gamma}{k_\gamma}, & u_c &= \frac{Q_l + Q_s}{2\pi r_v^2}, \\ \rho_c &= \frac{\rho_s + \rho_l}{2}, & c_{p,c} &= \frac{c_{p,s} + c_{p,l}}{2}, & k_c &= \frac{k_s + k_l}{2} \end{aligned}$$

Empregando estas relações, a forma adimensional das equações (3.21) e (3.22) é:

$$\rho_\gamma^* c_{p,\gamma}^* u_\gamma^* \frac{dT_\gamma^*}{dz^*} = -k_\gamma^* N_{\text{fbr}} \text{Nu}_\gamma (T_\gamma^* - T_{m,\gamma}^*), \quad (3.23)$$

com condições de contorno dadas por:

$$T_\gamma^*(mL^*) = m \quad (3.24)$$

As correlações para o número de Nusselt para os lados casco e tubo, retiradas da literatura [53, 54], são:

$$\text{Nu}_\gamma = \begin{cases} \left(4.36 + \frac{0.036 \text{Re}_\gamma \text{Pr}_\gamma (d_{h,\gamma}/L)}{1 + 0.0011 [\text{Re}_\gamma \text{Pr}_\gamma (d_{h,\gamma}/L)]^{2/3}} \right) \left[\frac{1 + N_{\text{fbr}}(r_s/r_v) \frac{r_s}{r_v}}{1 - N_{\text{fbr}}(r_s/r_v)^2 \frac{r_s}{r_v}} \right]^m, & \text{Re}_\gamma < 2100 \\ \frac{(\text{Re}_\gamma - 1000) \text{Pr}_\gamma}{1.07 + 12.7 (\text{Pr}_\gamma^{2/3} - 1) (f_\gamma/8)^{1/2}} \cdot \frac{f_\gamma}{8} \left[\frac{1 + N_{\text{fbr}}(r_s/r_v) \frac{r_s}{r_v}}{1 - N_{\text{fbr}}(r_s/r_v)^2 \frac{r_s}{r_v}} \right]^m, & \text{Re}_\gamma \geq 2100 \end{cases} \quad (3.25)$$

onde Re_γ é o número de Reynolds baseado no diâmetro hidráulico $d_{h,\gamma}$ e Pr_γ é o número de Prandtl. O fator de atrito f_γ e os diâmetros hidráulicos são determinados por:

$$f_\gamma = [1.82 \log(\text{Re}_\gamma) - 1.64]^{-2} \quad (3.26)$$

$$d_{h,l} = 2r_l \quad (3.27)$$

$$d_{h,s} = 2r_v \frac{1 - N_{\text{fbr}}(r_s/r_v)^2}{1 + N_{\text{fbr}}(r_s/r_v)} \quad (3.28)$$

A troca de calor através da membrana inclui tanto condução térmica quanto transporte de calor latente devido ao fluxo de vapor. A taxa local de transferência

de calor através da membrana é dada por:

$$\dot{q} = \frac{2\pi k_m \Delta z}{\ln(r_s/r_l)} (T_{m,s} - T_{m,l}) - 2\pi r_l \Delta z j_{w,l} h_{fg}, \quad (3.29)$$

onde \dot{q} é a taxa de transferência de calor local, k_m é a condutividade térmica da membrana, Δz é o comprimento de uma porção da membrana, $j_{w,l}$ é o fluxo de água destilada do lado do casco, $T_{m,s}$ é a temperatura na interface entre a membrana e o lado do casco, $T_{m,l}$ é a temperatura na interface entre a membrana e o lado do tubo, e h_{fg} é o calor latente de vaporização da água.

Para a convecção nos lados casco e tubo, os coeficientes de transferência de calor são utilizados para determinar a taxa de transferência de calor:

$$\dot{q} = 2\pi r_s \Delta z h_s (T_s - T_{m,s}) = 2\pi r_l \Delta z h_l (T_{m,l} - T_l), \quad (3.30)$$

onde h_s é o coeficiente de transferência de calor no lado do casco e h_l é o coeficiente de transferência de calor no lado do tubo.

As temperaturas nas interfaces da membrana (lado casco e tubo) são determinadas pelas expressões:

$$T_{m,s} = T_s - \left\{ 1 + \frac{r_s h_s (T_{m,s} - T_{m,l}) \ln(r_s/r_l)}{k_m (T_{m,s} - T_{m,l}) + j_{w,l} h_{fg} r_l \ln(r_s/r_l)} + \frac{r_s h_s}{r_l h_l} \right\}^{-1} (T_s - T_l) \quad (3.31)$$

$$T_{m,l} = T_l + \left\{ 1 + \frac{r_l h_l (T_{m,s} - T_{m,l}) \ln(r_s/r_l)}{k_m (T_{m,s} - T_{m,l}) + j_{w,l} h_{fg} r_l \ln(r_s/r_l)} + \frac{r_l h_l}{r_s h_s} \right\}^{-1} (T_s - T_l) \quad (3.32)$$

O modelo de isotensão é adotado para a condutividade térmica da membrana, resultando em:

$$k_m = k_v \varepsilon_m + (1 - \varepsilon_m) k_p, \quad (3.33)$$

onde k_v é a condutividade térmica da mistura ar-vapor, k_p é a condutividade térmica do polímero, e ε_m é a porosidade da membrana.

Para obter uma forma adimensional das equações (3.31) e (3.32), os seguintes grupos adimensionais são definidos:

$$j_{w,l}^* = \frac{c_{p,c} r_v j_{w,l}}{k_c}, \quad h_{f,g}^* = \frac{h_{fg}}{c_{p,c} (T_{e,s} - T_{e,l})}, \quad k_m^* = \frac{k_m}{k_c}$$

Empregando estas relações, a forma adimensional das equações (3.31) e (3.32) é:

$$T_{m,s}^* = T_s^* - \left\{ 1 + \frac{Nu_s k_s^* (T_{m,s}^* - T_{m,l}^*) \ln(r_s^*/r_l^*)}{2k_m^* (T_{m,s}^* - T_{m,l}^*) - 2j_{w,l}^* h_{fg}^* r_l^* \ln(r_s^*/r_l^*)} + \frac{Nu_s k_s^*}{Nu_l k_l^*} \right\}^{-1} (T_s^* - T_l^*) \quad (3.34)$$

$$T_{m,l}^* = T_l^* + \left\{ 1 + \frac{Nu_l k_l^* (T_{m,s}^* - T_{m,l}^*) \ln(r_s^*/r_l^*)}{2k_m^* (T_{m,s}^* - T_{m,l}^*) - 2j_{w,l}^* h_{fg}^* r_l^* \ln(r_s^*/r_l^*)} + \frac{Nu_l k_l^*}{Nu_s k_s^*} \right\}^{-1} (T_s^* - T_l^*) \quad (3.35)$$

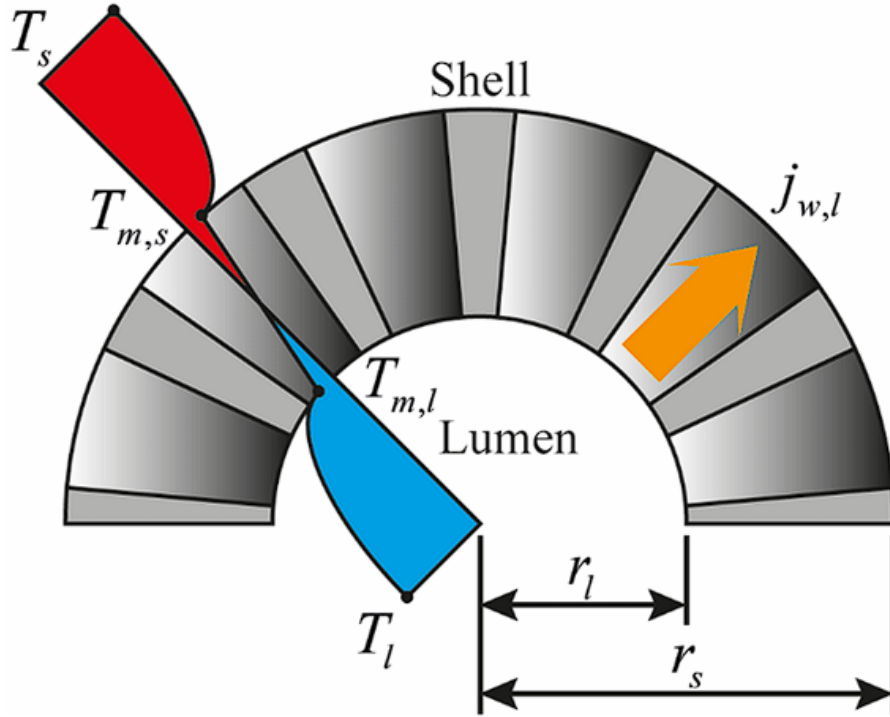


Figura 3.21: Ilustração de metade da fibra oca. Inclui perfil de temperatura, convenção de sinais para o fluxo de vapor d'água destilada e dimensões da seção transversal da membrana [1].

A Figura 3.21 ilustra os mecanismos de transporte térmico e de massa, com destaque para os fluxos convectivos nos domínios fluidos e os processos de condução e troca latente na membrana microporosa.

Modelo de Transferência de Massa

Para destilação por membranas de contato direto (DCMD), a influência da polarização da concentração é pequena para salinidades menores que 50g/kg, então a concentração de sal é considerada uniforme no fluxo de alimentação. Conforme validado na literatura, o Modelo do Gás Difuso (Dusty Gas Model - DGM) é empregado para descrever o transporte de massa. Assumindo que a difusão na superfície

é pequena e que o mecanismo de transporte viscoso é desprezível para DCMD, o DGM torna-se:

$$\frac{N_w}{D_w^k} + \frac{p_a N_w - p_w N_a}{D_{wa}^0} = -\frac{1}{RT_m} \nabla p_w, \quad (3.36)$$

onde N_w é o fluxo molar de vapor de água, N_a é o fluxo molar de ar, p_a é a pressão parcial do ar dentro do poro, p_w é a pressão parcial do vapor de água dentro do poro, D_w^k é a difusividade de Knudsen do vapor de água, D_a^k é a difusividade de Knudsen do ar, D_{wa}^0 é a difusividade molecular do vapor de água no ar, D_{aw}^0 é a difusividade molecular do ar no vapor de água, R é a constante universal dos gases, e T_m é a temperatura média ao longo da membrana.

O ar pode ser considerado aproximadamente em repouso dentro dos poros da membrana, ou seja, $N_a \approx 0$. Temos, então:

$$\frac{N_w}{D_w^k} + \frac{p_a N_w}{D_{wa}^0} = -\frac{1}{RT_m} \nabla p_w \quad (3.37)$$

Empregando a lei de Dalton na equação (3.37) e integrando, temos:

$$N_{w,l} = \frac{D_{wa}^0}{RT_m r_l \ln(r_s/r_l)} \ln \left(\frac{D_{wa}^0 - D_{eff} p_s}{D_{wa}^0 - D_{eff} p_l} \right), \quad (3.38)$$

onde $N_{w,l}$ é o fluxo molar de água destilada baseado na área interna da membrana de fibra oca, D_{eff} é a difusividade efetiva, p_s é a pressão parcial de vapor de água na interface entre a membrana e o lado do casco, e p_l é a pressão parcial de vapor na interface entre a membrana e o lado do tubo.

As difusividades podem ser obtidas a partir das relações:

$$D_{wa}^0 = 4,46 \cdot 10^{-6} \frac{\varepsilon_m}{\tau_m} T_m^{2,334}, \quad D_w^k = \frac{\varepsilon_m d_p}{\tau_m} \sqrt{\frac{8RT_m}{\pi M_w}}, \quad D_{eff} = \frac{D_w^k D_{wa}^0}{D_{wa}^0 + P D_w^k}, \quad (3.39)$$

onde τ_m é a tortuosidade da membrana, d_p é o diâmetro médio dos poros da membrana, M_w é a massa molar da água, e P é a pressão total nos poros da membrana.

A tortuosidade é dada por:

$$\tau_m = \frac{1}{\varepsilon_m} \quad (3.40)$$

As pressões parciais de vapor de água nas interfaces podem ser determinadas a partir da pressão de vapor na temperatura de cada interface e o coeficiente de atividade da seguinte maneira:

$$p_\gamma = (1 - x_{salt,\gamma}) \alpha_\gamma p_{v,\gamma}, \quad (3.41)$$

com coeficiente de atividade dado por

$$\alpha_\gamma = 1 - 0,5x_{salt,\gamma} - 10x_{salt,\gamma}^2, \quad (3.42)$$

onde $x_{salt,\gamma}$ é a fração molar de sal na fase γ , α_γ é o coeficiente de atividade, e $p_{v,\gamma}$ é a pressão de vapor na interface entre a membrana e a fase γ . A expressão para o coeficiente de atividade foi ajustada com dados experimentais para salinidades de até 290g/kg.

O fluxo mássico de água destilada pode ser determinado a partir da sua parte molar da seguinte maneira:

$$j_{w,l} = M_w N_{w,l} \quad (3.43)$$

Pós-Processamento dos Resultados

Com base nas variáveis calculadas pelos modelos fluidodinâmico, térmico e de transporte de massa, são definidos indicadores de desempenho para quantificar a eficiência e o consumo energético do processo de destilação por membranas. Entre eles, destacam-se: o fluxo médio de água destilada, o *gain-output ratio* (GOR), o consumo elétrico específico (SEC) e o *mechanical gain-output ratio* (MGOR).

Fluxo médio de água destilada O fluxo médio de água destilada ao longo do módulo é calculado por:

$$\bar{j}_{w,l} = \left| \frac{1}{L} \int_0^L j_{w,l}(x) dx \right|, \quad (3.44)$$

onde $\bar{j}_{w,l}$ é o fluxo de água destilada médio.

Gain-Output Ratio (GOR) O *gain-output ratio* é definido, para sistemas de destilação por membrana, como a razão entre o calor latente transportado pelo vapor de água através da membrana e o calor total fornecido ao sistema:

$$GOR = \frac{\dot{q}_v}{\dot{q}_h}, \quad (3.45)$$

sendo o numerador dado por:

$$\dot{q}_v = \left| \int_0^L 2\pi N_{fbr} r_l j_{w,l}(z) h_{fg} dz \right|, \quad (3.46)$$

onde GOR é o gain-output ratio, \dot{q}_v é o calor total transportado através da membrana pelo vapor de água, e \dot{q}_h é o calor fornecido ao sistema.

Para um sistema sem recuperação de calor, o princípio de conservação de energia exige que o GOR esteja entre 0 e 1, o que resulta em um alto consumo de energia para o processo de MD. Para compensar este gasto de energia intenso, um sistema de recuperação de calor é proposto para ser integrado ao módulo de dessalinização, como mostrado na Figura 3.22

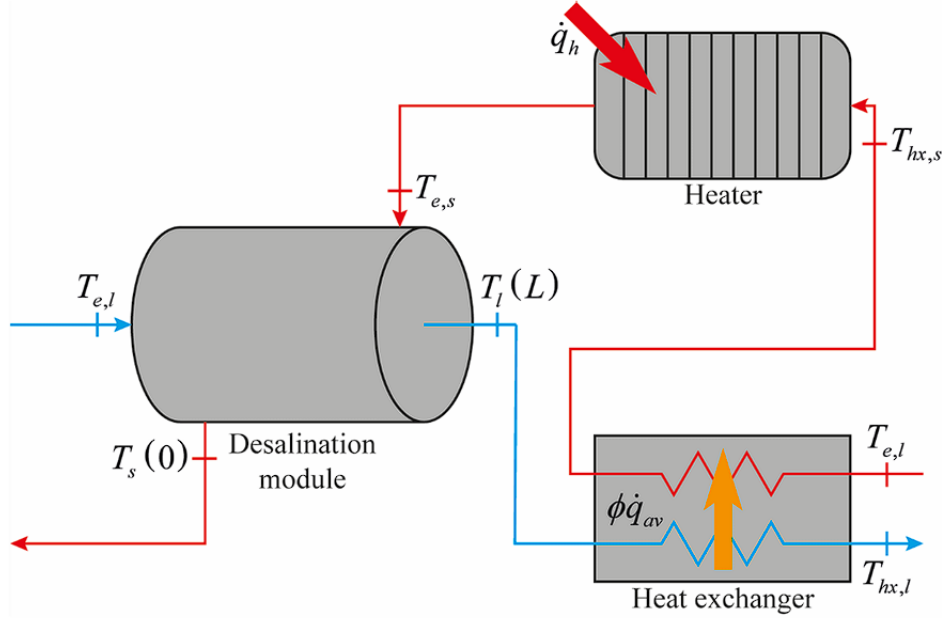


Figura 3.22: Sistema de dessalinização com trocador de calor externo para recuperação térmica [1].

GOR com recuperação de calor O sistema mostrado na Figura 3.22 assume que o fluxo quente flui no lado do casco e essa configuração será adotada neste trabalho também. A recuperação de calor será atingida por meio de um trocador de calor externo responsável por pré-aquecer a corrente de alimentação com o calor disponível da saída da corrente de permeado. Para este caso específico, o GOR é escrito como:

$$GOR = \frac{\dot{q}_v}{\dot{q}_t - \phi \dot{q}_{av}}, \quad (3.47)$$

onde:

$$\dot{q}_t = \rho_s Q_s c_{p,s} (T_{e,s} - T_{e,l}), \quad (3.48)$$

$$\dot{q}_{av} = \min [\rho_s Q_s c_{p,s}, \rho_l Q_l c_{p,l} + 2\pi N_{fbr} r_l L \bar{j}_{w,l} c_{p,l}] (T_l(L) - T_{e,l}), \quad (3.49)$$

onde \dot{q}_t é a transferência de calor necessária para elevar o fluxo de alimentação da temperatura ambiente até a temperatura de entrada no lado do casco, \dot{q}_{av} é a

transferência de calor máxima possível no trocador de calor, e ϕ é a eficiência do trocador de calor.

Perda de carga e potência de bombeamento Para regime de escoamento do tipo *plug flow*, a queda de pressão pode ser escrita como:

$$\Delta p_{f,\gamma} = \frac{\mu_\gamma}{K_{x,\gamma}} |u_\gamma| = \frac{\mu_\gamma}{K_{x,\gamma}} \frac{Q_\gamma}{\pi r_v^2}, \quad (3.50)$$

onde $K_{x,\gamma}$ é a permeabilidade na direção longitudinal. As permeabilidades são obtidas através de uma correlação para o lado do casco e usando escoamento de Poiseuille para o lado do tubo:

$$K_{x,s} = -\frac{r_s^2}{8(1 - \varepsilon_s)} [2 \ln(1 - \varepsilon_s) + 2\varepsilon_s + \varepsilon_s^2], \quad (3.51)$$

$$K_{x,l} = \frac{\varepsilon_l r_l^2}{8} \quad (3.52)$$

Escoamento em regime laminar é assumido para as equações 3.51 e 3.52, que é justificado pelo número de Reynolds para os casos analisados em [1].

A partir da queda de pressão, é possível calcular a potência das bombas hidráulicas do sistema. A potência total de bombeamento é dada pela soma dos produtos de perda de carga pela vazão volumétrica de cada fase:

$$\dot{W}_p = Q_l \Delta p_{f,l} + Q_s \Delta p_{f,s} \quad (3.53)$$

Mechanical Gain-Output Ratio (MGOR) O *mechanical gain-output ratio* (MGOR) quantifica o rendimento do sistema com base no gasto de energia mecânica para bombeamento:

$$MGOR = \frac{\dot{q}_v}{\dot{W}_p} \quad (3.54)$$

Esse indicador permite avaliar a eficiência do processo de destilação por membranas considerando tanto o aspecto térmico quanto o hidráulico, sendo particularmente útil na comparação com outras tecnologias de separação térmica.

3.3.2 Implementação Computacional no Wolfram Mathematica

A implementação computacional do modelo DCMD foi realizada no Wolfram Mathematica 11, com base na formulação físico-matemática descrita na subseção anterior e nos parâmetros extraídos de [1]. O código utiliza o método das diferenças

finitas com malha axial uniforme de 100 pontos para resolver as equações diferenciais de balanço de energia nos domínios de escoamento. As equações algébricas não-lineares das interfaces da membrana ((3.34) e (3.35)) são resolvidas via `FindRoot`, enquanto os perfis térmicos ao longo do módulo são obtidos com `NDSolve`. O controle de convergência é feito por critério de erro relativo, com tolerância de 10^{-5} e máximo de 1000 iterações.

O modelo foi estruturado para aceitar entradas paramétricas como geometrias, propriedades físicas e condições de contorno (vazão, temperatura, salinidade). A partir disso, são obtidos os perfis de temperatura, fluxo mássico de vapor de água, perdas de calor e indicadores de desempenho como GOR, SEC, MGOR e eficiência térmica. O pós-processamento inclui rotinas de interpolação e integração numérica para cálculo de vazões e transferências de calor, além de visualizações gráficas.

3.4 Produção de Hidrogênio

A eletrólise da água utilizando a tecnologia de Membrana de Troca Protônica (PEM) representa uma das abordagens mais promissoras para a produção de hidrogênio de alta pureza, especialmente quando associada a fontes de energia de baixa emissão de carbono, como reatores nucleares. Sua operação em alta pressão elimina a necessidade de compressão posterior do gás produzido, o que reduz o consumo energético total do processo.

Nesta seção, apresenta-se o modelo eletroquímico-termodinâmico proposto por [2], desenvolvido para simular o desempenho de um eletrolisador PEM operando sob altas pressões. O modelo considera as principais perdas associadas ao processo eletrolítico - ativação, difusão e perdas ôhmicas - e permite prever a curva de polarização da célula em diferentes condições de temperatura, pressão e densidade de corrente. Além disso, o modelo permite a estimativa da produção de hidrogênio com base na potência elétrica fornecida.

A Seção 3.4.1 detalha o modelo matemático adotado, enquanto a Seção 3.4.2 descreve a implementação computacional desenvolvida em linguagem Python para simular o processo de eletrólise com base nesse modelo.

3.4.1 Modelo Matemático

O modelo desenvolvido por [2] descreve o comportamento eletroquímico de uma célula de eletrólise do tipo PEM operando sob alta pressão. A tensão real da célula (V) é determinada a partir da tensão termodinâmica ideal (tensão de circuito aberto) somada às perdas internas ao sistema, conhecidas como sobrepotenciais. Essas perdas são devidas a fenômenos cinéticos, resistivos e de transporte de massa.

O modelo é expresso pela seguinte equação geral:

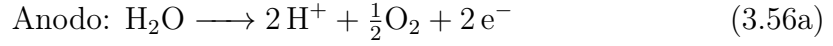
$$V = E + \eta_{\text{act}} + \eta_{\text{ohm}} + \eta_{\text{diff}} \quad (3.55)$$

onde E é a tensão de circuito aberto (open-circuit voltage, OCV), η_{act} é o sobrepotencial de ativação, η_{ohm} é o sobrepotencial ôhmico, e η_{diff} é o sobrepotencial difusivo.

A seguir, cada um desses termos é detalhado.

Tensão de Circuito Aberto (E)

O processo de eletrólise da água do tipo PEM pode ser descrito por duas semi-reações na forma



A tensão de circuito aberto (E) representa o limite termodinâmico mínimo necessário para que a eletrólise da água ocorra de forma espontânea, sendo determinada pela variação da energia livre de Gibbs da reação global.

A energia livre de Gibbs é calculada por:

$$\Delta G = \Delta H - T_{\text{cell}} \cdot \Delta S, \quad (3.57)$$

onde ΔH e ΔS são a variação de entalpia e entropia, respectivamente, entre produtos e reagentes, e T_{cell} é a temperatura da célula de eletrólise em kelvin (K).

Para a reação anódica, a entalpia dos reagentes e produtos pode ser escrita como

$$H_{\text{an},r} = H_{\text{H}_2\text{O}}(T_a), \quad H_{\text{an},p} = 2H_{\text{H}^+}(T_a) + \frac{1}{2}H_{\text{O}_2}(T_a) \quad (3.58)$$

enquanto a entropia para as mesmas espécies é dada por

$$S_{\text{an},r} = S_{\text{H}_2\text{O}}(T_a, p_{\text{H}_2\text{O}}), \quad S_{\text{an},p} = 2S_{\text{H}^+}(T_a, p_{\text{H}^+}) + \frac{1}{2}S_{\text{O}_2}(T_a, p_{\text{O}_2}) \quad (3.59)$$

De maneira similar, para a reação catódica

$$\begin{aligned} H_{\text{cat},r} &= 2H_{\text{H}^+}(T_c), & H_{\text{cat},p} &= H_{\text{H}_2}(T_c), \\ S_{\text{cat},r} &= 2S_{\text{H}^+}(T_c, p_{\text{H}^+}), & S_{\text{cat},p} &= S_{\text{H}_2}(T_c, p_{\text{H}_2}) \end{aligned} \quad (3.60)$$

Agregando as partes das semi-reações na reação global, temos:

$$\begin{aligned}
\Delta H &= H_p - H_r \\
&= H_{an,p} + H_{cat,p} - H_{an,r} - H_{cat,r} \\
&= 2H_{H^+}(T_a) + \frac{1}{2}H_{O_2}(T_a) + H_{H_2}(T_c) - H_{H_2O}(T_a) - 2H_{H^+}(T_c) \quad (3.61)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Delta S &= S_p - S_r \\
&= S_{an,p} + S_{cat,p} - S_{an,r} - S_{cat,r} \\
&= 2S_{H^+}(T_a, p_{H^+}) + \frac{1}{2}S_{O_2}(T_a, p_{O_2}) + S_{H_2}(T_c, p_{H_2}) - S_{H_2O}(T_a, p_{H_2O}) \\
&\quad - 2S_{H^+}(T_c, p_{H^+}) \quad (3.62)
\end{aligned}$$

Assumindo que $T_a = T_c = T_{cell}$, e desprezando as diferenças nas propriedades dos prótons, temos:

$$\Delta H = \frac{1}{2}H_{O_2}(T_{cell}) + H_{H_2}(T_{cell}) - H_{H_2O}(T_{cell}) \quad (3.63)$$

$$\Delta S = \frac{1}{2}S_{O_2}(T_{cell}, p_{O_2}) + S_{H_2}(T_{cell}, p_{H_2}) - S_{H_2O}(T_{cell}, p_{H_2O}) \quad (3.64)$$

As entalpias molares das diferentes espécies gasosas podem ser determinadas a partir de:

$$H_j(T) = \bar{h}_{f,j}^0 + \bar{h}_j(T) - \bar{h}_j(T_0), \quad (3.65)$$

onde j refere-se às espécies O_2 ou H_2 , $\bar{h}_{f,j}^0$ é a entalpia molar de formação das espécies j em condições padrão, \bar{h}_j é a entalpia molar das espécies j , e T_0 é a temperatura padrão (273,15 K).

No caso da água líquida ($H_2O(l)$), a entalpia molar é dada por:

$$H_{H_2O(l)}(T) = \bar{h}_{f,H_2O(l)}^\circ + \int_{T_0}^T C_{p,H_2O(l)}(T') dT', \quad (3.66)$$

onde $\bar{h}_{f,H_2O(l)}^\circ = -285,83 \frac{kJ}{mol}$ é a entalpia molar de formação padrão da água líquida, e $C_{p,H_2O(l)}(T')$ é o calor específico da água líquida em função da temperatura.

A entropia molar é dada por:

$$S_j(T, P) = \bar{s}_j(T, P) - \bar{s}_j^0(T_0, P_0), \quad (3.67)$$

onde \bar{s}_j^0 é a entropia molar da espécie j em condições padrão, \bar{s}_j é a entropia molar

da espécie j , e $P_0 = 100\text{kPa}$ é a pressão padrão.

Para as espécies gasosas, a entalpia e a entropia molar podem ser determinadas a partir das relações:

$$\bar{h}_j(T) = a_j T + \frac{b_j}{2} T^2 + \frac{c_j}{3} T^3 + \frac{d_j}{4} T^4, \quad (3.68)$$

$$\bar{s}_j(T_0, P_0) - \bar{s}_j^0(T, P) = a_j \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) + b_j (T - T_0) + \frac{c_j}{2} (T^2 - T_0^2) + \frac{d_j}{3} (T^3 - T_0^3) - R \ln \left(\frac{P}{P_0} \right), \quad (3.69)$$

onde R é a constante universal dos gases ($8,314 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$).

Para a água líquida no ânodo da célula PEM, à pressão constante e sem mudança de fase, a entropia molar é dada por:

$$\bar{s}_{\text{H}_2\text{O}}(T, P) - \bar{s}_{\text{H}_2\text{O}}^0(T_0, P_0) = \int_{T_0}^T \frac{C_{p,\text{H}_2\text{O}}(T')}{T'} dT', \quad (3.70)$$

onde $\bar{s}_{\text{H}_2\text{O}}(T, P)$ é a entropia molar da água líquida, $\bar{s}_{\text{H}_2\text{O}}^0 = 69,91 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$ é a entropia molar padrão da água líquida.

Os valores para os coeficientes e entalpia de formação das espécies gasosas são mostrados na tabela 3.1

Tabela 3.1: Coeficientes termodinâmicos das espécies gasosas envolvidas na eletrólise da água [4].

Espécie	a_j	b_j	c_j	d_j	$\bar{h}_{f,j}^0 \text{ [J/mol]}$
O ₂	25,48	1,520e-2	-0,7155e-5	1,312e-9	0
H ₂	29,11	-0,1916e-2	0,4003e-5	-0,8704e-9	0

Substituindo os coeficientes, a variação de entalpia ΔH torna-se:

$$\begin{aligned} \Delta H(T_{\text{cell}}) = & 285830 + 41,85(T_{\text{cell}} - T_0) + 0,2842 \times 10^{-2}(T_{\text{cell}}^2 - T_0^2) \\ & + 0,1418 \times 10^{-6}(T_{\text{cell}}^3 - T_0^3) - 0,536 \times 10^{-10}(T_{\text{cell}}^4 - T_0^4) \\ & - \int_{T_0}^{T_{\text{cell}}} C_{p,\text{H}_2\text{O(l)}}(T') dT' \end{aligned} \quad (3.71)$$

E a variação de entropia ΔS é:

$$\begin{aligned}
\Delta S(T_{cell}, P) = & 41,85 \ln \left(\frac{T_{cell}}{T_0} \right) + 0,5684 \times 10^{-2} (T_{cell} - T_0) \\
& + 0,21275 \times 10^{-6} (T_{cell}^2 - T_0^2) + 7,147 \times 10^{-11} (T_{cell}^3 - T_0^3) \\
& - R \ln \left(\frac{p_{O_2}^{1/2} p_{H_2}}{p_0^{3/2}} \right) - \int_{T_0}^{T_{cell}} \frac{C_{p,H_2O}(T')}{T'} dT'
\end{aligned} \tag{3.72}$$

E o potencial reversível pode ser escrito como:

$$E_{rev} = \frac{\Delta G}{2F}, \tag{3.73}$$

onde E_{rev} é o potencial reversível e $F = 96.485 \text{ A}\cdot\text{s/mol}$ é a constante de Faraday.

Sobrepotencial de Ativação (η_{act})

Este sobrepotencial representa a energia necessária para superar as barreiras cinéticas das reações eletroquímicas nos eletrodos. Ele é calculado com base na equação de Butler–Volmer:

$$i = i_0 \left[\exp \left(\frac{\alpha_1 F}{RT} \eta_{act} \right) - \exp \left(\frac{\alpha_2 F}{RT} \eta_{act} \right) \right], \tag{3.74}$$

onde i é a densidade de corrente, i_0 é a densidade de corrente de troca da reação, α_1 e α_2 são, respectivamente, os coeficientes de transferência de carga direta e reversa, e η_{act} é o sobrepotencial de ativação.

Assumindo que $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, a equação (3.74) pode ser invertida, ficando:

$$\eta_{act} = \frac{RT}{\alpha F} \arcsin \left(\frac{i}{2i_0} \right) \tag{3.75}$$

Aplicando a equação (3.75) para o ânodo e cátodo, tem-se:

$$\eta_{act,an} = \frac{RT_{cell}}{\alpha_{an} F} \arcsin \left(\frac{i}{2i_{0,an}} \right), \quad \eta_{act,cat} = \frac{RT_{cell}}{\alpha_{cat} F} \arcsin \left(\frac{i}{2i_{0,cat}} \right), \tag{3.76}$$

onde $\alpha_{an} = 2,0$ e $\alpha_{cat} = 0,5$.

Sobrepotencial Difusivo (η_{diff})

O sobrepotencial difusivo está relacionado às limitações de transporte de massa no interior dos eletrodos porosos da célula eletrolítica. Durante a eletrólise da água, é necessário garantir o suprimento contínuo de água ao sítio reacional, bem como a remoção eficiente dos produtos (hidrogênio e oxigênio). Como as reações eletroquí-

micas ocorrem na interface membrana-eletrodo, o transporte dessas espécies ocorre predominantemente por difusão através da estrutura porosa dos eletrodos.

Esses fluxos encontram resistência à medida que aumentam, especialmente em altas densidades de corrente, o que leva à perda de energia e à necessidade de uma tensão adicional imposta à célula. Tal fenômeno é descrito pelas leis de Fick, considerando que as misturas nas interfaces envolvem apenas dois componentes: O_2/H_2O no ânodo e H_2/H_2O no cátodo.

A concentração dos produtos nos sítios reacionais pode aumentar se não forem removidos com rapidez suficiente, prejudicando a cinética das reações. O sobrepotencial difusivo pode ser estimado pela equação de Nernst:

$$\eta_{\text{diff}} = \frac{RT}{zF} \ln \left(\frac{C_1}{C_0} \right), \quad (3.77)$$

onde C_1 e C_0 representam, respectivamente, a concentração local e a concentração de referência da espécie analisada.

Aplicando essa equação para os eletrodos da célula, obtêm-se:

$$\eta_{\text{diff,an}} = \frac{RT_{\text{an}}}{4F} \ln \left(\frac{C_{O_2,\text{me}}}{C_{O_2,\text{me},0}} \right), \quad (3.78)$$

$$\eta_{\text{diff,cat}} = \frac{RT_{\text{cat}}}{2F} \ln \left(\frac{C_{H_2,\text{me}}}{C_{H_2,\text{me},0}} \right), \quad (3.79)$$

onde $C_{O_2,\text{me}}$ e $C_{H_2,\text{me}}$ são as concentrações de oxigênio e hidrogênio na interface membrana-eletrodo.

Fluxos Mássicos na Célula

O modelo também considera os fluxos mássicos de água, hidrogênio e oxigênio dentro da célula eletrolítica. Esses fluxos são fundamentais para o correto fechamento do balanço de massa e para a avaliação da concentração de espécies nas interfaces da membrana, as quais influenciam diretamente os sobrepotenciais difusivos e a tensão de circuito aberto.

A Figura 3.23 ilustra os principais fluxos envolvidos no interior da célula PEM de alta pressão. Observa-se que a água é fornecida ao compartimento anódico e pode ser consumida pela reação eletroquímica, transportada por arraste eletro-osmótico ($\dot{N}_{H_2O, \text{eo}}$), por difusão ($\dot{N}_{H_2O, \text{dd}}$) ou impulsionada por diferença de pressão ($\dot{N}_{H_2O, \text{pe}}$) através da membrana. Além disso, os produtos da reação - hidrogênio e oxigênio - devem ser adequadamente removidos para evitar acúmulo e perdas por difusão.

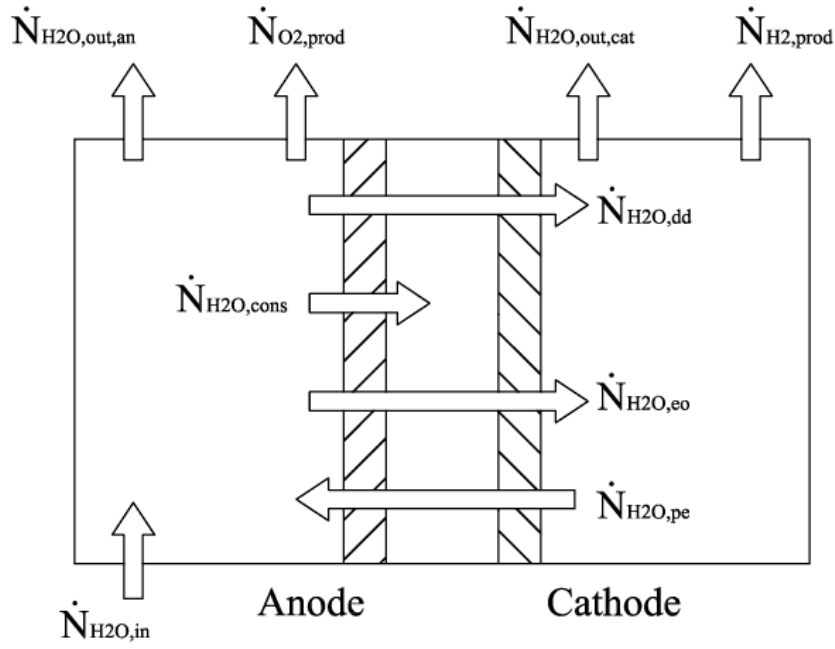


Figura 3.23: Fluxos mássicos no interior da célula eletrolítica PEM. Adaptado de [2].

A reação eletroquímica consome moléculas de água e produz hidrogênio e oxigênio, segundo as seguintes relações derivadas da Lei de Faraday:

$$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{cons}} = \frac{I}{2F}, \quad \dot{N}_{\text{H}_2, \text{prod}} = \frac{I}{2F}, \quad \dot{N}_{\text{O}_2, \text{prod}} = \frac{I}{4F} \quad (3.80)$$

onde $\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{cons}}$ é a taxa de consumo molar de água, $\dot{N}_{\text{H}_2, \text{prod}}$ e $\dot{N}_{\text{O}_2, \text{prod}}$ são as taxas de produção molar de hidrogênio e oxigênio, respectivamente, e I é a corrente elétrica.

O fluxo líquido de água através da membrana é dado por:

$$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{m}} = \dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{dd}} + \dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{eo}} - \dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{pe}} \quad (3.81)$$

O balanço de massa nos compartimentos resulta nas relações:

$$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{out}, \text{an}} = \dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{in}} - \dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{m}} - \dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{cons}} \quad (3.82)$$

$$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{out}, \text{cat}} = \dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{m}} \quad (3.83)$$

Os três diferentes fenômenos associados ao transporte de massa pela membrana são detalhados abaixo:

$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{dd}}$: esta contribuição deve-se ao fato de que há um gradiente de concentração de água através da membrana polimérica, portanto, um fluxo de água surge do ânodo para o cátodo segundo a relação:

$$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{dd}} = \frac{AD_w}{\delta_m} (C_{\text{H}_2\text{O}, \text{me}, \text{cat}} - C_{\text{H}_2\text{O}, \text{me}, \text{an}}), \quad (3.84)$$

onde D_w é o coeficiente de difusão da água na membrana, δ_m é a espessura da membrana, e $C_{\text{H}_2\text{O}, \text{me}, \text{cat}}$ e $C_{\text{H}_2\text{O}, \text{me}, \text{an}}$ são as concentrações de água nos dois lados da membrana.

$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{eo}}$: o arrasto eletro-osmótico surge devido ao transporte dos íons H^+ pela membrana, do ânodo para o cátodo, que carregam algumas moléculas de água consigo. Este fenômeno é quantificado através do coeficiente de arrasto eletro-osmótico $n_d [\text{mol}_{\text{H}_2\text{O}}/\text{mol}_{\text{H}^+}]$ e a taxa molar de transferência de água pode ser expressa através de:

$$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{eo}} = n_d \frac{I}{F} \quad (3.85)$$

$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{pe}}$: o transporte de água devido ao gradiente de pressão através da membrana é o único fluxo do cátodo para o ânodo. Ele é quantificado de acordo com a lei de Darcy:

$$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, \text{pe}} = \frac{K_{\text{Darcy}} A \rho_{\text{H}_2\text{O}}}{\mu_{\text{H}_2\text{O}} M_{m, \text{H}_2\text{O}}}, \quad (3.86)$$

onde K_{Darcy} é a permeabilidade da membrana, A é a área da membrana, $\rho_{\text{H}_2\text{O}}$, $\mu_{\text{H}_2\text{O}}$ e $M_{m, \text{H}_2\text{O}}$ são a densidade, viscosidade dinâmica e massa molar da água, respectivamente.

Substituindo as relações acima na equação (3.81), obtém-se:

$$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O}, m} = \frac{AD_w}{\delta_m} (C_{\text{H}_2\text{O}, \text{me}, \text{cat}} - C_{\text{H}_2\text{O}, \text{me}, \text{an}}) + n_d \frac{I}{F} - \frac{K_{\text{Darcy}} A \rho_{\text{H}_2\text{O}}}{\mu_{\text{H}_2\text{O}} M_{m, \text{H}_2\text{O}}} \quad (3.87)$$

Os fluxos mássicos de água em direção à membrana nos lados do ânodo e do cátodo podem ser determinados, respectivamente, como:

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}, \text{an}} = \frac{D_{\text{eff}, \text{an}}}{\delta_{\text{an}}} (C_{\text{H}_2\text{O}, \text{ch}, \text{an}} - C_{\text{H}_2\text{O}, \text{me}, \text{an}}), \quad (3.88a)$$

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O}, \text{cat}} = \frac{D_{\text{eff}, \text{cat}}}{\delta_{\text{cat}}} (C_{\text{H}_2\text{O}, \text{ch}, \text{cat}} - C_{\text{H}_2\text{O}, \text{me}, \text{cat}}), \quad (3.88b)$$

que podem ser rearranjados da seguinte maneira:

$$C_{\text{H}_2\text{O},me,an} = C_{\text{H}_2\text{O},ch,an} + \frac{\dot{n}_{\text{H}_2\text{O},an}\delta_{an}}{D_{eff,an}}, \quad (3.89a)$$

$$C_{\text{H}_2\text{O},me,cat} = C_{\text{H}_2\text{O},ch,cat} + \frac{\dot{n}_{\text{H}_2\text{O},cat}\delta_{cat}}{D_{eff,cat}}, \quad (3.89b)$$

onde $D_{eff,an}$ e $D_{eff,cat}$ são os coeficientes de difusão binários de $\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$ e de $\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}$. Eles podem ser calculados aplicando-se a correção de porosidade aos coeficientes de difusão:

$$D_{eff,A-B} = D_{A-B}\varepsilon \cdot \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_p}{1 - \varepsilon_p} \right)^\alpha, \quad (3.90)$$

onde ε é a porosidade dos eletrodos, ε_p é o limiar de percolação, e α é um coeficiente empírico, assumido como 0,785.

O coeficiente de difusão binário para qualquer mistura de duas substâncias A e B pode ser estimado da seguinte maneira:

$$D_{A-B} = \frac{a \left(\frac{T}{\sqrt{T_{c,A}T_{c,B}}} \right)^b (p_c A p_{c,B})^{1/3} (T_{c,A} T_{c,B})^{5/12} \left(\frac{1}{M_{m,A}} + \frac{1}{M_{m,B}} \right)^{1/2}}{P}, \quad (3.91)$$

onde D_{A-B} é o coeficiente de difusão binário (em $[\text{cm}^2/\text{s}]$), P é a pressão (em $[\text{atm}]$), T é a temperatura (em $[\text{K}]$), a e b são coeficientes adimensionais empíricos (disponíveis na tabela 3.2), T_c , p_c e M_m são a temperatura crítica, a pressão crítica e a massa molar, respectivamente.

Tabela 3.2: Coeficientes adimensionais para uso na equação (3.91) [2].

	Pares de dois gases não polares	Pares de H_2O e um gás não polar
a	2.745×10^{-4}	3.640×10^{-4}
b	1.823	2.334

Considerando que, nos canais, a água está no estado líquido, o seguinte se aplica:

$$C_{\text{H}_2\text{O},ch,an} = \frac{\rho_{\text{H}_2\text{O}}(T_{an})}{M_{m,\text{H}_2\text{O}}}, \quad C_{\text{H}_2\text{O},ch,cat} = \frac{\rho_{\text{H}_2\text{O}}(T_{cat})}{M_{m,\text{H}_2\text{O}}} \quad (3.92)$$

Além disso, a água que passa através do ânodo é aquela que é consumida pela reação somada àquela transportada através da membrana:

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O},an} = \frac{\dot{N}_{\text{H}_2\text{O},m} + \dot{N}_{\text{H}_2\text{O},cons}}{A} \quad (3.93)$$

enquanto que para o cátodo:

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O},cat} = \frac{\dot{N}_{\text{H}_2\text{O},m}}{A} \quad (3.94)$$

Assim, podemos calcular a taxa molar de água que atravessa a membrana, a partir da seguinte expressão:

$$\dot{N}_{\text{H}_2\text{O},m} = \left[\frac{AD_w}{\delta_m} (C_{\text{H}_2\text{O},ch,cat} - C_{\text{H}_2\text{O},ch,an}) + \dot{N}_{\text{H}_2\text{O},cons} \frac{D_w}{D_{\text{eff},an}} \frac{\delta_{an}}{\delta_m} + n_d \frac{I}{F} - KA \frac{\rho_{\text{H}_2\text{O}}}{\mu_{\text{H}_2\text{O}} M_{m,\text{H}_2\text{O}}} \right] / \left(1 - \frac{D_w}{D_{\text{eff},an}} \frac{\delta_{an}}{\delta_m} - \frac{D_w}{D_{\text{eff},cat}} \frac{\delta_{cat}}{\delta_m} \right) \quad (3.95)$$

A partir disso, é possível calcular todos os outros fluxos:

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O},an} = \frac{\dot{N}_{\text{H}_2\text{O},m} + \dot{N}_{\text{H}_2\text{O},cons}}{A} = \frac{\dot{N}_{\text{H}_2\text{O},in} - \dot{N}_{\text{H}_2\text{O},out,an}}{A} \quad (3.96)$$

$$\dot{n}_{\text{H}_2\text{O},cat} = \frac{\dot{N}_{\text{H}_2\text{O},m}}{A} = \frac{\dot{N}_{\text{H}_2\text{O},out,cat}}{A} \quad (3.97)$$

$$\dot{n}_{\text{H}_2} = \frac{\dot{N}_{\text{H}_2,prod}}{A} = \frac{I}{2FA} \quad (3.98)$$

$$\dot{n}_{\text{O}_2} = \frac{\dot{N}_{\text{O}_2,prod}}{A} = \frac{I}{4FA} \quad (3.99)$$

Os fluxos molares por unidade de área através dos eletrodos permitem que sejam calculadas as pressões parciais e as concentrações, necessárias para as equações (3.72), (3.78) e (3.79):

$$\begin{aligned} \gamma_{\text{H}_2,ch} &= \frac{\dot{n}_{\text{H}_2}}{\dot{n}_{\text{H}_2} + \dot{n}_{\text{H}_2\text{O},cat}}, & \gamma_{\text{O}_2,ch} &= \frac{\dot{n}_{\text{O}_2}}{\dot{n}_{\text{O}_2} + \dot{n}_{\text{H}_2\text{O},an}}, \\ \gamma_{\text{H}_2\text{O},ch,cat} &= \frac{\dot{n}_{\text{H}_2\text{O},cat}}{\dot{n}_{\text{H}_2} + \dot{n}_{\text{H}_2\text{O},cat}}, & \gamma_{\text{H}_2\text{O},ch,an} &= \frac{\dot{n}_{\text{H}_2\text{O},an}}{\dot{n}_{\text{O}_2} + \dot{n}_{\text{H}_2\text{O},an}} \end{aligned} \quad (3.100)$$

Uma vez que as frações molares são conhecidas, podemos calcular diretamente as concentrações nos canais:

$$C_{H_2,ch} = \frac{P_{cat}\gamma_{H_2,ch}}{RT_{cell}}, \quad (3.101a)$$

$$C_{O_2,ch} = \frac{P_{an}\gamma_{O_2,ch}}{RT_{cell}}, \quad (3.101b)$$

$$C_{H_2O,ch,cat} = C_{H_2O,ch,an} = \frac{\rho_{H_2O}(T_{cell})}{M_{m,H_2O}} \quad (3.101c)$$

Aplicando a lei de Fick, na interface eletrodos-membrana:

$$C_{H_2,me} = C_{H_2,ch} + \frac{\delta_{e,cat}}{D_{eff,cat}}\dot{n}_{H_2}, \quad (3.102a)$$

$$C_{O_2,me} = C_{O_2,ch} + \frac{\delta_{e,an}}{D_{eff,an}}\dot{n}_{O_2}, \quad (3.102b)$$

$$C_{H_2O,me,cat} = C_{H_2O,ch,cat} + \frac{\delta_{e,cat}}{D_{eff,cat}}\dot{n}_{H_2O,cat}, \quad (3.102c)$$

$$C_{H_2O,me,an} = C_{H_2O,ch,an} + \frac{\delta_{e,an}}{D_{eff,an}}\dot{n}_{H_2O,an} \quad (3.102d)$$

Então as frações molares na interface eletrodos-membrana podem ser calculadas:

$$\gamma_{H_2,me} = \frac{RT_{cell}}{P_{cat}}C_{H_2,me}, \quad (3.103a)$$

$$\gamma_{O_2,me} = \frac{RT_{cell}}{P_{an}}C_{O_2,me}, \quad (3.103b)$$

$$\gamma_{H_2O,me,cat} = \frac{C_{H_2O,me,cat}}{C_{H_2O,me,cat} + C_{H_2,me}}, \quad (3.103c)$$

$$\gamma_{H_2O,me,an} = \frac{C_{H_2O,me,an}}{C_{H_2O,me,an} + C_{O_2,me}}, \quad (3.103d)$$

e as pressões parciais:

$$p_{H_2,me} = \gamma_{H_2,me}P_{cat}, \quad p_{O_2,me} = \gamma_{O_2,me}P_{an}, \quad p_{H_2O,me,an} = \gamma_{H_2O,me,an}P_{an} \quad (3.104)$$

A pressão parcial da água foi calculada baseada no ânodo, pois é esta que está envolvida na reação eletroquímica.

Sobrepotencial Ôhmico (η_{ohm})

Corresponde à queda de tensão devido à resistência à condução de íons pela membrana e de elétrons pelos eletrodos e placas condutoras. É calculado pela Lei

de Ohm, para cada célula:

$$\eta_{ohm} = R_{cell} \cdot I, \quad (3.105)$$

onde R_{cell} é a resistência elétrica da célula PEM. Sendo as células conectadas em série, a resistência equivalente da pilha pode ser calculada como a soma das resistências de cada célula. A célula é composta por eletrodos, placas e a membrana, e a resistência elétrica de cada um destes elementos deve ser avaliada. O sobrepotencial ôhmico pode ser separado e calculado da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \eta_{ohm} &= R_{cell}I = (R_{eq,an} + R_{mem} + R_{eq,cat})I \\ &= R_{mem}I + (R_{eq,an} + R_{eq,cat})I = \eta_{ohm,m} + \eta_{ohm,e}, \end{aligned} \quad (3.106)$$

sendo $R_{eq,an}$, $R_{eq,cat}$ as resistências elétricas equivalentes do ânodo e do cátodo, respectivamente, R_{mem} a resistência elétrica da membrana, $\eta_{ohm,m}$ e $\eta_{ohm,e}$ os sobrepotenciais ôhmicos da membrana e dos eletrodos, respectivamente.

Resistência Ôhmica dos Eletrodos e Placas

A resistência elétrica dos eletrodos e placas pode ser calculada a partir de:

$$R_{ohm} = \rho \frac{l}{A}, \quad (3.107)$$

onde ρ é a resistividade do material, l é o comprimento do caminho dos elétrons, e A é a área da seção transversal do material condutor. [2] modela este sistema como uma rede de resistores ôhmicos, conforme a Figura 3.24.

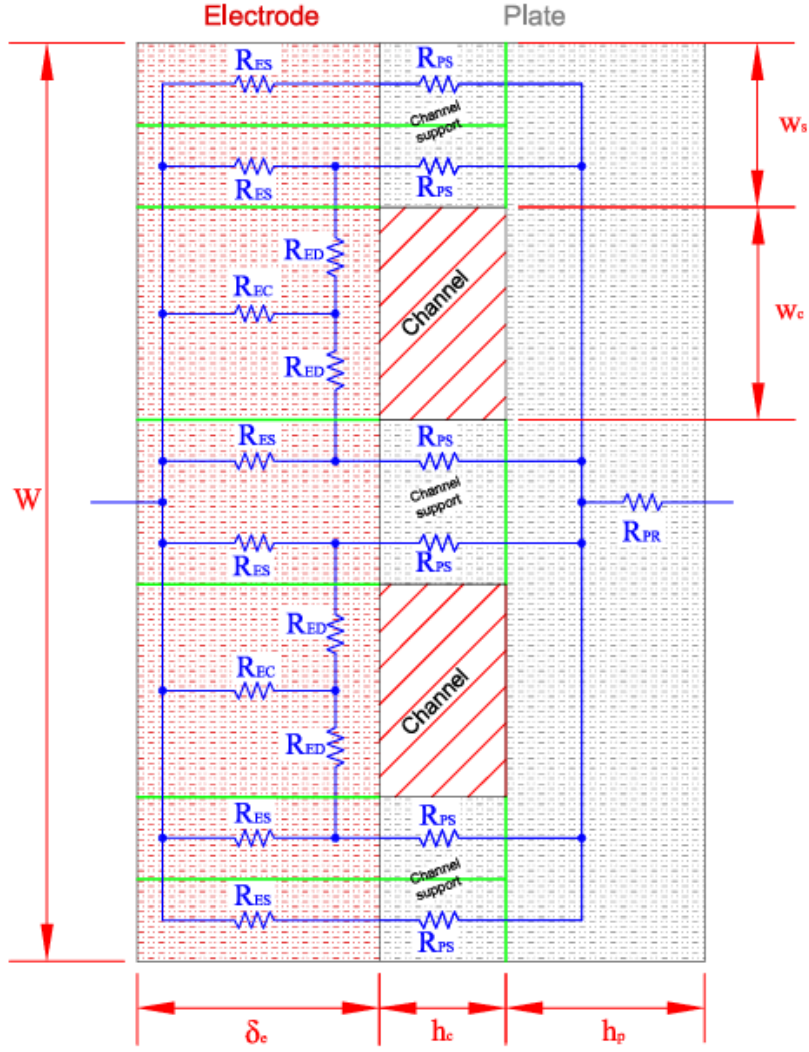


Figura 3.24: Modelo de rede de resistores para o cálculo da resistência ôhmica dos eletrodos e placa. [2].

Desta maneira, a resistência equivalente, para o ânodo e cátodo, é:

$$R_{ES,an} = \rho_{e,an} \frac{2\delta_{e,an}}{w_{s,an}L}, \quad R_{ES,cat} = \rho_{e,cat} \frac{2\delta_{e,cat}}{w_{s,cat}L} \quad (3.108)$$

Para o material em frente ao suporte do canal:

$$R_{EC,an} = \rho_{e,an} \frac{\delta_{e,an}}{w_{c,an}L}, \quad R_{EC,cat} = \rho_{e,cat} \frac{\delta_{e,cat}}{w_{c,cat}L}, \quad (3.109)$$

onde $\rho_{e,an}$ e $\rho_{e,cat}$ são, respectivamente, as resistividades dos materiais do ânodo e cátodo, $w_{c,an}$ e $w_{c,cat}$ são as larguras dos canais, $\delta_{e,an}$ e $\delta_{e,cat}$ são as espessuras do cátodo e ânodo, e L é o comprimento na direção ortogonal à Figura 3.24.

Como alguns elétrons têm que percorrer o caminho ao redor do canal, estes estão sujeitos a resistência adicional R_{ED} , calculada baseada em um caminho médio:

$$R_{ED,an} = \rho_{e,an} \frac{w_{c,an}}{4\delta_{e,an}L}, \quad R_{ED,cat} = \rho_{e,cat} \frac{w_{c,cat}}{4\delta_{e,cat}L} \quad (3.110)$$

Uma vez que estão na placa, os elétrons viajam primeiro através do suporte do canal e depois pela parte de trás. Cada suporte foi considerado dividido em duas partes, cada uma enfrentando uma resistência da seguinte forma:

$$R_{PS,an} = \rho_{pl,an} \frac{2h_{c,an}}{w_{s,an}L}, \quad R_{PS,cat} = \rho_{pl,cat} \frac{2h_{c,cat}}{w_{s,cat}L}, \quad (3.111)$$

onde $\rho_{pl,an}$ e $\rho_{pl,cat}$ são as resistividades dos eletrodos, $h_{c,an}$ e $h_{c,cat}$ as alturas dos canais.

A parte de trás da placa foi considerada inteira por sua homogeneidade:

$$R_{PR,an} = \rho_{pl,an} \frac{h_{p,an}}{A}, \quad R_{PR,cat} = \rho_{pl,cat} \frac{h_{p,cat}}{A} \quad (3.112)$$

De maneira a simplificar o cálculo da resistência equivalente de cada canal, [2] sugere uma sequência de transformações, conforme Figura 3.25.

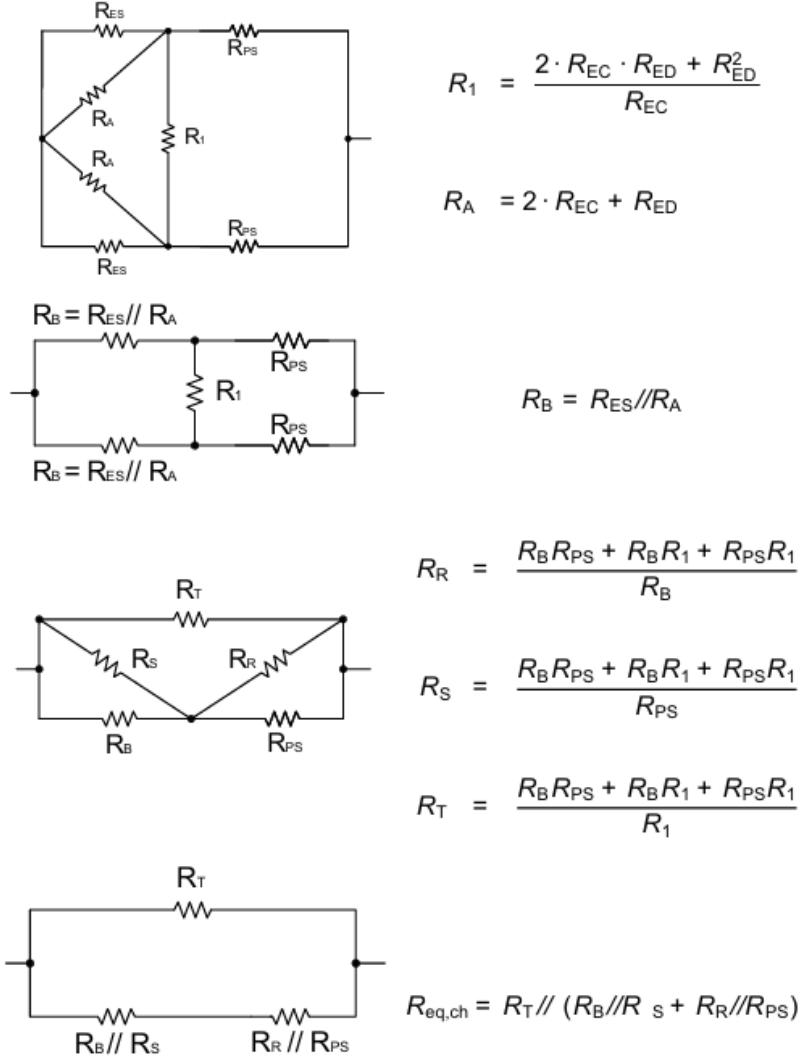


Figura 3.25: Transformações para simplificar o cálculo da resistência equivalente. [2].

Desta forma, repetindo as transformações para ambos os eletrodos, é possível calcular a resistência equivalente de cada canal:

$$R_{eq,ch,an} = R_{T,an} // (R_{B,an} // R_{S,an} + R_{R,an} // R_{PS,an}) \quad (3.113a)$$

$$R_{eq,ch,cat} = R_{T,cat} // (R_{B,cat} // R_{S,cat} + R_{R,cat} // R_{PS,cat}) \quad (3.113b)$$

Uma vez que a resistência equivalente de cada canal é conhecida, a resistência de todo conjunto de eletrodo e placa pode ser calculada, conforme mostra a Figura 3.26 em um exemplo de dois canais.

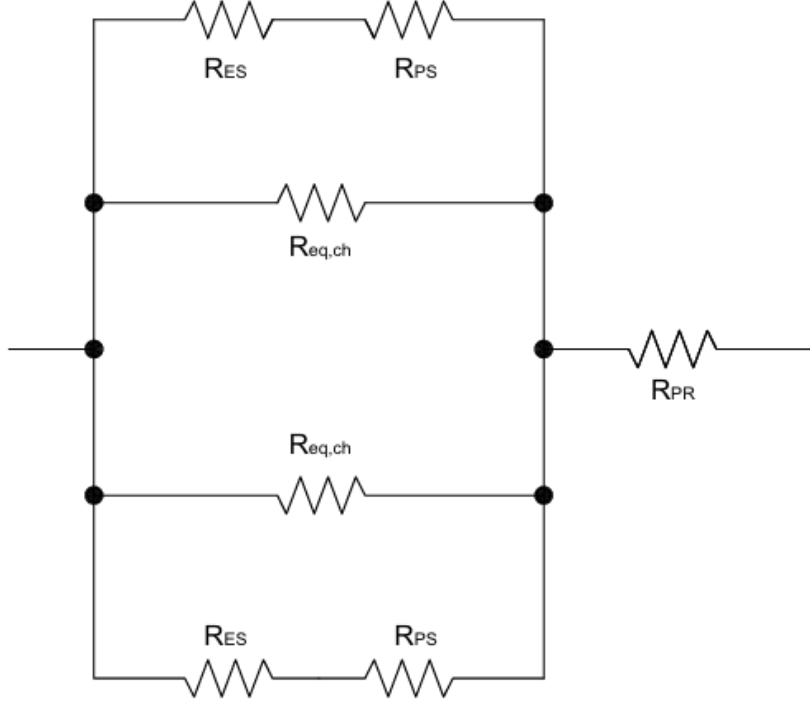


Figura 3.26: Circuito simplificado para o cálculo da resistência elétrica do conjunto do eletrodo e placa. [2].

É possível obter uma formulação generalizada para $n_{ch,an}$ canais no ânodo e $n_{ch,cat}$ canais no cátodo:

$$R_{eq,an} = \frac{R_{ES,an} + R_{PS,an}}{2} // \frac{R_{eq,ch,an}}{n_{ch,an}} + R_{PR,an}, \quad (3.114a)$$

$$R_{eq,cat} = \frac{R_{ES,cat} + R_{PS,cat}}{2} // \frac{R_{eq,ch,cat}}{n_{ch,cat}} + R_{PR,cat} \quad (3.114b)$$

Portanto, a queda de tensão através de cada célula devido aos eletrodos e placas é:

$$\eta_{ohm,e} = (R_{eq,an} + R_{eq,cat})I \quad (3.115)$$

Até agora, foi considerado um conjunto membrana-eletrodo de formato retangular, com comprimento L e largura W , já que é uma forma simples para calcular-se a resistência equivalente. Entretanto, o eletrolisador considerado em [2] possui formato circular e isso deve ser levado em consideração. A abordagem feita até aqui teve como objetivo introduzir um conjunto membrana-eletrodo retangular equivalente, em que cada canal tem um comprimento igual ao comprimento médio daqueles no arranjo circular (veja Figura 3.27).

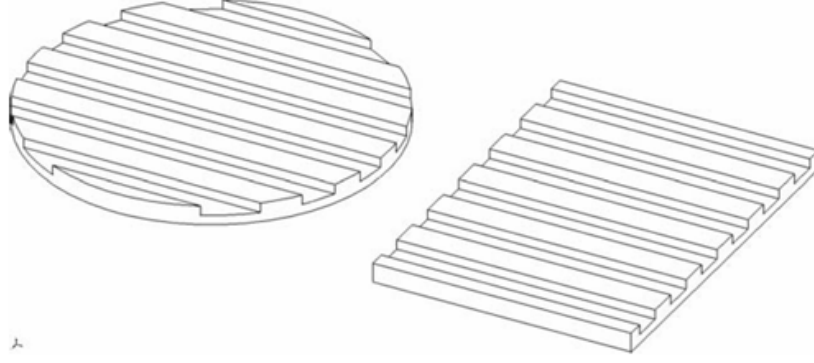


Figura 3.27: Esboço do conjunto circular com canais de tamanho variados e do conjunto retangular equivalente com canais de tamanho constante. [2].

Para calcular o comprimento de cada canal e de cada suporte do conjunto circular, o comprimento no meio deles é levado em consideração. Considerando a vista frontal dos canais mostrados na Figura 3.28, onde a distância do primeiro canal e do primeiro suporte são indicadas como $y_{c,1}$ e $y_{s,1}$, respectivamente, a distância da linha média do j -ésimo canal do centro pode ser calculada como:

$$y_j = \left(j - \frac{1}{2}\right) (w_c + w_s), \quad \text{sendo } j = -\frac{n_{ch}}{2}, \dots, -2, -1, 1, 2, \dots, \frac{n_{ch}}{2}, \quad (3.116)$$

enquanto a distância do j -ésimo suporte ao centro é:

$$y_j = j(w_c + w_s), \quad \text{sendo } j = -\frac{n_{ch}}{2}, \dots, -2, -1, 1, 2, \dots, \frac{n_{ch}}{2} \quad (3.117)$$

Dado o raio da circunferência r , o tamanho de qualquer corda, distante y_j do centro, é:

$$L(y = y_j) = 2\sqrt{r^2 - y_j^2} \quad (3.118)$$

Portanto, é possível calcular o comprimento médio dos canais:

$$L_{avg,ch} = \frac{1}{n_{ch}} \sum_{\forall j \neq 0} L_j = \frac{2}{n_{ch}} \sum_{\forall j \neq 0} \sqrt{r^2 - \left(j - \frac{1}{2}\right)^2 (w_c + w_s)^2}, \quad (3.119)$$

e dos suportes:

$$L_{avg,supp} = \frac{1}{n_{ch} + 1} \sum_{\forall j} L_j = \frac{2}{n_{ch} + 1} \sum_{\forall j} \sqrt{r^2 - j^2 (w_c + w_s)^2} \quad (3.120)$$

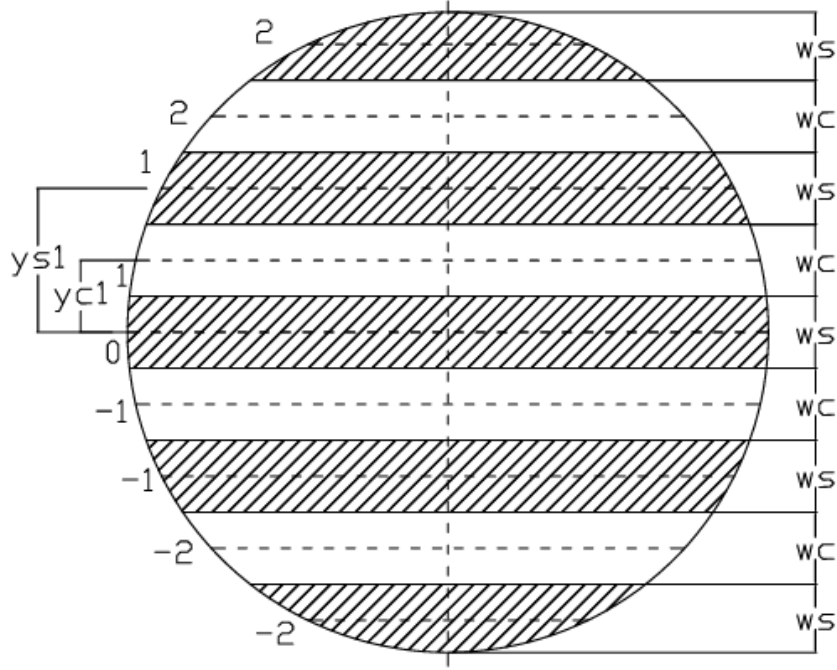


Figura 3.28: Vista frontal dos canais do conjunto membrana-eletrodo circular. [2].

Resistência Ôhmica da Membrana

A resistência ôhmica da membrana, devido à resistência encontrada pelos íons para fluir através dela, é maior do que a dos condutores eletrônicos.

O sobrepotencial ôhmico devido à resistência elétrica da membrana pode ser calculado da seguinte maneira:

$$\eta_{ohm,m} = \delta_m \frac{I}{A\sigma_m}, \quad (3.121)$$

onde σ_m é a condutividade da membrana, determinada a partir de:

$$\sigma_m = \frac{F^2 C_{H^+} D_{H^+}}{RT_{cell}} \quad (3.122)$$

onde C_{H^+} e D_{H^+} são a concentração e difusividade dos prótons na membrana, respectivamente.

3.4.2 Código Implementado em Python

Com base no modelo eletroquímico proposto por [2], foi desenvolvido um código computacional em *Python* para simular o desempenho de um eletrolisador PEM de alta pressão operando em regime permanente. O código implementa todas as equações que descrevem a tensão da célula, os sobrepotenciais e os balanços mássicos, com o objetivo de quantificar a produção de hidrogênio a partir da potência elétrica

fornecida.

As entradas principais do modelo são:

- Potência elétrica disponível (P_{disp} , em W);
- Temperatura da água de alimentação (T , em °C), assumida como a temperatura da célula;
- Densidade de corrente aplicada (i , em A/cm²);
- Pressão no compartimento catódico (P_{cat} , em bar ou MPa).

Com esses dados, o programa executa os seguintes cálculos:

1. Determina a tensão de circuito aberto E , considerando correções termoquímicas de temperatura e pressão;
2. Calcula os sobrepotenciais de ativação utilizando a equação simplificada de *Butler-Volmer*, para ânodo e cátodo separadamente;
3. Avalia o sobrepotencial ôhmico, com base na resistência da membrana e nos condutores eletrônicos internos;
4. Calcula a tensão real da célula V como soma dos sobrepotenciais;
5. Estima a corrente total da célula e sua potência consumida;
6. Determina a vazão mássica de hidrogênio produzido, com base na Lei de Faraday;
7. Calcula o calor gerado na célula e o consumo diário de água;
8. Dimensiona o número de eletrolisadores necessários para consumir a potência elétrica total disponível.

As saídas do código incluem:

- Tensão de operação da célula (V);
- Produção diária de hidrogênio (kg/dia);
- Produção diária de oxigênio (kg/dia);
- Consumo de água (m³/dia);
- Calor gerado pela célula (kW);
- Potência consumida por um eletrolisador individual (W);

- Número de eletrolisadores requeridos para a potência fornecida.

O código foi estruturado em funções modulares, com implementação vetorizada por meio da biblioteca `NumPy`, e visualização gráfica opcional com `Matplotlib`. Isso permite a realização de análises paramétricas, comparações entre diferentes condições de operação e geração de gráficos de curva de polarização e eficiência. O modelo é compatível com simulações integradas de tri-cogeração, oferecendo flexibilidade para análises acopladas ao sistema nuclear proposto neste trabalho.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

Neste capítulo, são apresentados e discutidos os principais resultados obtidos a partir da modelagem e simulação do sistema de tri-cogeração baseado no micro reator nuclear DESSAL, com potência térmica de 75 MW_t . Foram avaliadas diferentes configurações de extração de vapor no circuito secundário para alimentar plantas de dessalinização térmica, considerando também o aproveitamento da potência elétrica remanescente para fornecimento à rede, operação de sistemas de osmose reversa e produção de hidrogênio por eletrólise.

4.1 Ciclo de Potência e Pontos de Extração de Vapor

A simulação do circuito secundário do reator DESSAL utilizando o código DE-TOP/IAEA foi feita utilizando parâmetros específicos do reator, retirados de [3], e indicou uma potência elétrica máxima de $25,407 \text{ MW}_e$. A partir dessa simulação, também é possível determinar os possíveis pontos de extração de vapor que serão analisados nas técnicas térmicas de dessalinização (MED, MSF e MD). As figuras 4.1 e 4.2 mostram o ciclo de Rankine composto com regeneração e os possíveis pontos de extração de vapor por meio de sangrias na tubulação, respectivamente.

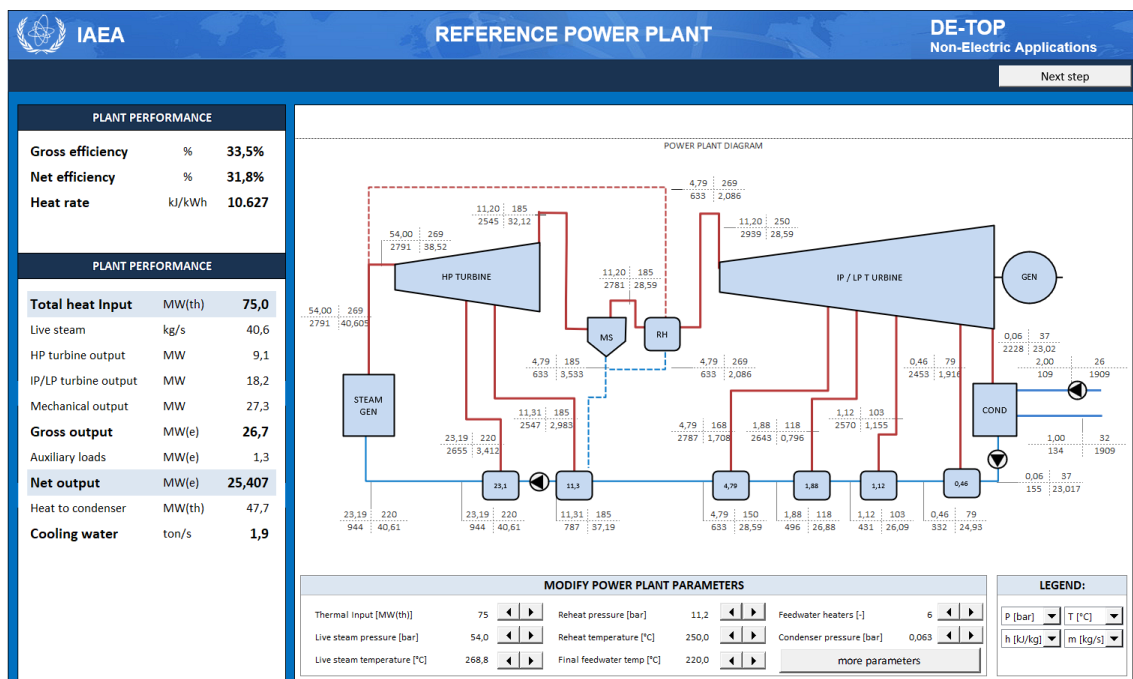


Figura 4.1: Esquema do ciclo de Rankine com regeneração utilizado no reator DES-SAL.

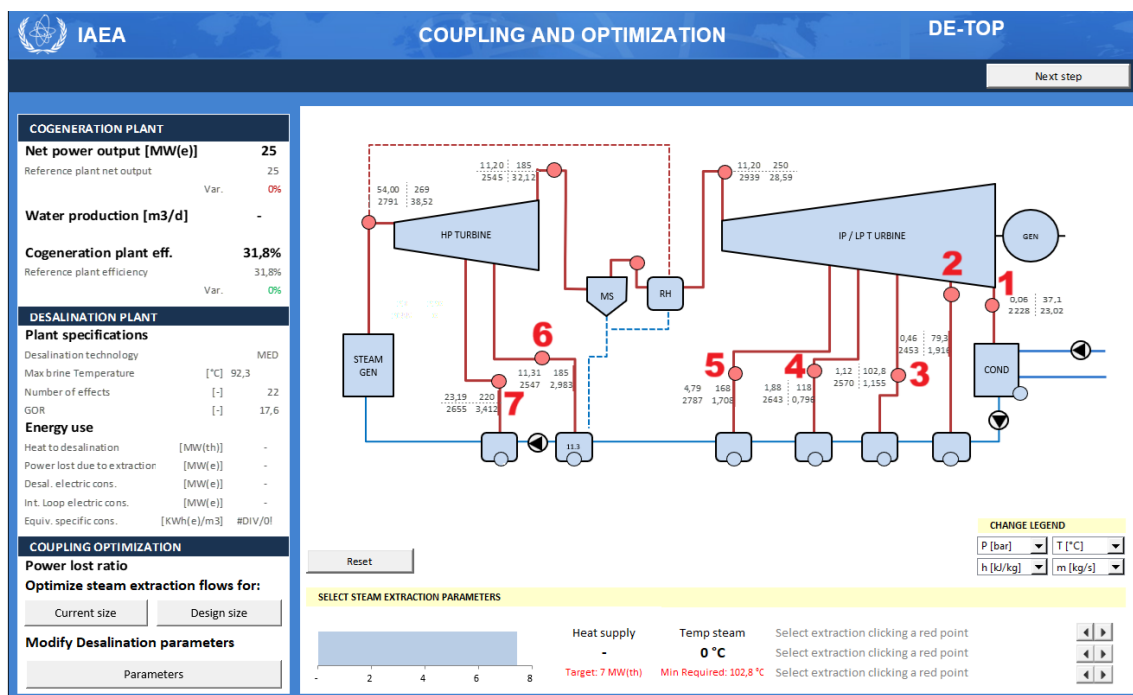


Figura 4.2: Localização dos pontos de extração de vapor (sangrias) no ciclo de potência.

Os pontos de extração de vapor analisados para alimentação das técnicas de dessalinização térmica correspondem às sangrias realizadas nas turbinas de alta e baixa pressão. O ponto 1, por sua vez, representa a rejeição de calor no condensador,

onde o vapor é condensado e o ciclo termodinâmico é reiniciado. Os demais pontos são numerados de forma crescente, de modo que o ponto 7 representa a primeira sangria na turbina de alta pressão. Os parâmetros termodinâmicos desses pontos estão apresentados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Parâmetros termodinâmicos nos pontos de extração de vapor: vazão mássica, temperatura, pressão e entalpia específica.

Ponto	\dot{m} [kg/s]	T [°C]	P [bar]	h [kJ/kg]
1	23,020	37,1	0,06	2228
2	1,916	79,3	0,46	2453
3	1,155	102,8	1,12	2570
4	0,796	118,0	1,88	2643
5	1,708	168,0	4,79	2787
6	2,983	185,0	11,31	2547
7	3,412	220,0	23,19	2655

Esses dados foram obtidos a partir dos parâmetros inseridos no simulador DE-TOP/IAEA, conforme ilustrado nas Figuras 4.3 a 4.5.

Power Plant Description

Select new case or a predefined case from the list below. Predefined cases can be customized by the user.

Select case:

Main Parameters | Advanced Parameters

Steam Generator

Thermal Input [MW(th)]

Live steam pressure [bar] ☒ Saturated ☐ Superheated

Live steam temperature [°C] T sat = 268,8 °C

Reheat

Reheat Type:

Pressure (HP Turbine exhaust) [bar]

Temperature [°C]

Feedwater line

Final Feedwater temperature [°C] P sat = 23,2 bar

Number feedwater preheaters (including deaerator)


Deaerator position in the feedwater line

Main cooling condenser

Condensing steam pressure [bar]

Figura 4.3: Tela de entrada do DE-TOP: parâmetros principais do reator DESSAL. Adaptado de [3].

Power Plant Description ×

 Select new case or a predefined case from the list below. Predefined cases can be customized by the user.

Select case:

Main Parameters **Advanced Parameters**

Component efficiencies

Steam Generator Efficiency [%]	<input type="text" value="1"/>	Generator Efficiency [%]	<input type="text" value="0,98"/>
HP turbine Efficiency [%]	<input type="text" value="0,85"/>	Pump efficiency [%]	<input type="text" value="0,85"/>
LP/IP turbine efficiency [%]	<input type="text" value="0,85"/>		
Power plant Auxiliary loads [%]	<input type="text" value="0,05"/>		

Feedwater Preheating Line (Pressures of steam extractions to preheaters)

Preheater 1 [bar]	<input type="text" value="0,46"/>	Preheater 5 [bar]	<input type="text" value="11,31"/>
Preheater 2 [bar]	<input type="text" value="1,12"/>	Preheater 6 [bar]	<input type="text" value="23,19"/>
Preheater 3 [bar]	<input type="text" value="1,88"/>	Preheater 7 [bar]	<input type="text" value="0"/>
Preheater 4 [bar]	<input type="text" value="4,79"/>	Preheater 8 [bar]	<input type="text" value="0"/>

[View complete model](#)

Figura 4.4: Tela de entrada do DE-TOP: parâmetros avançados do reator DESSAL. Adaptado de [3].

Power Plant Condenser calculations

Cooling System

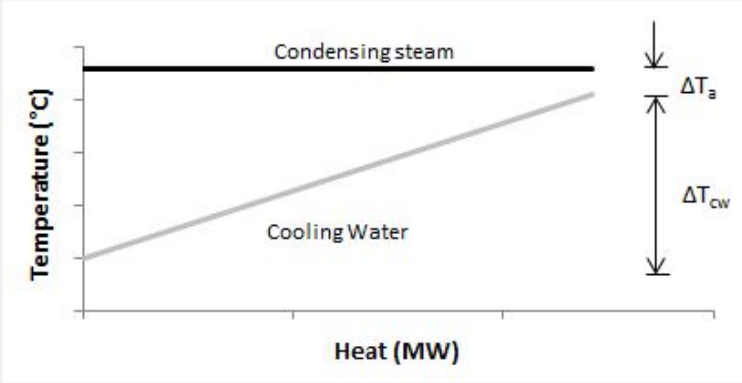
Type of cooling system: once through cooling

Cooling water temperature [°C]: 26

Cooling water temperature rise in condenser (ΔT_{cw}) [°C]: 6

Condenser approach temperature (ΔT_a) [°C]: 5

Condensing steam pressure [bar]: 0,063



Cancel Apply

Figura 4.5: Tela de entrada do DE-TOP: parâmetros do condensador. Adaptado de [3].

A partir da simulação do ciclo de potência do reator DESSAL, é possível explorar as estratégias de produção de água dessalinizada, tanto pelas técnicas térmicas, quanto pela osmose reversa, que serão abordadas nas próximas seções.

4.2 Destilação por Múltiplos Efeitos

Para a destilação por múltiplos efeitos, a temperatura mínima da salmoura no primeiro efeito (Top Brine Temperature - TBT) é de 60 °C e máxima de 75 °C para evitar incrustações. A partir disso, e lembrando que há uma queda de 10,5 °C da temperatura de extração devido ao circuito de isolamento, podemos analisar os pontos de extração de vapor de 2 a 7, definindo a TBT como 68,8 °C para o ponto 2 e 75 °C para os pontos de 3 a 7.

A partir das simulações realizadas no DE-TOP, foram gerados os resultados da

Tabela 4.2, que mostram a potência requerida, a quantidade de água produzida por dia e o consumo elétrico específico (SEC).

Tabela 4.2: Avaliação dos pontos de extração de vapor para produção de água por MED a partir do reator DESSAL.

Ponto	Potência Requerida (MW _e)	Água Produzida (m ³ /dia)	SEC (kWh/m ³)
2	0,459	1.446,69	7,62
3	0,412	1.106,83	8,94
4	0,330	765,58	10,35
5	0,888	1.647,92	12,93
6	1,492	2.351,76	15,22
7	1,889	2.615,59	17,33

A Tabela 4.2 mostra que o ponto 2 tem o menor SEC, e este vai aumentando conforme cresce a numeração dos pontos. É possível obter maior produção de água dessalinizada por MED combinando pontos de extração de vapor diferentes, conforme mostra o gráfico da Figura 4.6.

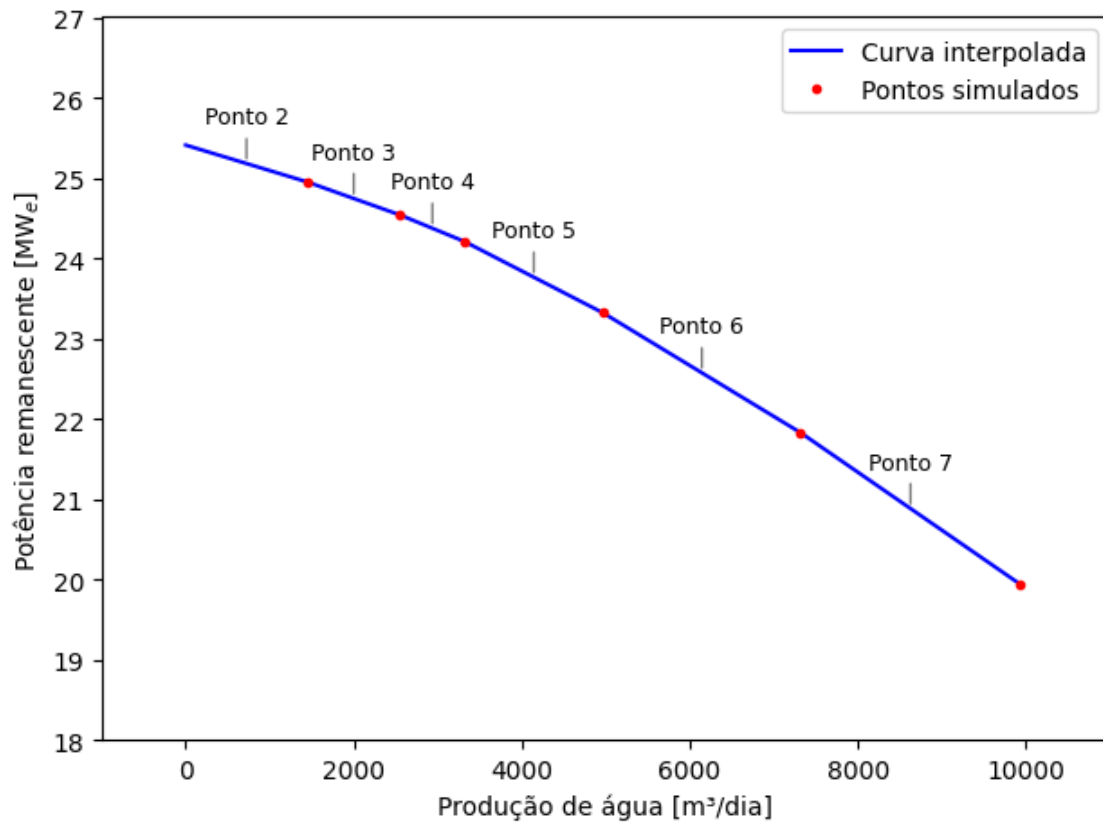


Figura 4.6: Curva de produção de água por MED e potência remanescente do reator DESSAL.

O gráfico da Figura 4.6 foi feito priorizando os pontos com menor SEC, ou seja, começando do ponto 2 e seguindo até o ponto 7. Nele podemos ver que, quanto maior a inclinação da curva interpolada, maior é a potência requerida para dessalinizar a água do mar. A produção máxima de água por MED, combinando os pontos de extração de vapor de 2 a 7, é de 9.934,37 m³/dia, com potência remanescente do reator de 19,937 MW_e, resultando em SEC de 13,21 kWh/m³.

4.3 *Flash Multiestágios*

Para *flash multiestágios*, a TBT varia de 110 °C a 115 °C, portanto, serão considerados os pontos de extração de vapor que a temperatura seja acima de 120,5 °C (pontos 5, 6 e 7, com TBT de 115 °C).

Os resultados das simulações pelo DE-TOP estão expressos na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Avaliação dos pontos de extração de vapor para produção de água por MSF a partir do reator DESSAL.

Ponto	Potência Requerida (MW _e)	Água Produzida (m ³ /dia)	SEC (kWh/m ³)
5	0,939	1352,87	16,66
6	1,565	1930,69	19,45
7	1,970	2147,29	22,02

Da mesma maneira descrita para MED, é possível combinar os pontos de 5 a 7 e obter maior quantidade de água dessalinizada por MSF, conforme o gráfico da Figura 4.7.

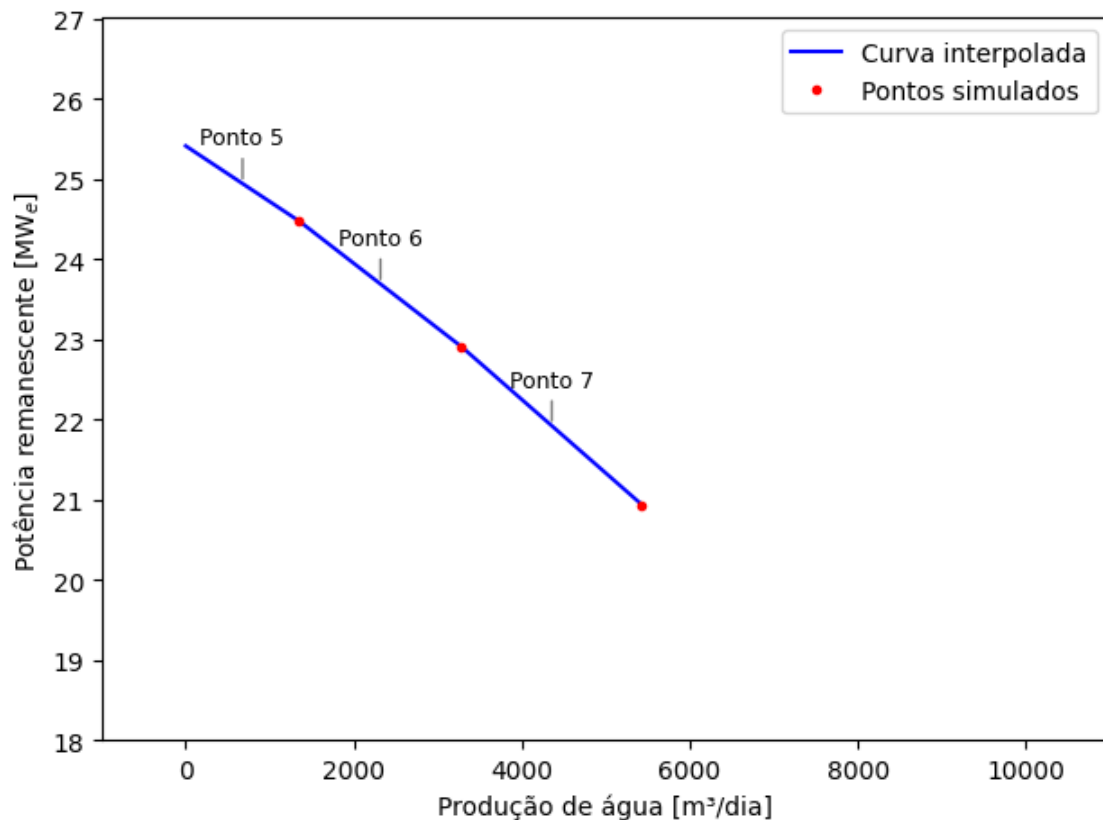


Figura 4.7: Curva de produção de água por MSF e potência remanescente do reator DESSAL.

O gráfico da Figura 4.7 também foi feito priorizando os pontos com menor SEC, ou seja, ponto 5, depois 6 e, por último, 7. A produção máxima de água por MSF, utilizando os pontos 5, 6 e 7, é de 5.430,85 m³/dia, com potência remanescente do reator de 20,933 MW_e, resultando em SEC de 19,77 kWh/m³.

Unindo os gráficos das figuras 4.6 e 4.7, é possível comparar as duas técnicas, conforme mostrado no gráfico da Figura 4.8.

A partir dele, é possível perceber claramente a diferença entre os SEC de uma técnica e de outra, verificando que MSF é muito mais custosa em termos de demanda energética.

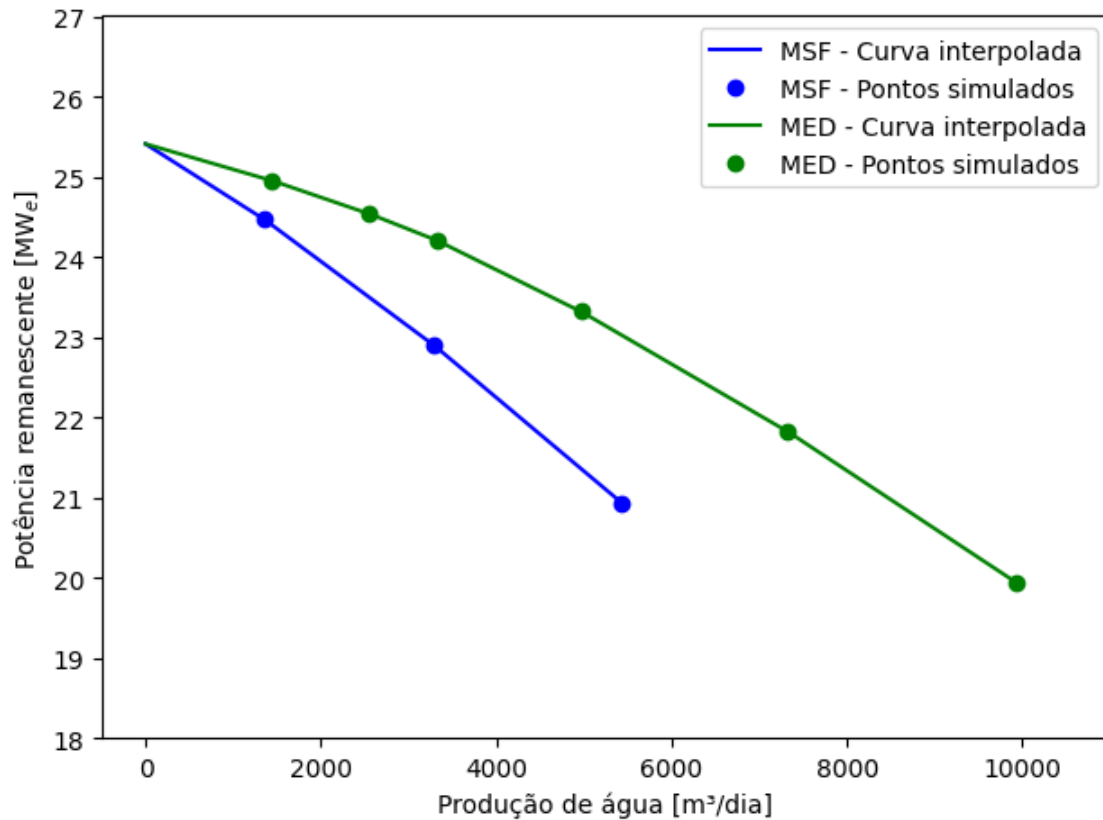


Figura 4.8: Curvas de produção de água por MED e MSF e potência remanescente do reator DESSAL.

4.4 Osmose Reversa

A osmose reversa é uma técnica que não utiliza energia térmica e, por isso, não são necessárias mudanças no ciclo de potência do reator DESSAL. Isso traz vantagens em relação às técnicas térmicas na questão do relatório de análise de segurança da planta nuclear, principalmente para usinas nucleares convencionais que queiram instalar uma planta de RO para cogerar energia elétrica e água dessalinizada, como o caso-estudo [49] da usina nuclear de Diablo Canyon, na Califórnia - EUA.

Assim como em [49], foi analisada a relação da temperatura da água do mar de alimentação da usina de RO com a produção e qualidade de água dessalinizada e com o SEC. A Tabela 4.4 mostra que, quanto maior a temperatura, maior a concentração de sais e menor o SEC. Como previsto anteriormente, já que o aumento da temperatura causa a elevação da permeação na membrana, resultando em vazão de água dessalinizada, e redução da seletividade da membrana, diminuindo a capacidade de rejeitar sais dissolvidos, resultando em menor qualidade da água produzida (maior concentração de sais).

Tabela 4.4: Análise da influência da temperatura da salmoura de alimentação no processo de RO.

Temperatura [°C]	Salinidade [ppm]	SEC (kWh/m ³)
26	250	3,13
30	279	3,03
35	316	2,93
40	352	2,86

A análise da influência da temperatura é importante porque é possível utilizar a água do circuito terciário que passa pelo condensador para alimentar a planta de RO a uma temperatura um pouco mais elevada (32 °C), a fim de otimizar a produção de água dessalinizada. São propostas duas unidades de RO: a primeira utilizando a água do circuito terciário, e a segunda utilizando água do mar, já que a vazão do circuito secundário não é suficiente para alimentar a planta de RO e consumir toda a potência elétrica que o reator DESSAL consegue fornecer. Os resultados estão expressos na Tabela 4.5.

Tabela 4.5: Avaliação de duas unidades de RO para produção de água dessalinizada a partir do reator DESSAL: a primeira captando água aquecida que passou pelo condensador da planta nuclear e a segunda captando água diretamente do mar.

Unidade	Potência Requerida (MW _e)	Água Produzida (m ³ /dia)	SEC (kWh/m ³)	Salinidade [ppm]
1	8,552	68.730	2,98	294
2	16,855	129.320	3,13	250

A Figura 4.9 mostra o gráfico da curva de produção de água e potência remanescente do reator combinando-se as duas unidades de RO, priorizando a unidade 1, com menor SEC. A produção máxima de água por RO é de 198.050 m³/dia, utilizando toda a potência elétrica do reator, resultando em SEC de 3,08 kWh/m³.

A Figura 4.10 mostra o diagrama esquemático das duas unidades de RO acopladas à planta do DESSAL, com a unidade 1 aproveitando a água aquecida após passar pelo condensador para produzir maior quantidade de água dessalinizada e a unidade 2 utilizando o restante da potência elétrica remanescente para complementar a produção.

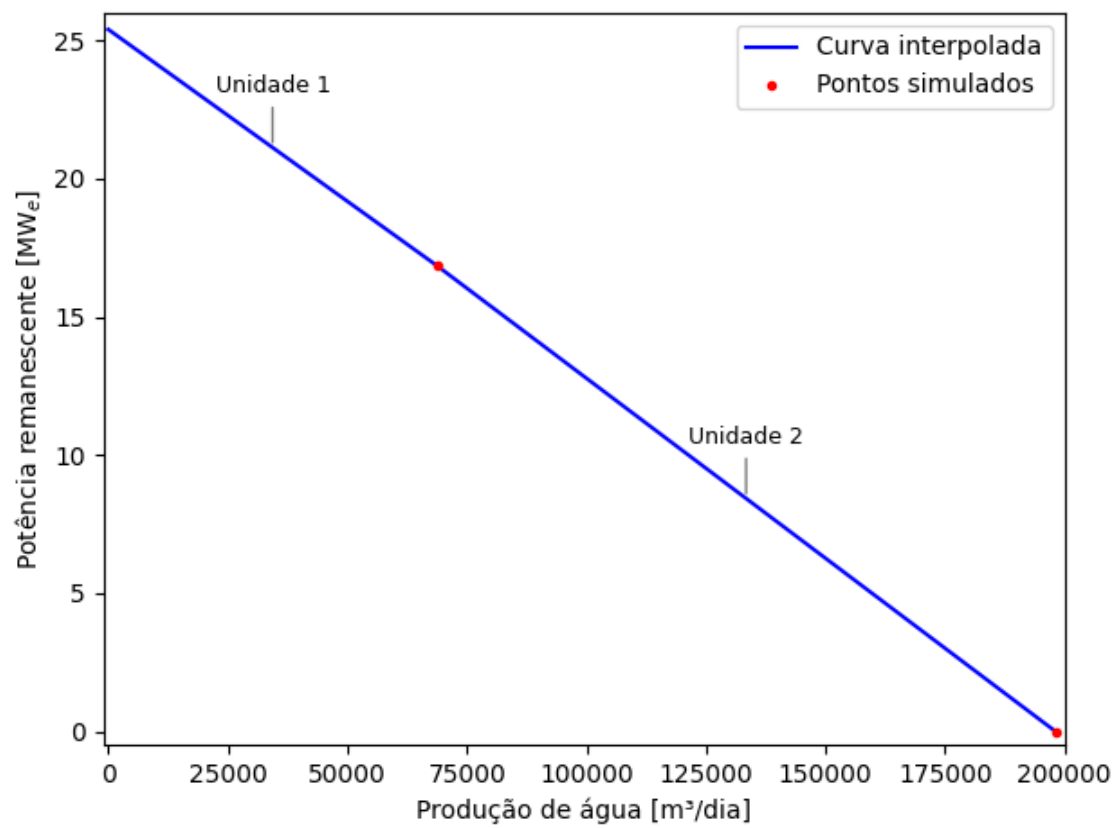


Figura 4.9: Curva de produção de água por RO e potência remanescente do reator DESSAL.

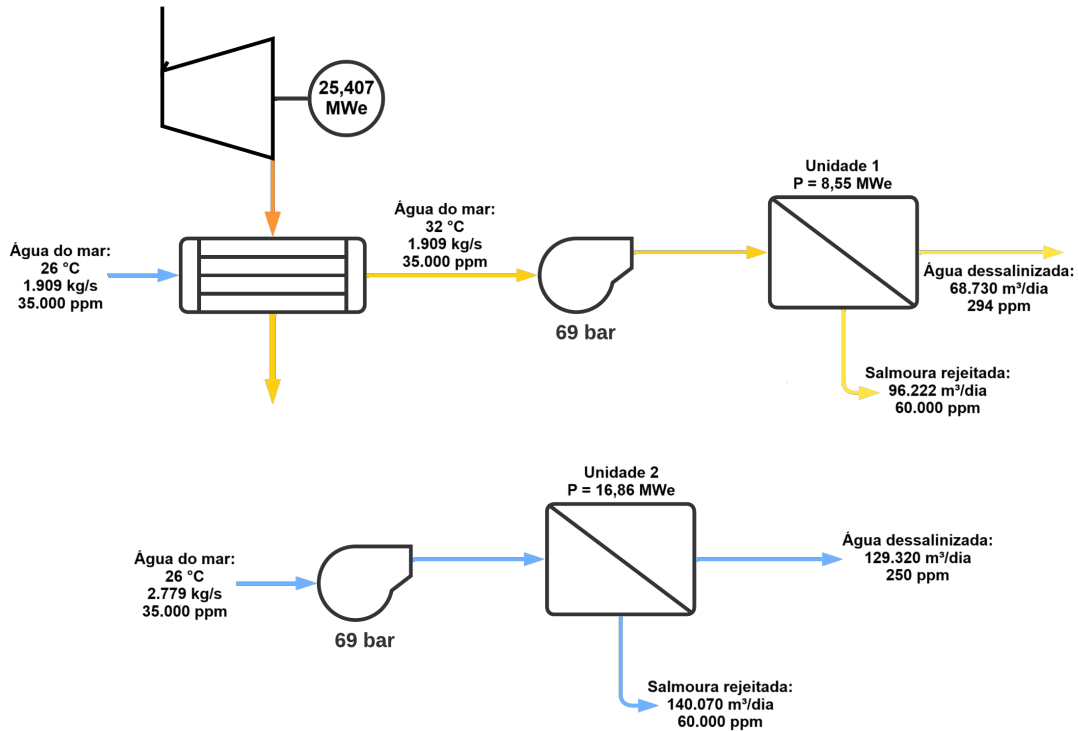


Figura 4.10: Diagrama esquemático das duas unidades de RO acopladas ao reator DESSAL.

4.5 Destilação por Membranas por Contato Direto

Para a técnica de DCMD, foram selecionados apenas os pontos de extração 2 e 3 do ciclo termodinâmico. Essa escolha se deve à característica distintiva da DCMD de operar eficientemente com fontes de calor de baixa qualidade, o que a torna especialmente adequada para aproveitar o calor residual disponível nas primeiras sangrias da turbina. Diversos valores de vazão no lado do casco, correspondentes à salmoura quente, foram analisados com o objetivo de identificar o melhor desempenho do sistema. As simulações permitiram comparar diferentes configurações quanto à vazão de água produzida e ao consumo específico de energia térmica (SEC), contribuindo para a escolha dos parâmetros operacionais mais vantajosos em termos de eficiência energética e produção de água dessalinizada.

Tabela 4.6: Parâmetros para as simulações de DCMD, adaptado de [1]

Parâmetro	Símbolo	Valor	Unidade
Raio interno da membrana	r_l	0,3	mm
Espessura da membrana	t	0,1	mm
Condutividade do polímero	k_p	0,2	W/mK
Diâmetro dos poros	d_p	0,2	μm
Porosidade da membrana	ε_m	0,8	–
Temperatura de entrada no lado tubo	$T_{e,l}$	26	$^{\circ}\text{C}$
Pressão total nos poros da membrana	P	101,325	kPa
Vazão no lado tubo	Q_l	50	L/min
Número de fibras ocas	N_{fbr}	10.000	–
Raio do vaso	r_v	50	mm
Comprimento efetivo do vaso	L	1	m
Fração molar de sal no lado casco	$x_{\text{sal},s}$	0,011	–
Fração molar de sal no lado tubo	$x_{\text{sal},l}$	0	–

A Tabela 4.6 mostra os parâmetros utilizados durante as simulações realizadas. Para os pontos de extração de vapor 2 e 3, as temperaturas de entrada no lado do casco do módulo DCMD são, respectivamente, $T_{e,s,\text{ponto}=2} = 68,8\text{ }^{\circ}\text{C}$, $T_{e,s,\text{ponto}=3} = 92,3\text{ }^{\circ}\text{C}$, que foram calculadas a partir da queda de temperatura de $10,5\text{ }^{\circ}\text{C}$ devido ao circuito de isolamento intermediário. O número de módulos de dessalinização foi ajustado para que fosse consumido todo o calor latente transferido do ponto de extração de vapor específico ($Q_{\text{ponto}=2} = 4,065\text{ MW}_t$ e $Q_{\text{ponto}=3} = 2,471\text{ MW}_t$) para o circuito intermediário e deste para o sistema DCMD. A potência elétrica requerida foi calculada somando-se a potência elétrica sacrificada da planta nuclear ($P_{\text{ponto}=2} = 0,371\text{ MW}_e$ e $P_{\text{ponto}=3} = 0,334\text{ MW}_e$) com a potência de bombeamento (calculada a partir de (3.53)). A vazão Q_s foi avaliada no intervalo entre 50 e 150 L/h. Os resultados são expressos nas tabelas 4.7 a 4.10.

Tabela 4.7: Avaliação do ponto de extração de vapor 2, com eficiência ideal do trocador de calor ($\phi = 1.00$), para produção de água por DCMD a partir do reator DESSAL variando a vazão da água do lado do casco.

Q_s [L/h]	Potência Requerida [MW _e]	Água Produzida [m ³ /dia]	SEC [kWh/m ³]
50	0,376	526,57	17,18
60	0,387	819,08	11,35
70	0,401	1.304,69	7,38
80	0,422	1.879,82	5,39
90	0,449	2.419,34	4,45
100	0,478	2.843,69	4,04
110	0,508	3.117,51	3,91
120	0,537	3.264,89	3,95
130	0,565	3.318,82	4,08
140	0,591	3.306,60	4,29
150	0,615	3.252,68	4,54

Tabela 4.8: Avaliação do ponto de extração de vapor 2, com eficiência do trocador de calor ($\phi = 0.98$), para produção de água por DCMD a partir do reator DESSAL variando a vazão da água do lado do casco.

Q_s [L/h]	Potência Requerida [MW _e]	Água Produzida [m ³ /dia]	SEC [kWh/m ³]
50	0,379	437,73	20,76
60	0,384	671,76	13,73
70	0,393	935,50	10,08
80	0,402	1.147,34	8,42
90	0,412	1.266,01	7,81
100	0,420	1.305,74	7,73
110	0,428	1.293,29	7,94
120	0,435	1.256,52	8,31
130	0,441	1.206,53	8,78
140	0,448	1.150,88	9,33
150	0,453	1.097,04	9,92

Tabela 4.9: Avaliação do ponto de extração de vapor 3, com eficiência ideal do trocador de calor ($\phi = 1.00$), para produção de água por DCMD a partir do reator DESSAL variando a vazão da água do lado do casco.

Q_s [L/h]	Potência Requerida [MW _e]	Água Produzida [m ³ /dia]	SEC [kWh/m ³]
50	0,337	386,54	20,91
60	0,341	800,76	10,21
70	0,350	1.631,57	5,15
80	0,366	2.704,32	3,25
90	0,383	3.524,70	2,61
100	0,396	3.811,27	2,49
110	0,473	7.021,24	1,62
120	0,613	11.847,90	1,24
130	0,796	16.784,30	1,14
140	1,127	24.861,80	1,09
150	1,486	31.696,30	1,13

Tabela 4.10: Avaliação do ponto de extração de vapor 3, com eficiência do trocador de calor ($\phi = 0.98$), para produção de água por DCMD a partir do reator DESSAL variando a vazão da água do lado do casco.

Q_s [L/h]	Potência Requerida [MW _e]	Água Produzida [m ³ /dia]	SEC [kWh/m ³]
50	0,337	343,05	23,54
60	0,339	616,80	13,20
70	0,344	965,15	8,54
80	0,348	1.180,18	7,07
90	0,351	1.233,34	6,83
100	0,353	1.188,72	7,13
110	0,358	1.234,89	6,96
120	0,362	1.204,29	7,22
130	0,365	1.133,61	7,73
140	0,368	1.059,01	8,33
150	0,370	992,06	8,95

Os resultados mostram que há uma forte dependência energética do processo de DCMD com a eficiência do sistema de recuperação de calor e com a vazão da linha de alimentação, no lado do casco do módulo.

Analisando os cenários com $\phi = 0,98$, para o ponto 2, apesar da pequena diferença nas simulações, MED consegue produzir maior quantidade de destilado, com um consumo específico menor. Porém, para o ponto 3, DCMD obteve resultados superiores com menor SEC em relação à MED e MSF (resultado de $Q_s = 90$ L/h da Tabela 4.10).

Conforme realizado para MED e MSF, é possível combinar os pontos de 3 e 2 e obter maior quantidade de água dessalinizada por DCMD, que é exposta no gráfico da Figura 4.11.

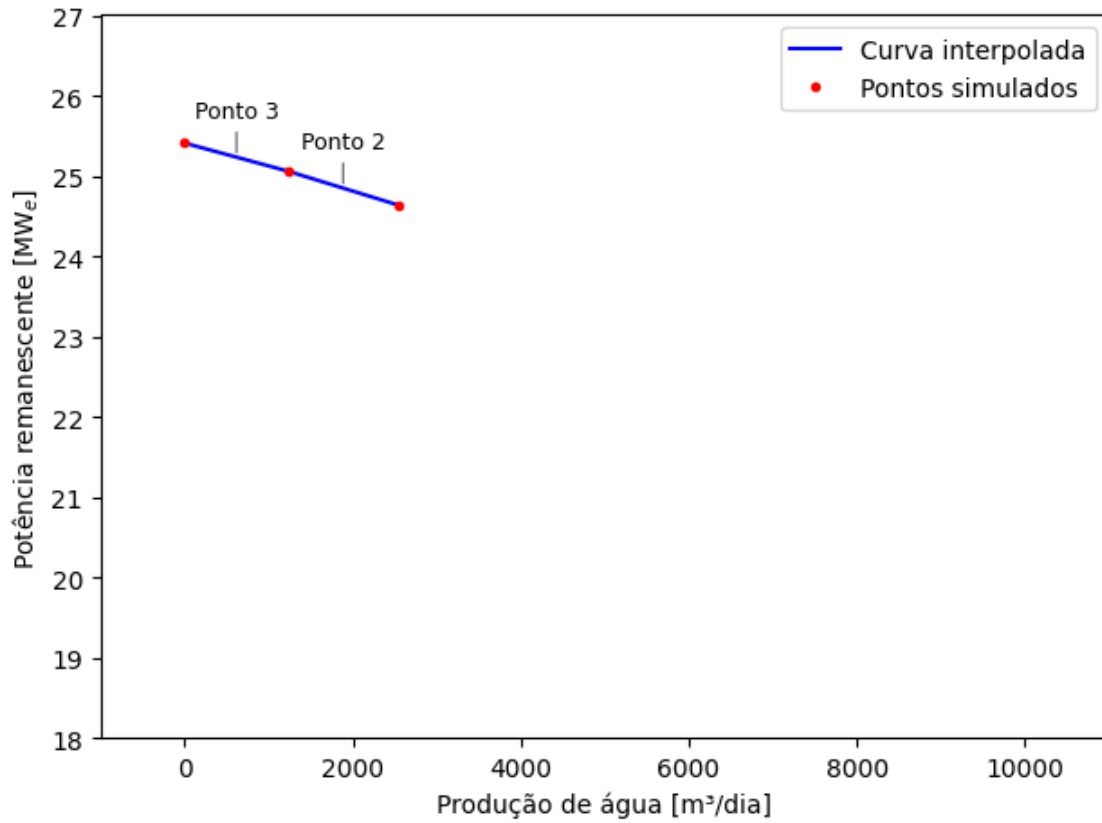


Figura 4.11: Curva de produção de água por DCMD e potência remanescente do reator DESSAL.

O gráfico da Figura 4.11 também foi feito priorizando os pontos com menor SEC, ou seja, ponto 3, depois 2. A produção máxima de água por DCMD, utilizando os pontos 3 e 2, é de 2.539,08 m³/dia, com potência remanescente do reator de 24,636 MW_e, resultando em SEC de 7,29 kWh/m³.

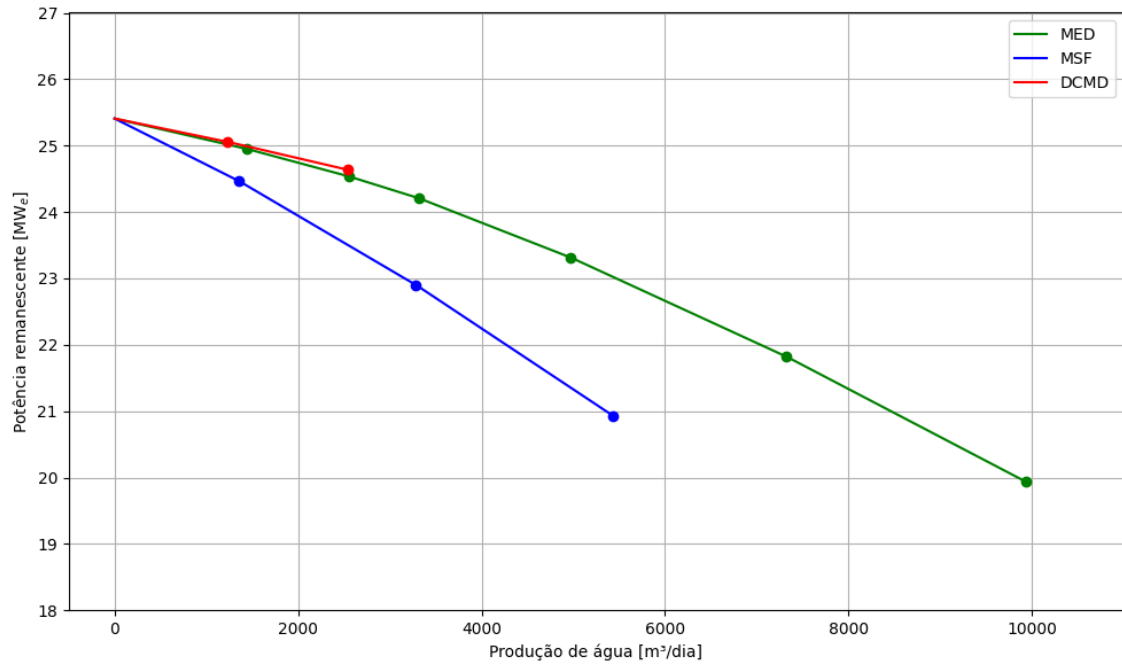


Figura 4.12: Curva de produção de água pelas técnicas térmicas e potência remanescente do reator DESSAL.

O gráfico da Figura 4.12 sintetiza os resultados obtidos para as técnicas térmicas de dessalinização, apresentando as curvas de produção de água destilada em função da potência elétrica remanescente do reator DESSAL. Observa-se que o processo DCMD apresenta o menor consumo elétrico específico médio quando operando nos pontos 2 e 3 de extração de vapor, que correspondem a condições de baixa entalpia. No entanto, sua produção total de água potável é limitada, justamente por se restringir a esses dois pontos de baixa energia térmica. A tecnologia MED também apresenta baixo SEC nos primeiros pontos de extração, mas esse valor tende a aumentar nos pontos seguintes, à medida que se utiliza vapor com menor aproveitamento energético. Apesar disso, a MED alcança a maior produção total de água destilada entre as técnicas térmicas avaliadas, devido à sua capacidade de operar eficientemente com a maior parte dos pontos de extração de vapor. Por sua vez, a técnica MSF resulta em uma produção intermediária de água, com valores de SEC superiores aos da MED para os mesmos pontos de operação (5 a 7).

4.6 Eletrólise da Água - Produção de Hidrogênio

A fim de validar o modelo de eletrólise implementado em Python, foram utilizados pontos experimentais extraídos do artigo [2], que descrevem o comportamento de um eletrolisador PEM operando sob diferentes condições de temperatura e pressão. A Figura 4.13 apresenta a comparação entre os dados experimentais e os

resultados do modelo, enquanto a Figura 4.14 mostra os resíduos ($V_{\text{exp}} - V_{\text{modelo}}$) para os dois conjuntos de dados avaliados.

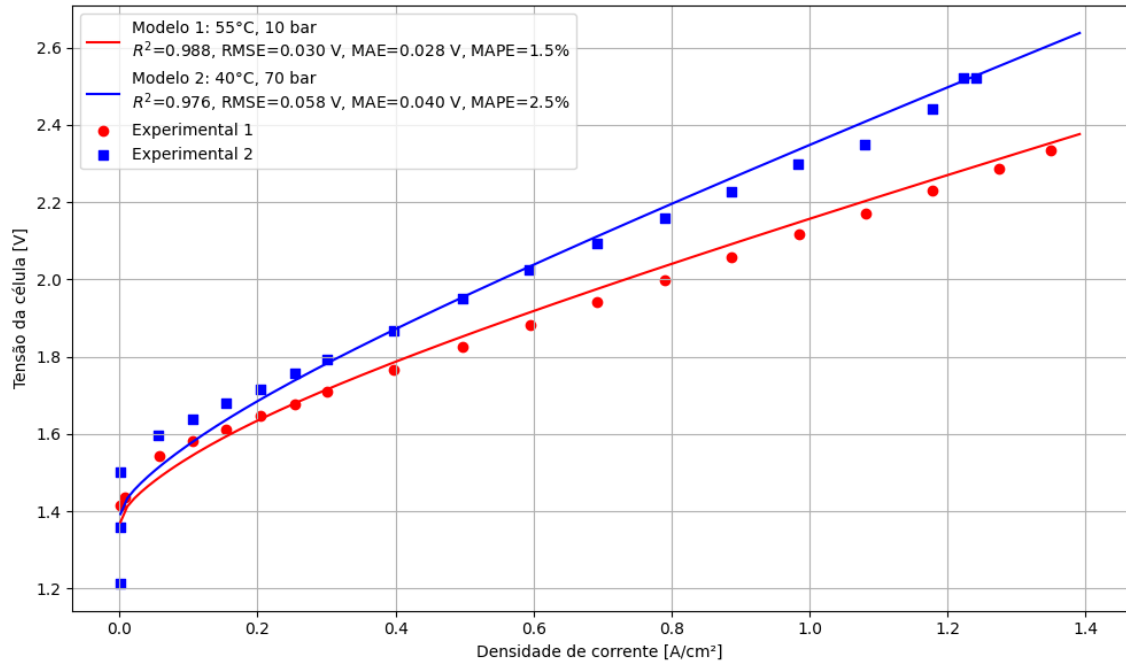


Figura 4.13: Curvas de polarização: comparação entre dados experimentais e resultados do modelo para dois cenários.

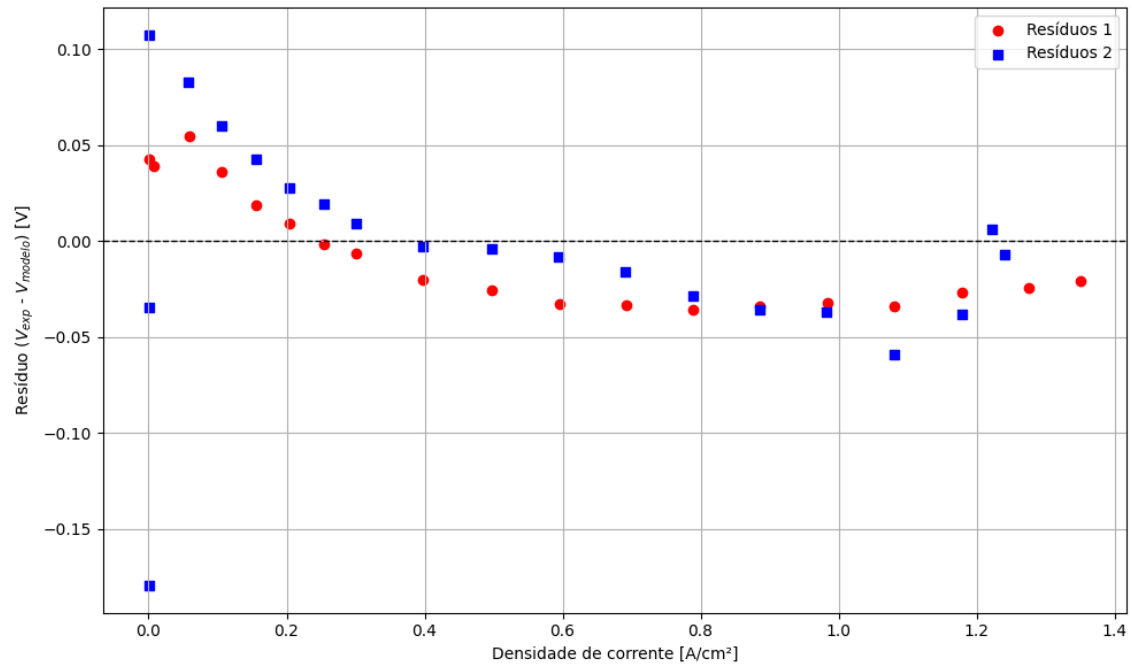


Figura 4.14: Resíduos da tensão prevista pelo modelo em relação aos dados experimentais.

A acurácia do modelo foi quantificada por meio de quatro métricas estatísticas:

- **Coefficiente de determinação (R^2):** mede a proporção da variância explicada pelo modelo. Valores próximos de 1 indicam excelente ajuste.
- **Erro médio absoluto (MAE):** representa a média das diferenças absolutas entre os valores simulados e os experimentais.
- **Raiz do erro quadrático médio (RMSE):** penaliza mais fortemente grandes desvios, refletindo a dispersão dos resíduos.
- **Erro percentual absoluto médio (MAPE):** expressa o erro médio em termos relativos, útil para comparar desempenhos em diferentes escalas.

Para o cenário 1 (55 °C, 10 bar), o modelo apresentou $R^2 = 0,988$, RMSE de 30 mV, MAE de 28 mV e MAPE de apenas 1,5%. Para o cenário 2 (40 °C, 70 bar), os resultados foram $R^2 = 0,976$, RMSE de 58 mV, MAE de 40 mV e MAPE de 2,5%. Esses valores indicam que o modelo é robusto e capaz de prever com elevada precisão o comportamento do eletrolisador em diferentes condições operacionais, porém há maior discrepância para valores de baixa densidade de corrente. Portanto, utilizaremos apenas a faixa operacional entre 0,1 e 1,4 A/cm² de densidade de corrente elétrica.

Para a avaliação da produção de hidrogênio, serão utilizadas como água de alimentação aquelas produzidas a partir de técnicas térmicas com o menor SEC, a fim de explorar a maior quantidade de hidrogênio produzido, por MED no ponto 2 e por DCMD no ponto 3.

As Figuras 4.15 e 4.16 mostram gráficos da produção de hidrogênio variando com a pressão do cátodo e com a densidade de corrente, às temperaturas de 53 °C (ponto 2, por MED) e 28 °C (ponto 3, por DCMD). É possível perceber que, para os dois gráficos, o ponto de máximo ocorre quando $P_{cat} = 1$ MPa e $j = 0,1$ A/cm²; portanto, esses serão os parâmetros utilizados nas simulações.

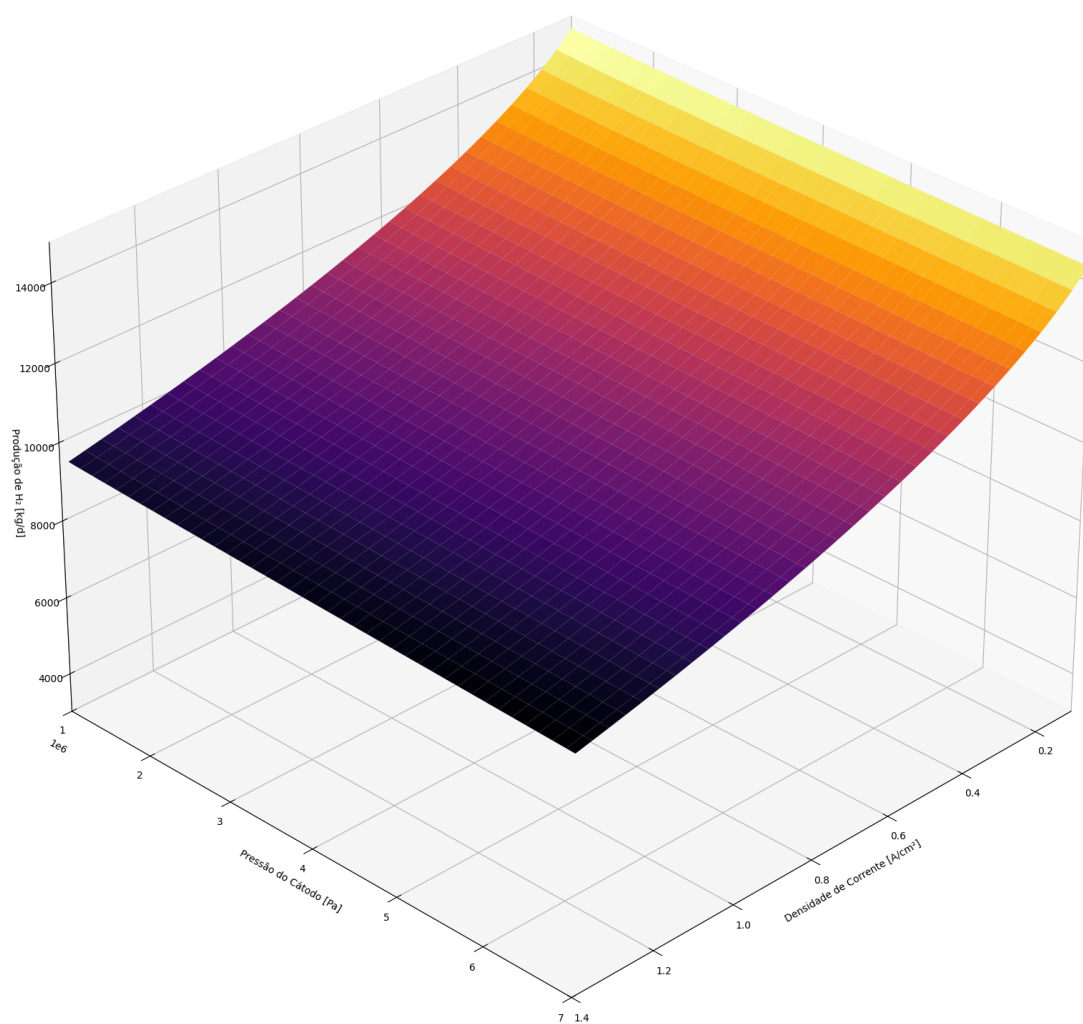


Figura 4.15: Gráfico da produção de hidrogênio com alimentação de água pelo destilado via MED a partir do ponto de extração 2 em função da densidade de corrente e da pressão no cátodo.

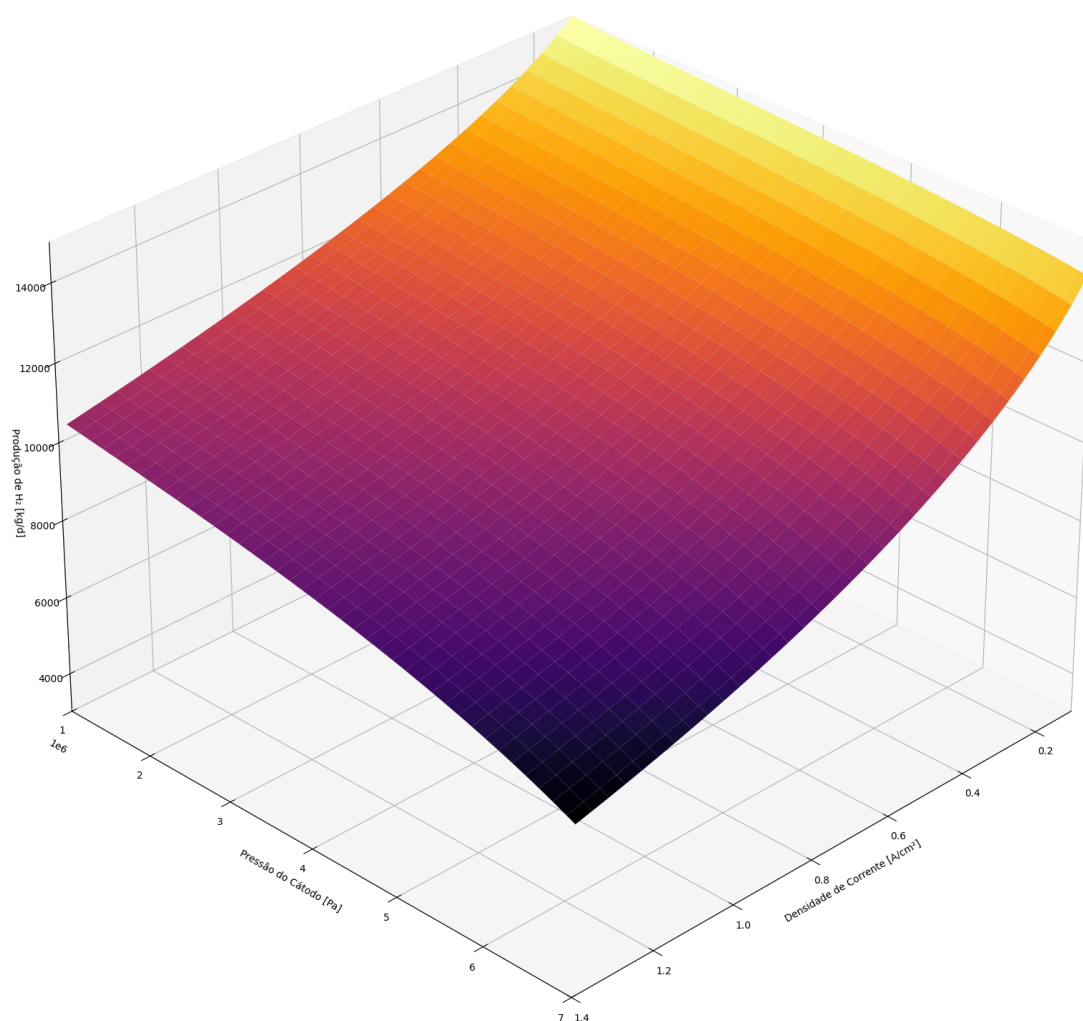


Figura 4.16: Gráfico da produção de hidrogênio com alimentação de água pelo destilado via DCMD a partir do ponto de extração 3 em função da densidade de corrente e da pressão no cátodo.

Os resultados das simulações para produção de hidrogênio estão sumarizados na Tabela 4.11.

Tabela 4.11: Resultados das simulações de produção de hidrogênio a partir da água de alimentação destilada por MED e DCMD.

Água de alimentação	V_{cell} [V]	P [MW _e]	H_2 [kg/dia]	SEC [kWh/kg]	Q_{gen} [MW _t]
Ponto 2 (MED)	1,539	24,948	14.657	40,85	0,920
Ponto 3 (DCMD)	1,506	25,056	15.044	39,97	0,416

A Tabela 4.11 mostra que é possível obter 14.657 kg de gás hidrogênio por dia,

se alimentar o sistema de eletrólise com a água destilada do ponto 2 por MED, ou 15.044 kg/dia, se alimentar com a água destilada do ponto 3 por DCMD. Para estes cenários, a produção líquida de água destilada, descontando a quantidade que seria fornecida à planta de eletrólise, é de 1.314,50 m³/dia (ponto 2, por MED) e 1.098,93 m³/dia (ponto 3, por DCMD), e o número de eletrolisadores do tipo PEM necessários é 84.407 (ponto 2) e 86.630 (ponto 3).

Um resultado interessante é o calor gerado pelas células PEM (vide última coluna da Tabela 4.11), devido aos sobrepotenciais envolvidos na reação eletroquímica comentados anteriormente, que podem ser utilizados para produzir mais água desalinizada utilizando técnicas térmicas, por exemplo.

Capítulo 5

Conclusões e Recomendações

Este trabalho apresentou uma análise abrangente da viabilidade técnica de um sistema de tri-cogeração baseado no micro reator nuclear DESSAL, integrando a produção simultânea de energia elétrica, água dessalinizada e hidrogênio. A partir da modelagem do ciclo termodinâmico com o código DE-TOP/IAEA e do subsequente acoplamento com tecnologias de dessalinização e eletrólise, foi possível avaliar o potencial de aproveitamento dos fluxos energéticos do reator em um cenário de cogeração.

A produção elétrica estimada de 25,407 MW_e, considerando um fator de capacidade de 90%, revela a capacidade do sistema de suprir aproximadamente 123 mil habitantes da região Nordeste, com base no consumo médio per capita de 1.628 kWh/hab.ano. Este valor destaca a relevância do reator enquanto fonte energética de baixo carbono para regiões com déficit estrutural de fornecimento elétrico.

No tocante à dessalinização, a osmose reversa (RO) apresentou o melhor desempenho em termos de produtividade e consumo específico de energia (SEC), sendo capaz de abastecer uma população de cerca de 1,62 milhão de pessoas, considerando o consumo médio de 110 L/hab.dia e o mesmo fator de capacidade. Entre as tecnologias térmicas, a técnica MSF demonstrou o maior custo energético, enquanto a MED apresentou maior rendimento, especialmente quando operando com vapor extraído de pontos mais próximos ao condensador, onde a qualidade exergética do fluido é inferior. A técnica DCMD, por sua vez, mostrou-se competitiva com a MED, apresentando SEC ainda menor quando se combinam os pontos 2 e 3 de extração de vapor.

Na produção de hidrogênio, o modelo computacional desenvolvido foi validado com dados experimentais da literatura e apresentou bons indicadores de desempenho. Utilizando os pontos de extração de menor SEC - ponto 2 com MED e ponto 3 com DCMD - foram obtidas produções de 14.657 kg/dia e 15.044 kg/dia de hidrogênio, respectivamente. Os resultados mostraram que menores densidades de corrente e menores pressões no cátodo favorecem uma maior produção de H₂. Além disso, a

vazão de água destilada é suficiente para suprir a demanda da planta de eletrólise e gera excedente de 1.314,50 m³/dia no ponto 2 e 1.098,93 m³/dia no ponto 3. O calor gerado pelos eletrolisadores (0,92 MW_t no ponto 2 e 0,416 MW_t no ponto 3) ainda representa uma oportunidade adicional de integração energética com as unidades de dessalinização térmica.

Dessa forma, conclui-se que a integração entre um pequeno reator nuclear e sistemas acoplados de dessalinização e eletrólise é não apenas viável, mas representa uma estratégia promissora para mitigar simultaneamente os desafios hídricos, energéticos e de transição para uma economia de hidrogênio, especialmente em regiões semiáridas como o Nordeste brasileiro.

Recomendações para Trabalhos Futuros

Com a consolidação dos resultados obtidos neste estudo, diversas frentes de pesquisa podem ser exploradas a fim de aprofundar e expandir o entendimento sobre a viabilidade e a otimização de sistemas de tri-cogeração nuclear baseados no reator DESSAL. Entre as possibilidades, destacam-se:

- **Análise econômica detalhada do sistema:** a realização de uma avaliação econômica completa, contemplando tanto os custos de capital quanto os custos operacionais das diferentes configurações de cogeração propostas, é essencial para verificar a viabilidade comercial do reator DESSAL no contexto energético do Brasil. Tal estudo permitiria estimar indicadores como custo nivelado de energia, custo do metro cúbico de água dessalinizada e custo do quilograma de hidrogênio produzido, com foco especial na realidade socioeconômica do semiárido nordestino.
- **Aproveitamento térmico e técnicas avançadas de destilação por membranas:** o calor gerado nos eletrolisadores PEM, atualmente não aproveitado integralmente, pode ser recuperado e reintegrado às plantas de dessalinização térmica, contribuindo para o aumento da eficiência global do sistema. Nesse sentido, recomenda-se a investigação do acoplamento com novas técnicas como a V-AGMD (Vacuum-Assisted Air Gap Membrane Distillation), que apresentem elevado potencial de desempenho térmico em sistemas híbridos.
- **Otimização multiobjetivo baseada em demanda horária:** considerando as variações temporais da demanda de eletricidade e água na região Nordeste, sugere-se a aplicação de técnicas de otimização multicritério para definir estratégias operacionais baseadas em carga (load-based dispatch). Tais estudos poderiam considerar simultaneamente critérios de maximização da produção

de hidrogênio, minimização do consumo elétrico específico e adequação à demanda local, tornando o sistema mais adaptável e resiliente.

Essas recomendações visam não apenas aprofundar os aspectos técnicos e operacionais do sistema proposto, mas também fornecer subsídios para sua inserção prática em contextos reais de aplicação, alinhando-se às demandas de segurança hídrica, energética, do setor nuclear e de transição para a economia do hidrogênio.

Referências Bibliográficas

- [1] LISBOA ET AL. “Analysis of the membrane effects on the energy efficiency of water desalination in a direct contact membrane distillation (DCMD) system with heat recovery”, *Applied Thermal Engineering*, v. 182, pp. 116063, 2021.
- [2] MARANGIO, F., SANTARELLI, M., CALÌ, M. “Theoretical model and experimental analysis of a high pressure PEM water electrolyser for hydrogen production”, *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 34, pp. 1143–1158, 2009.
- [3] DE SAMPAIO, P. A. B., ALVES, L. F. R., MOREIRA, M. L. “COGENERATION OF ELECTRICITY AND WATER USING A SMALL PWR OF 75 MW(th) COUPLED TO A DCMD DESALINATION SYSTEM WITH HEAT RECOVERY”, *Anais do 19º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, ENCIT, Bento Gonçalves*, 2022.
- [4] KYLE, B. G. *Chemical and Process Thermodynamics*. Prentice Hall, 1984.
- [5] DARRE, N. C., TOOR, G. S. “Desalination of Water: a Review”, *Current Pollution Reports*, v. 4, pp. 104–111, 2018.
- [6] UN WATER. *The United Nations World Water Development Report 2023: Partnerships and cooperation for water*. Relatório técnico, UNESCO, 2023.
- [7] AGÊNCIA NACIONAL DE ÁGUAS E SANEAMENTO BÁSICO. *Conjuntura dos Recursos Hídricos no Brasil*. Relatório técnico, Ministério do Meio Ambiente e Mudança do Clima, 2022.
- [8] SOUZA, L. F. “Dessalinização como fonte alternativa de água potável”, *Norte Científico*, v. 1, n. 1, 2006.
- [9] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Market Potential for Non-electric Applications of Nuclear Energy*. Relatório Técnico Technical Reports Series No. 410, IAEA, Vienna, 2002.

- [10] HODGSON, P. E. “Nuclear Power and the Energy Crisis”, *Modern Age*, v. 50, pp. 238–246, 2008.
- [11] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Climate Change and Nuclear Power*. Relatório técnico, IAEA, 2024.
- [12] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Energy, Electricity and Nuclear Power Estimates for the Period up to 2050*. Relatório técnico, IAEA, 2022.
- [13] AN ET AL. “Small Modular Reactors (SMRs) and Smart Energy Cities: Techno-Socioeconomic Analysis of Global Energy Plans”, *SSRN*, 2025.
- [14] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Indicators for Nuclear Power Development*. Relatório técnico, IAEA, 2018.
- [15] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Guidance on Nuclear Energy Cogeneration*. Relatório Técnico NP-T-1.17, IAEA, Vienna, 2019.
- [16] ORHAN ET AL. “Integrated hydrogen production options based on renewable and nuclear energy sources”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 16, pp. 6059–6082, 2012.
- [17] DARWISH ET AL. “Nuclear desalination: A state-of-the-art review”, *Desalination*, v. 457, pp. 39–61, 2019.
- [18] KIM, J. S., BOARDMAN, R. D., BRAGG-SITTON, S. M. “Dynamic performance analysis of a high-temperature steam electrolysis plant integrated within nuclear-renewable hybrid energy systems”, *Applied Energy*, v. 228, pp. 2090–2110, 2018.
- [19] DONG ET AL. “Flexible control of nuclear cogeneration plants for balancing intermittent renewables”, *Energy*, v. 221, pp. art. 119906, 2021.
- [20] COTTA ET AL. “Dessalinização Nuclear”, *Revista ABCM Engenharia*, v. 16, n. 1, pp. 55–62, 2023.
- [21] COTTA ET AL. “Pequenos Reatores Modulares (SMRs): Perspectivas em dessalinização nuclear”, *Revista ABDAN*, v. 1, pp. 1–19, 2019.
- [22] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Guidance on Nuclear Energy Cogeneration*. Relatório Técnico Technical Reports Series No. NP-T-4.2, IAEA, Vienna, 2013.

- [23] CONSTANTIN, A. “Nuclear hydrogen projects to support clean energy transition: Updates on international initiatives and IAEA activities”, *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 54, pp. 768–779, 2024.
- [24] KHAMIS, I. “A global overview on nuclear desalination”, *International Journal of Nuclear Desalination*, v. 3, n. 4, pp. 311–328, 2009.
- [25] EL-EMAM ET AL. “Nuclear desalination: A sustainable route to water security”, *Desalination*, v. 542, pp. art. 116082, 2022.
- [26] CURTO, D., FRANZITTA, V., GUERCIO, A. “A Review of the Water Desalination Technologies”, *Applied Sciences*, v. 11, pp. art. 670, 2021.
- [27] SOARES ET AL. “Destinação de águas residuárias provenientes do processo de dessalinização por osmose reversa”, *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental*, v. 10, n. 3, pp. 730–737, 2006.
- [28] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Introduction of Nuclear Desalination: A Guidebook*. Iaea report, IAEA, Vienna, 2000. Capítulo 4.
- [29] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *DEEP Manual: Desalination Economic Evaluation Program*. Iaea report, IAEA, Vienna, 2000.
- [30] DE SOUZA, J. W. M. *Análise térmica de uma planta de dessalinização de múltiplo efeito (MED) com alimentação paralela*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal da Paraíba (UFPB), João Pessoa, Brasil, 2004.
- [31] GONZÁLEZ, D., AMIGO, J., SUÁREZ, F. “Membrane distillation: Perspectives for sustainable and improved desalination”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 80, pp. 238–259, 2017.
- [32] HSU, S. T., C. K. T. C. J. S. “Seawater desalination by direct contact membrane distillation”, *Desalination*, v. 143, pp. 279–287, 2002.
- [33] KHRAISHEH ET AL. “Energy efficiency of direct contact membrane distillation”, *Desalination*, v. 433, pp. 44–57, 2018.
- [34] LAWSON, K. W., LLOYD, D. R. “Membrane distillation”, *Journal of Membrane Science*, v. 124, pp. 1–25, 1997.
- [35] LISBOA ET AL. “Heat and mass transfer in hollow-fiber modules for direct contact membrane distillation: Integral transforms solution and parametric analysis”, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, v. 109, pp. art. 104373, 2019.

- [36] MESQUITA, C. R. S., G. A. O. C. N.-C. C. P. C. R. M. “Comparison of Different Polymeric Membranes in Direct Contact Membrane Distillation and Air Gap Membrane Distillation Configurations”, *Membranes*, v. 15, n. 91, 2025.
- [37] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Hydrogen Production Technologies: Overview*. Relatório técnico, IAEA, 2013.
- [38] EL-SHAFIE, M, KAMBARA, S., HAYAKAWA, Y. “Hydrogen Production Technologies Overview”, *Journal of Power and Energy Engineering*, v. 7, pp. 107–154, 2019.
- [39] DOS ANJOS ET AL. “ELECTROCHEMICAL ANALYSIS OF A MEMBRANELESS ELECTROLYZER FOR GREEN HYDROGEN PRODUCTION”. In: *Anais do 27º Congresso Internacional de Engenharia Mecânica, COBEM, Florianópolis*, 2023.
- [40] DINCER, I., ACAR, C. “Innovation in hydrogen production”, *international journal of hydrogen energy*, 2017.
- [41] MILLAR ET AL. “Renewable hydrogen production using non-potable water: Thermal integration of membrane distillation and water electrolysis stack”, *Applied Energy*, v. 333, pp. art. 113161, 2023.
- [42] INGERSOLL ET AL. “NuScale small modular reactor for Co-generation of electricity and water”, *Desalination*, v. 340, pp. 84–93, 2014.
- [43] DA SILVA ET AL. “ASSESSMENT OF DESALINATION VIA MEMBRANE DISTILLATION USING LOW-GRADE WASTE HEAT IN SMALL MODULAR REACTORS”, *Anais do 19º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, ENCIT, Bento Gonçalves*, 2022.
- [44] DA SILVA, G. C. G. R., COTTA, R. M., JIAN, S. “ANALYSIS OF NUCLEAR DESALINATION USING REJECTED AND EXTRACTED HEAT IN SMALL MODULAR REACTOR WITH MEMBRANE DISTILLATION”, *Anais do 27º Congresso Internacional de Engenharia Mecânica, COBEM, Florianópolis*, 2023.
- [45] JIAN ET AL. “Assessment of nuclear desalination in a small modular reactor using membrane distillation”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 216, pp. art. 111279, 2025.

- [46] RODRÍGUEZ ET AL. “Exergy study of hydrogen cogeneration and seawater desalination coupled to the HTR-PM nuclear reactor”, *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 48, pp. 2483–2509, 2023.
- [47] NATERER ET AL. “Coupling of copper–chloride hybrid thermochemical water splitting cycle with a desalination plant for hydrogen production from nuclear energy”, *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 35, pp. 1560–1574, 2010.
- [48] ALABBADI, A. A., ALZAHIRANI, A. A. “Nuclear hydrogen production using PEM electrolysis integrated with APR1400 power plant”, *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 60, pp. 241–260, 2024.
- [49] LIENHARD ET AL. “Energy and water without carbon: Integrated desalination and nuclear power at Diablo Canyon”, *Applied Energy*, v. 323, pp. art. 119612, 2022.
- [50] KONG, YANG ET AL. “Thermodynamic and economic analyses of nuclear power plant integrating with sea water desalination and hydrogen production for peak shaving”, *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 82, pp. 1372–1388, 2024.
- [51] MARQUES, J. G. O., COSTA, A. L., PEREIRA, C. “Thermodynamic study of a novel trigeneration process of hydrogen, electricity and desalinated water: The case of Na-O-H thermochemical cycle, SCWR nuclear power plant and MED desalination installation”, *Energy Conversion and Management*, v. 209, pp. art. 112648, 2020.
- [52] DE SAMPAIO, P. A. B., ALVES, L. F. R., MOREIRA, M. L. “HYBRID DCMD AND SWRO DESALINATION USING A SMALL PWR OF 75 MW(th) FOR COGENERATION OF WATER AND ELECTRICITY”, *Anais do 27^o Congresso Internacional de Engenharia Mecânica, COBEM, Florianópolis*, 2023.
- [53] GRYTA, M., TOMASZEWSKA, M. “Heat transport in membrane distillation process”, *Journal of Membrane Science*, 1998.
- [54] GNIELINSKI, V. “New Equations for Heat and Mass Transfer in Turbulent Pipe and Channel Flow”, *International Chemical Engineering*, v. 16, n. 2, pp. 359–367, 1976.