

EVALUACIÓN DEL COMPORTAMIENTO HIDRODINÁMICO EN UNA MEMBRANA
DE OSMÓISIS INVERSA USANDO FLUIDODINÁMICA COMPUTACIONAL (CFD)

ANGIE FERNANDA ESPINOSA VALLE

UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE INGENIERÍA
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
CALI, COLOMBIA

2025

EVALUACIÓN DEL COMPORTAMIENTO HIDRODINÁMICO EN UNA MEMBRANA
DE OSMÓISIS INVERSA USANDO FLUIDODINÁMICA COMPUTACIONAL (CFD)

ANGIE FERNANDA ESPINOSA VALLE

PROYECTO DE GRADO PRESENTADO PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERA
QUÍMICA

DIRECTORA:

ADRIANA KATERINE NIÑO VARGAS, Ph.D

UNIVERSIDAD DEL VALLE

FACULTAD DE INGENIERÍA

ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA

CALI, COLOMBIA

2025

RESUMEN

La ósmosis inversa (OI) es una tecnología ampliamente utilizada para la desalinización y tratamiento de aguas, cuyo desempeño se ve limitado por la formación de concentración de polarización (CP), fenómeno que reduce la eficiencia del proceso. En este trabajo de grado se desarrolló un modelo computacional en ANSYS Fluent para estudiar el efecto de la geometría de la membrana, el tipo de soluto y el material sobre la CP.

Se evaluaron dos geometrías patronadas, dos tipos de solutos NaCl y MgSO₄ y además, se integraron los materiales poliamida y fluoruro de polivinilideno (PVDF) desde GRANTA Selector, para estudiar el efecto térmico sobre la CP. La metodología fue verificada a partir de un modelo de simulación previamente publicado en la literatura científica, para el cual los resultados mostraron coherencia con los perfiles de concentración y comportamiento del sistema.

Los resultados indicaron que la geometría triangular presentó mayor coeficiente de transferencia de masa y menor espesor de capa límite para ambos solutos. Se observó que el NaCl, debido a su mayor difusividad, generó menor CP que el MgSO₄. Comparando valores simulados con los teóricos obtenidos por correlaciones de Sherwood, se encontraron errores relativos menores al 7 % para el coeficiente de transferencia de masa y menores al 10 % para el espesor de capa límite, lo cual valida la confiabilidad del modelo. En cuanto al comportamiento térmico, el aumento de temperatura favoreció el flujo de permeado, siendo el material poliamida quien presentó mayor conducción de calor que el PVDF; lo que permitió una reducción significativa en la CP.

Se concluye que la geometría, el tipo de soluto y el material de la membrana influyen de manera significativa en el comportamiento del proceso, y que la simulación CFD es una herramienta poderosa para su análisis y optimización.

Palabras clave: ósmosis inversa, concentración de polarización, CFD, geometría patronada

CONTENIDO

1.	INTRODUCCIÓN	8
2.	PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA Y JUSTIFICACIÓN	10
3.	OBJETIVOS	12
3.1	OBJETIVO GENERAL	12
3.2	OBJETIVOS ESPECIFICOS	12
4.	MARCO TEORICO	13
4.1	MARCO CONCEPTUAL	16
4.1.1	Osmosis inversa	16
4.1.2	Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)	16
4.1.3	Geometría patronada	17
4.1.4	Transferencia de masa	17
4.2	ANTECEDENTES	18
5.	METODOLOGÍA	21
5.1	VERIFICACIÓN DEL MODELO	21
5.1.1	Geometría	22
5.1.2	Generación de malla	24
5.1.3	Propiedades del fluido	25
5.1.4	Condiciones de contorno	26
5.1.5	Ecuaciones de gobierno	28
5.1.6	Parámetros numéricos de la simulación	28
5.2	SIMULACIÓN CON LA SAL SULFATO DE MAGNESIO (MgSO₄)	30
6.	RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS	31
6.1	VALIDACIÓN DEL MODELO	31
6.1.1	Perfil de velocidad	31
6.1.2	Perfil de concentración	32
6.1.3	Perfil de esfuerzo cortante	35
6.1.4	Factor CP y flujo de permeado	37
6.1.5	Coeficiente de transferencia de masa y espesor de capa límite	38
6.2	SIMULACIÓN CON SULFATO DE MAGNESIO MgSO₄	41

6.2.1	Perfil de concentración	41
6.2.2	Coefficiente de transferencia de masa y espesor de capa límite	44
6.3	EVALUACIÓN DE MATERIALES POLIAMIDA Y FLUORURO DE POLIVINILIDENO	46
7.	CONCLUSIONES.....	50
8.	RECOMENDACIONES	52
9.	BIBLIOGRAFIA	53

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Medidas de la geometria	23
Tabla 2. Análisis de sensibilidad de malla para la geometría LG rectángulo	24
Tabla 3. Análisis de sensibilidad de malla para la geometría LG triángulo	25
Tabla 4. Propiedades del fluido – solución NaCl	25
Tabla 5. Condiciones de contorno para la simulación. Las fronteras corresponden a la Figura 5.....	28
Tabla 6. Propiedades del fluido – Solución MgSO ₄	30
Tabla 7. Datos de flujo de permeado y CP factor vs datos reportados en el artículo	38
Tabla 8. Parámetros utilizados para el cálculo de k y δ	39
Tabla 9. Valores de k y δ calculados para cada geometría.....	40
Tabla 10. Coeficientes de transferencia de masa y espesor de capa límite para el soluto MgSO ₄	45
Tabla 11. Propiedades de la solución a 10 °C, 20 °C y 40 °C	47

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Patrones estudiados (a) LG rectángulo y (b) LG triángulo	22
Figura 2. Dimensiones de la geometría	23
Figura 3. Generación y refinamiento de malla – Patrón LG rectángulo	24
Figura 4. Generación y refinamiento de malla – Patrón LG triángulo	25
Figura 5. Modelo de bloque conceptual de la geometría. La parte inferior corresponde a la membrana.....	27
Figura 6. Perfiles de velocidad para a) LG triángulo b) LG rectángulo	32
Figura 7. 7 a) y 7 b) Perfil de concentración geometría LG triángulo, 7 c) y 7 d) Perfil de concentración tomado del artículo Zhou et al. 2021	33
Figura 8. 8 a) y 8 b) Perfil de concentración geometría LG rectángulo, 8 c) y 8 d) Perfil de concentración tomado del artículo Zhou et al. (2021)	34
Figura 9. 9 a) Perfil de concentración geometría plana, 9 b) Perfil de concentración tomado del artículo Zhou et al. (2021)	35
Figura 10. 1 a) y 1 b) Perfil de esfuerzo cortante geometrías LG triángulo y LG rectángulo respectivamente, 2 a) y 2 b) Perfil de esfuerzo cortante tomados del artículo Zhou et al. 2021	36
Figura 11. Perfil de concentración para el soluto MgSO ₄ en la geometría LG triángulo	42
Figura 12. Perfil de concentración para el soluto MgSO ₄ en la geometría LG	43
Figura 13. Concentración promedio sobre la membrana para ambos tipos de soluto	44
Figura 14. Flujo de permeado promedio para ambos tipos de soluto	44
Figura 15. Concentración promedio y flujo de permeado para el material PVDF a 10 °C, 20 °C y 40 °C.....	48
Figura 16. Concentración promedio y flujo de permeado para el material poliamida a 10 °C, 20 °C y 40 °C.....	49

1. INTRODUCCIÓN

La disponibilidad de agua dulce ha disminuido drásticamente debido a factores como el crecimiento poblacional, la urbanización acelerada, el cambio climático y la contaminación de fuentes hídricas. Según el informe de las Naciones Unidas sobre el desarrollo de los recursos hídricos en el mundo 2024 (UNESCO, 2024), se estima que la mitad de la población mundial experimenta al menos una vez al año, una grave escasez de agua y una cuarta parte experimenta niveles altos de estrés hídrico. Esta crisis hídrica global no solo amenaza la salud y el bienestar humano, sino que también ejerce una presión significativa sobre los ecosistemas, reduciendo la biodiversidad y alterando el equilibrio natural de los entornos acuáticos.

Para hacer frente a esta crisis, la desalinización se ha convertido en una solución clave, permitiendo la conversión de agua salada proveniente de fuentes naturales o efluentes industriales, en agua apta para el consumo humano o aprovechamiento nuevamente en el proceso. Existen varias tecnologías para la desalinización, entre las que se destacan la destilación, la electrodiálisis y la ósmosis inversa (OI). La destilación, uno de los métodos más antiguos, implica la evaporación y posterior condensación del agua, separándola de las sales. A pesar de ser efectiva, es un proceso energéticamente intensivo. La electrodiálisis, por otro lado, utiliza una corriente eléctrica para mover los iones de sal a través de membranas selectivas, dejando agua desalinizada, aunque su eficiencia disminuye con altos niveles de salinidad (Ezugbe & Rathilal, 2020).

Dentro de estas tecnologías, la ósmosis inversa (OI) se ha destacado por su eficiencia y escalabilidad, convirtiéndose en una de las opciones más apetecidas a nivel global. La OI funciona al aplicar presión a una solución salina, forzando el agua a través de una membrana semipermeable que retiene las sales y otras impurezas. Este método es particularmente valorado por su capacidad para producir grandes volúmenes de agua potable con un consumo de energía relativamente menor en comparación con otras tecnologías (Nurjanah et al., 2024).

En las últimas décadas, el desarrollo de modelos numéricos mediante dinámica de fluidos computacional (CFD) ha permitido estudiar con mayor detalle los fenómenos hidrodinámicos y de transporte que ocurren dentro de los módulos de membrana. Estas herramientas permiten

simular geometrías complejas, analizar distribuciones locales de velocidad, presión y concentración, e incluso predecir el comportamiento de nuevos diseños sin necesidad de ensayos experimentales costosos.

En este sentido, la aplicación de CFD, respaldada por trabajos previos, proporciona información y nuevos modelos para la fabricación de membranas y permite el análisis y estudio de los fenómenos que ocurren dentro de estas, como la distribución de flujo, la acumulación de solutos y el efecto de la temperatura del alimento, lo que facilita el diseño de sistemas más eficientes y sostenibles. El ensuciamiento y la obstrucción de los poros en las membranas de OI son uno de los fenómenos más estudiados a través de herramientas como el CFD puesto que permite analizar y explorar rápidamente múltiples diseños y materiales sin la necesidad de prototipos físicos (Najid et al., 2022),(Chong et al., 2024).

En este trabajo se explorará la aplicación de CFD en la simulación de una membrana de OI con el objetivo de contribuir al desarrollo de tecnologías más efectivas en el tratamiento de aguas, evaluando el efecto de parámetros como la geometría patronada, el tipo de sal y el material de la membrana sobre la CP y el flujo de permeado. La implementación del modelo CFD y los resultados obtenidos fueron verificados y contrastados con un artículo guía tomado de la literatura (Zhou et al., 2021).

2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA Y JUSTIFICACIÓN

La disponibilidad de agua dulce está disminuyendo a nivel mundial debido a factores como el cambio climático, el crecimiento poblacional y la contaminación. Esta crisis ha llevado a un aumento en la demanda de tecnologías capaces de convertir fuentes no convencionales de agua, como el agua de mar y las aguas salobres, en recursos hídricos utilizables. Las aguas salobres, que contienen concentraciones de sales superiores a las del agua dulce pero inferiores a las del agua de mar, representan una fuente significativa de agua que, si se trata adecuadamente, puede aliviar la presión sobre los recursos hídricos convencionales (Mauter & Fiske, 2020; Sola et al., 2021).

La desalinización se ha convertido en una solución clave para enfrentar esta problemática, y entre las diversas tecnologías disponibles, la ósmosis inversa (OI) es una de las más eficaces y utilizadas. Sin embargo, el tratamiento de aguas salobres y otras aguas con alta salinidad, como las provenientes de procesos industriales, presenta desafíos específicos. Siendo uno de los más críticos la polarización por concentración (CP), fenómeno en el cual los solutos rechazados se acumulan cerca de la superficie de la membrana, aumentando la presión osmótica local y reduciendo el flujo de permeado. Esta acumulación también favorece la formación de incrustaciones y el ensuciamiento de la membrana, disminuyendo la eficiencia del proceso y aumentando los costos de operación y mantenimiento (Fritzmann et al., 2007; Kumar et al., 2006).

Una de las estrategias más prometedoras en la mitigación de la CP es el uso de membranas con superficies patronadas o micro estructuradas. Diversos estudios han demostrado que estas geometrías pueden inducir perturbaciones en el flujo que aumentan la mezcla cerca de la superficie activa, reduciendo la acumulación de soluto y favoreciendo un transporte más eficiente. También, este tipo de geometría puede aumentar el área de transferencia de masa y así permitir un mayor flujo de permeado (Zhou et al., 2021).

Pese a estos avances, la mayoría de los estudios que abordan la polarización por concentración en sistemas OI han utilizado cloruro de sodio (NaCl) como soluto modelo, debido a su disponibilidad, solubilidad y comportamiento predecible. No obstante, para otras sales como el sulfato de magnesio (MgSO_4) que también están ampliamente presentes en aguas industriales y salobres, y presentan características fisicoquímicas distintas, no se encuentran estudios con enfoque en el comportamiento hidrodinámico para formación de CP. Motivo por el cual, en el presente trabajo este tipo de sal fue objeto de estudio y se presentaron datos que permiten plantear bases para futuras investigaciones.

A diferencia del NaCl, el MgSO_4 posee un coeficiente de difusión menor y una mayor tendencia a generar incrustaciones, lo cual influye significativamente en el comportamiento de la CP. Este análisis busca contribuir a una comprensión más amplia de los efectos hidrodinámicos de la geometría sobre la polarización, evaluando tanto la distribución de concentraciones y perfiles de velocidad como el desempeño del sistema frente a diferentes tipos de soluto.

Por otro lado, además de los efectos hidrodinámicos y del tipo de soluto, la temperatura del sistema tiene una influencia significativa sobre el desempeño de la ósmosis inversa. Variaciones térmicas afectan propiedades clave del fluido como la viscosidad, la densidad y el coeficiente de difusión, lo cual modifica la dinámica del flujo, el transporte de especies y la magnitud de la presión osmótica (Baghdadi et al., 2018), (Yaseen Khalaf Biomedical Engineering Dept, 2008). A pesar de su relevancia, la mayoría de las investigaciones CFD sobre CP asumen condiciones isotérmicas, omitiendo el análisis térmico y el comportamiento acoplado temperatura-transporte. Este vacío limita la capacidad de extrapolar los resultados a condiciones reales de operación, donde las membranas están expuestas a gradientes térmicos internos o a temperaturas elevadas.

En esta tesis se identificaron, mediante el software Granta Selector, dos materiales ampliamente utilizados en membranas: poliamida (PA) y PVDF. Estos presentan propiedades térmicas contrastantes, lo que permite establecer un marco comparativo preliminar sobre su respuesta ante condiciones de operación variables. Incorporar el efecto térmico de estos materiales no solo aporta al análisis del flujo de permeado y la CP, sino que también abre la puerta a futuras simulaciones acopladas de transferencia de calor y masa, más representativas del entorno industrial.

De este modo, esta tesis tiene como objetivo generar información clave que contribuya a la optimización del diseño de membranas y módulos de ósmosis inversa, formulando criterios que integren no solo la configuración geométrica de las superficies, sino también el estudio de otro tipo de solutos, dando respuesta a la siguiente pregunta de investigación: ¿Cuál es el comportamiento hidrodinámico de los solutos NaCl y MgSO_4 en una membrana de ósmosis inversa con geometría patronada, y cómo influye en el desarrollo de la polarización por concentración y el flujo de permeado, evaluado mediante simulación CFD?.

3. OBJETIVOS

3.1 OBJETIVO GENERAL

Determinar el efecto de la geometría y la concentración de solutos sobre la concentración de polarización en una membrana de osmosis inversa usando CFD.

3.2 OBJETIVOS ESPECIFICOS

1. Establecer el modelo fenomenológico que describe el proceso de desalinización a través de membranas usadas en procesos de osmosis inversa mediante el uso de información secundaria
2. Simular el flujo y distribución de concentración en la membrana de osmosis inversa bajo condiciones de operación obtenidas a partir de información secundaria y mediante el uso del software ANSYS.
3. Determinar los perfiles de velocidad de flujo, esfuerzo cortante y concentración en función de los solutos NaCl y MgSO_4 , y geometrías patronadas en las membranas a partir de las simulaciones realizadas.
4. Evaluar el efecto térmico de los materiales poliamida y polivinilideno fluoruro (PVDF) tomados de la base de materiales GRANTA de ANSYS, a través de la variación de la temperatura de entrada del fluido.

4. MARCO TEORICO

Concentración de polarización: Es un fenómeno que se produce en los procesos de separación mediante membranas y consiste en la acumulación de soluto en la superficie de la membrana debido al equilibrio que existe entre las fuerzas impulsoras conectivas, que provocan el arrastre del soluto hacia la membrana y propician el permeado de disolvente, y las fuerzas difusivas, que lleva el soluto de nuevo al seno de la solución (Li et al., 2016). En síntesis, se refiere al soluto que está retenido en la zona adyacente a la membrana de forma permanente y se puede expresar de la siguiente manera:

$$CP = \frac{C_m - C_o}{C_m} \quad (1)$$

Donde: CP es la concentración por polarización, C_m la concentración en la superficie de la membrana, C_o Concentración en el alimento

Ecuación convección-difusión: Es la combinación de las ecuaciones de convección y difusión que describe fenómenos físicos en los que las partículas, energía u otras magnitudes físicas se transfieren dentro de un sistema físico debido a dos procesos: difusión y convección. Siendo esta:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Y_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_j} \right) + R_i + S_i \quad (2)$$

Donde: Y_i es la fracción másica de la especie química i , u_j es la velocidad del fluido, D_i es el coeficiente de difusión, R_i es el término fuente de reacción, ρ es la densidad del fluido, t corresponde al tiempo, x_j es la coordenada espacial correspondiente a la dirección del flujo y S_i incluye todas las demás fuentes.

A modo de complemento la convección se puede definir como un mecanismo de transferencia de masa entre una superficie y un fluido en movimiento debido tanto a la difusión como al movimiento del fluido sobre dicha superficie. Mientras que la difusividad es una propiedad física que describe la velocidad con la que un soluto se dispersa o se mueve de una región de mayor concentración a una de menor concentración a través de la membrana, debido a un gradiente de concentración.

Numero de Sherwood: Es un número adimensional que representa la razón entre el transporte convectivo de masa y el transporte difusivo en un sistema fluido. y se puede definir como:

$$Sh = \frac{k*L}{D} \quad (3)$$

Donde: Sh es el número de Sherwood, k es el coeficiente de transferencia de masa, L es la longitud característica del sistema, D es el coeficiente de difusión del soluto

Espesor de capa límite: denotado generalmente como δ , es la distancia muy delgada que se forma cerca de la superficie de la membrana donde existe un gradiente de concentración significativo de soluto debido a la separación selectiva. Y se expresa así:

$$\delta = \frac{D}{k} \quad (4)$$

Donde: δ es espesor de la capa límite, k es el coeficiente de transferencia de masa,

D difusividad del soluto

Igualmente, a la hora de estudiar este proceso a través de fluidodinámica computacional se deben resolver las ecuaciones de Navier Stokes que permiten simular el fenómeno de transporte de masa y cantidad de movimiento, estas ecuaciones se representan de la siguiente manera:

Ecuación de continuidad: expresa la conservación de la masa en un fluido, establece que la masa que entra y sale de un volumen de control debe ser igual. En flujo incompresible, la divergencia de la velocidad es cero.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla * \rho v) = 0 \quad (5)$$

Donde: $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ representa la variación de densidad del fluido respecto al tiempo y $\nabla * \rho v$ es la divergencia del producto entre la densidad y el campo de velocidad.

Ecuación de cantidad de movimiento: describe la conservación del momentum en un fluido, relaciona las fuerzas (presión, viscosas, externas) con los cambios de velocidad del fluido en el espacio y el tiempo.

$$\left(\frac{\rho Dv}{Dt}\right) = -\nabla P + \mu \nabla^2 v + \rho g \quad (6)$$

Donde: $\frac{\rho Dv}{Dt}$ es la aceleración del fluido, $-\nabla P$ representa la presión en el fluido, $\mu \nabla^2 v$ termino que representa las fuerzas viscosas y ρg es la fuerza gravitacional externa que actúa sobre el fluido.

Tensión de cizallamiento: Conocido también como el *esfuerzo cortante* es la fuerza tangente a una superficie por unidad de área

$$\tau = \mu \frac{du}{dy} \quad (7)$$

Donde: τ es el esfuerzo cortante, μ es viscosidad, u es velocidad y y es distancia transversal

4.1 MARCO CONCEPTUAL

4.1.1 Ósmosis inversa

La ósmosis inversa (OI) es un proceso de separación que utiliza una membrana semipermeable para remover solutos disueltos de una solución, aplicando una presión mayor a la presión osmótica natural. En condiciones normales de ósmosis, el solvente (agua) se mueve desde una solución diluida hacia una más concentrada a través de la membrana. Sin embargo, en la ósmosis inversa este flujo natural se revierte mediante la aplicación de presión externa sobre el lado concentrado (solución de alimentación), forzando el paso del agua pura hacia el lado opuesto, conocido como permeado. La membrana actúa como una barrera selectiva que permite el paso del agua, pero rechaza la mayoría de los solutos (sales, iones y compuestos orgánicos) (Biesheuvel et al., 2022).

Este mecanismo es fundamental en aplicaciones como la desalinización de agua de mar, el tratamiento de aguas salobres e industriales y la producción de agua ultrapura. Su eficiencia depende de varios factores, como la presión aplicada, la calidad de la membrana, la temperatura, la concentración de solutos y la presencia de fenómenos como la polarización por concentración.

2.1.2 Dinámica de Fluidos Computacional (CFD)

Es una rama de la mecánica de fluidos que utiliza métodos numéricos y algoritmos computacionales para resolver y analizar problemas que involucran flujo de fluidos, transferencia de calor, transporte de masa y otros fenómenos relacionados. En el contexto de la ósmosis inversa, la simulación CFD permite modelar con precisión el comportamiento del flujo dentro del canal de alimentación, la evolución de la concentración de solutos cerca de la membrana y la interacción entre el fluido y las microestructuras presentes en su superficie.

Mediante la discretización del dominio en una malla computacional y la resolución iterativa de las ecuaciones de conservación de masa (continuidad), cantidad de movimiento (Navier-Stokes) y transporte de especies, es posible predecir el perfil de velocidad, los gradientes de presión y la acumulación de soluto en la interfaz de la membrana. Esta herramienta resulta

especialmente útil en estudios donde se busca evaluar el impacto de parámetros geométricos o fisicoquímicos sin necesidad de recurrir a ensayos experimentales costosos o difíciles de controlar.

2.1.3 Geometría patronada

Hace referencia al diseño de superficies con microestructuras repetitivas (como canales, cavidades, crestas o protuberancias) aplicadas sobre la cara activa de una membrana de ósmosis inversa. Este tipo de modificación geométrica tiene como objetivo mejorar el desempeño del sistema mediante la alteración controlada del flujo hidrodinámico en la vecindad de la membrana. Estas estructuras generan perturbaciones localizadas en el flujo que promueven la mezcla transversal, interrumpen las zonas de baja velocidad cercanas a la membrana y, en consecuencia, reducen la formación de la capa límite de soluto asociada a la polarización por concentración (CP). Al aumentar el transporte convectivo en la interfaz, las geometrías patronadas pueden favorecer un mayor flujo de permeado y disminuir el riesgo de incrustación superficial.

2.1.4 Transferencia de masa

Es el proceso mediante el cual las especies químicas (átomos, moléculas o iones) se desplazan de una región de mayor concentración a otra de menor concentración, como resultado de gradientes de concentración, presión o temperatura. Este fenómeno puede ocurrir por distintos mecanismos, entre los cuales los más relevantes en sistemas de membranas son la difusión molecular y la convección.

En el proceso de ósmosis inversa, la transferencia de masa ocurre principalmente en el canal de alimentación, donde el soluto es transportado hacia la superficie de la membrana, mientras el solvente (agua) atraviesa selectivamente la barrera semipermeable. Este transporte se ve influenciado por el campo de velocidades del flujo, las propiedades del soluto (como su coeficiente de difusión), la geometría del canal y la presencia de fenómenos como la polarización por concentración.

4.2 ANTECEDENTES

La ósmosis inversa (OI) se ha consolidado como una de las tecnologías más utilizadas a nivel mundial para la desalinización y el tratamiento de aguas salobres e industriales, debido a su alta eficiencia y capacidad de producir agua de alta calidad. Sin embargo, el proceso enfrenta diversas limitaciones operativas, siendo la polarización por concentración (CP) uno de los fenómenos más críticos. La CP ocurre cuando los solutos rechazados por la membrana se acumulan en su superficie, generando un aumento local de la presión osmótica que reduce la fuerza impulsora efectiva para el paso de agua, disminuye el flujo de permeado y favorece la formación de incrustaciones y ensuciamiento.

Con el objetivo de mitigar este problema, se han propuesto estrategias basadas en la modificación geométrica de la superficie de la membrana. Zhou et al. (2021) desarrollaron un estudio pionero que evaluó, mediante simulación CFD en COMSOL, el efecto de membranas patronadas con relieves rectangulares y lineales sobre la CP. Sus resultados mostraron que ciertas geometrías pueden aumentar el flujo de permeado hasta un 40 % en comparación con superficies planas, gracias a la mejora en la mezcla y el aumento de área disponible para transferencia de masa. Este estudio sentó bases importantes para el diseño de membranas más eficientes, aunque se enfocó exclusivamente en el uso de NaCl como soluto modelo y en condiciones isotérmicas.

Por otro lado, (Kavianipour et al., 2017) estudiaron el uso de espaciadores en canales de OI, mostrando que estas estructuras pueden reducir la CP al mejorar la mezcla, pero también pueden generar zonas estancadas que aumentan la acumulación de soluto. No obstante, no evaluaron la interacción simultánea con geometrías patrónadas ni diferentes tipos de solutos. (Bai et al., 2023) profundizaron en la cuantificación local de la CP, destacando la importancia de técnicas in situ y membranas activas para reducir las capas límite. Sin embargo, reconocen que la mayoría de los métodos actuales carecen de precisión para monitorear CP a alta presión y en condiciones reales. En el estudio realizado por (Mitranescu et al., 2025) se evaluaron mediante CFD la interacción de membranas patrónadas y espaciadores, demostrando un incremento en el flujo de permeado y reducción parcial de la CP, aunque también identificaron que los patrones pueden crear zonas con CP localizada más severa, ha sido uno

de los estudios que evaluó los dos parámetros más estudiados para la reducción de la CP, la geometría y los espaciadores.

(Najid et al., 2022) revisaron el desarrollo de membranas de ósmosis inversa “*antifouling*”, destacando la importancia del modelado y la simulación en su avance. Se analizaron los conocimientos recientes sobre “*fouling*”, los procedimientos de limpieza y las tecnologías de pretratamiento. Se subrayan los avances en la tecnología de membrana OI y el uso de modelado a macroescala y microescala, con la dinámica de fluidos computacional (CFD) como una herramienta prometedora para capturar los fenómenos involucrados en OI y “*fouling*”. Se concluye que es necesario desarrollar modelos que logren un equilibrio entre costo computacional y precisión para simular eficazmente el “*fouling*” en el proceso de OI.

(Chong et al., 2024) desarrollaron una metodología de dinámica de fluidos computacional que describe los fenómenos físicos en los lados de alimentación, poroso y de extracción de OARO. El modelo CFD muestra un buen ajuste con datos experimentales y predice el flujo de agua con mayor precisión que un modelo analítico simplificado. Se destaca que la polarización de concentración externa (ECP) en el lado de alimentación es más relevante que la polarización interna (ICP) en la capa de soporte, especialmente a altas presiones transmembranales ($\Delta p \geq 40$ bar).

(Morgante et al., 2024) investigaron la aplicación de la nanofiltración (NF) como una solución prometedora para la separación selectiva de elementos monovalentes de los divalentes, mejorando la recuperación de minerales del agua de mar y la salmuera de ósmosis inversa (SWRO). Se evaluaron cinco membranas comerciales de NF, mostrando que todas lograron rechazos superiores al 90% para cationes multivalentes. La membrana DK se destacó por su superior permeabilidad y selectividad, lo que la hace adecuada para la preconcentración selectiva de minerales. El estudio resalta la importancia de la tecnología NF en la valorización circular del agua de mar y la salmuera de SWRO, abordando preocupaciones sobre la viabilidad económica en la extracción mineral.

Finalmente, (Gupta, 2003) analizó experimentalmente el comportamiento del MgSO_4 en membranas NF-255, resaltando su menor coeficiente de difusión y mayor tendencia a la formación de incrustaciones, lo que intensifica la CP en comparación con NaCl . Este trabajo destaca la importancia de estudiar diferentes solutos presentes en aguas reales, un aspecto

poco explorado en simulaciones numéricas mientras que, (Khalaf, 2008) evaluó el impacto de la temperatura en el rendimiento de la OI, demostrando que un aumento en la temperatura incrementa el flujo de permeado debido a la disminución de la viscosidad, pero también puede afectar la integridad de la membrana y la severidad de la CP. Aun así, la mayoría de los estudios CFD mantienen condiciones isotérmicas, sin considerar el efecto térmico acoplado.

En síntesis, los estudios existentes destacan la importancia de las geometrías patrónadas para reducir la CP y mejorar el flujo de permeado, pero presentan limitaciones notables:

1. La mayoría se enfocan exclusivamente en NaCl y no consideran otros solutos relevantes como MgSO_4 .
2. Se realizan bajo condiciones isotérmicas, omitiendo el análisis del efecto de la temperatura y de los gradientes térmicos sobre la CP.
3. No integran el análisis de las propiedades térmicas y mecánicas de los materiales de membrana en el comportamiento hidrodinámico y de transporte.

Estas brechas justifican el desarrollo de esta tesis, cuyo objetivo principal es validar numéricamente el modelo de Zhou et al. (2021) en ANSYS Fluent 2025-R1, ampliando el análisis al comportamiento del MgSO_4 como soluto divalente y evaluando preliminarmente el impacto de las propiedades térmicas de los materiales poliamida y PVDF. Con esto, se busca aportar información que permita diseñar sistemas de ósmosis inversa más eficientes y robustos, considerando condiciones reales de operación y composiciones de agua más representativas.

5. METODOLOGÍA

5.1 VERIFICACIÓN DEL MODELO

La simulación se realizó siguiendo como guía el artículo “Concentration polarization over reverse osmosis membranes with engineered surface features” (Zhou et al., 2021), en este artículo se realizó la modelación, mediante CFD, del flujo y la distribución de concentración en canales de ósmosis inversa con membranas patrónadas que incluyen relieves rectangulares y lineales. Se estudiaron diferentes geometrías para analizar su efecto en la polarización por concentración (CP) y el flujo de permeado. En esta investigación, el flujo de agua se impone como condición de salida en la membrana, mientras el soluto se acumula en la superficie, simulando rechazo total. Los resultados permiten identificar cómo las estructuras geométricas modifican el perfil de velocidad y la distribución de la concentración del soluto.

Aunque en el artículo guía se realizó la simulación mediante el software COMSOL Multiphysics 5.3, para este proyecto de grado se realizó la simulación en el software ANSYS 2025 – R1 a través de su versión estudiantil y una licencia concedida por 3 meses para la base de datos de materiales GRANTA. Además, las simulaciones numéricas desarrolladas en este trabajo se realizaron en un equipo de cómputo personal con sistema operativo Windows 11, de 64 bits, configurado con un procesador AMD Ryzen 7 7730U con gráficos Radeon y una memoria RAM instalada de 24 GB. Estas características permitieron ejecutar los modelos CFD en ANSYS Fluent 2025-R1 con tiempos de cálculo razonables y sin comprometer la estabilidad del sistema. La capacidad de procesamiento y memoria resultó adecuada para manejar las mallas refinadas necesarias para representar las geometrías patrónadas.

5.1.1 Geometría

La geometría utilizada en este estudio corresponde a la representación del canal de alimentación de un módulo de ósmosis inversa, donde la superficie correspondiente a la membrana es una superficie patronada, es decir, una membrana modificada con microestructuras diseñadas específicamente para alterar el comportamiento del flujo. Estas estructuras consisten en relieves con forma rectangular y triangular, distribuidos periódicamente a lo largo de la superficie activa. Los patrones se caracterizan por tener dimensiones micrométricas, que permiten crear zonas de recirculación y promover la mezcla transversal del fluido. Estos diseños fueron tomados de las configuraciones propuestas por Zhou et al. (2021), quienes demostraron que dichas geometrías tienen un efecto significativo sobre la polarización por concentración. La implementación de esta geometría patronada busca incrementar el área efectiva de transferencia y mejorar la eficiencia global del proceso de separación, sin comprometer la integridad estructural de la membrana.

(a)



(b)



(c)

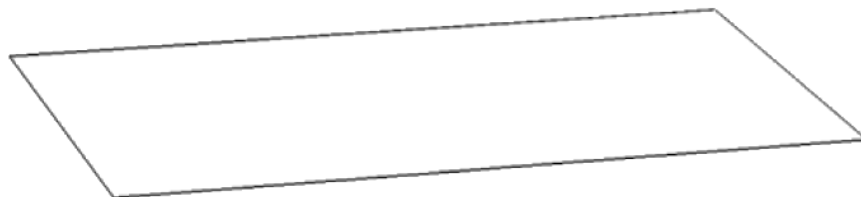


Figura 1. Patrones estudiados (a) LG rectángulo, (b) LG triángulo y (c) Plana

Las dimensiones de las geometrías se presentan en la Tabla 1, estas dimensiones fueron propuestas dentro del rango típico de dimensiones estudiadas para patrones en membranas de osmosis inversa y fabricables mediante técnicas de moldeo por contacto o estampado térmico (Morgante et al., 2024). En este tipo de sistemas de desalinización, el flujo está delimitado por membranas ubicadas por encima y por debajo del fluido, por lo que el tamaño del patrón debía ser determinado de forma tal que la pared opuesta no afectara el comportamiento del fluido más que el patrón mismo.

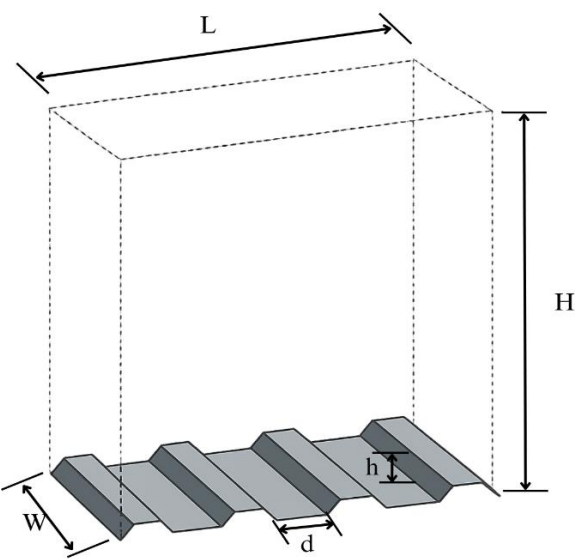


Figura 2. Dimensiones de la geometría

Tabla 1. Medidas de la geometria

Longitud total, L (μm)	Ancho total, W (μm)	Altura total, H (μm)	Distancia entre patrones, d (μm)	Altura del patrón, h (μm)
4096	2048	8000	512	256

5.1.2 Generación de malla

Se generó una malla con elementos finitos tetraédricos para cada geometría, el enmallado se realizó de forma tal, que cubre todo el espacio por encima de la membrana y en esta se añadieron capas de inflación con el objetivo de caracterizar y localizar el gradiente de concentración de sal cerca de la superficie de la membrana.

Se escogió el tipo de elemento tetraédrico dada la complejidad de la geometría (existencia de curvas) y el número óptimo de elementos en la malla se determinó a través de un análisis de sensibilidad donde se estudió la variación de la concentración promedio sobre la membrana. La malla escogida fue aquella que tuviera menor variación de las concentraciones promedio entre las 3 mallas generadas gruesa, media y fina, donde se obtuvo que la malla media solo tenía una variación del 5.25% para la geometría LG rectángulo y 5.22% para la geometría LG triángulo respecto a la malla fina, por lo que la verificación del modelo se realizó con la malla media de 740000 y 620000 elementos respectivamente. El número de elementos estudiados se determinó teniendo en cuenta las métricas de calidad de malla como la ortogonalidad, asimetría y calidad del elemento. Los resultados se pueden observar en la Tabla 2 y Tabla 3.

Tabla 2. Análisis de sensibilidad de malla para la geometría LG rectángulo

Tipo de malla	Número de elementos	Concentración promedio (mol/m^3)
Malla gruesa	520000	51.34
Malla media	740000	58.72
Malla fina	875000	61.95

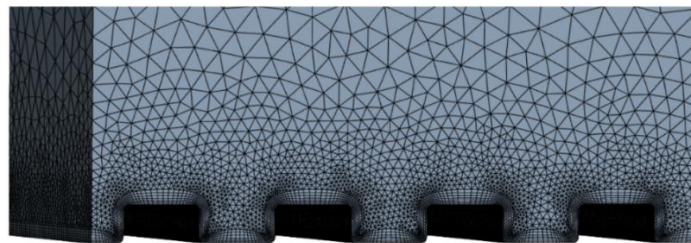


Figura 3. Generación y refinamiento de malla – Patrón LG rectángulo

Tabla 3. Análisis de sensibilidad de malla para la geometría LG triángulo

Tipo de malla	Número de elementos	Concentración (mol/m^3)
Malla gruesa	545000	50.26
Malla media	620000	55.32
Malla fina	780000	58.37

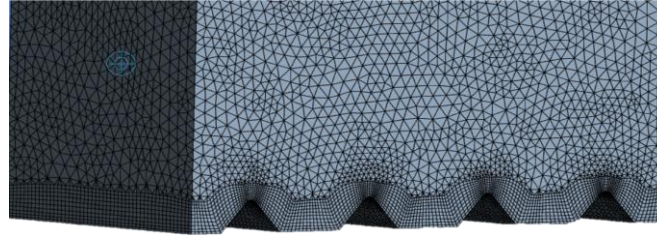


Figura 4. Generación y refinamiento de malla – Patrón LG triángulo

5.1.3 Propiedades del fluido

Para la verificación del modelo propuesto en el artículo se tomó como fluido de estudio una solución de NaCl con una concentración de entrada de $25 \text{ mol}/\text{m}^3$. Las propiedades del agua se tomaron directamente del software; para las propiedades de la sal, al estar en una solución tan diluida, se tomaron igual a las del agua excepto su peso molecular y el coeficiente de difusión tomado del artículo guía correspondiente a $1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ a 20°C (Zhou et al., 2021). La concentración inicial se determinó a partir del rango típico de concentración de NaCl en agua salobre y la concentración mínima necesaria para estudiar el fenómeno de polarización por concentración. Las propiedades del fluido se describen a continuación:

Tabla 4. Propiedades del fluido – solución NaCl

Propiedad	NaCl	Agua
Densidad (kg/m^3)	998.2	998.2
Peso molecular (kg/kmol)	58.44	18.0152
Viscosidad dinámica ($\text{kg}/\text{m s}$)	0.00103	0.00103
Coefficiente de difusión (20°C) (m^2/s)	1×10^{-9}	-

5.1.4 Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno fueron definidas para replicar adecuadamente el comportamiento del flujo y el transporte de especies en una membrana de ósmosis inversa, considerando una representación a escala de canal unitario. La pared superior del canal se modeló como una superficie móvil, a la cual se le aplicó un perfil de velocidad parabólico tipo Poiseuille Ec. (8), con el fin de inducir un flujo laminar representativo del régimen interno de los módulos comerciales. Esta elección busca generar un perfil completamente desarrollado sin necesidad de un dominio de entrada extendido.

$$u_{in}(H) = \frac{3}{2}u_{prom}[1 - (\frac{H_c-H}{H_c})^2] \quad (8)$$

Donde: $u_{prom}=0.1 \frac{m}{s}$, $H_c=8000 \mu m$

Esta condición en la parte superior se implementó para simular el esfuerzo cortante que, en la práctica, se genera cuando el flujo de alimentación circula entre dos membranas planas dispuestas en paralelo. El movimiento de la pared superior induce un flujo tipo Couette, representando el gradiente de velocidad que experimenta el fluido entre las dos superficies de membrana. Esta aproximación, ampliamente utilizada en la literatura, permite capturar de manera más realista los efectos de cizallamiento sobre la formación de la capa límite y la polarización de concentración, sin necesidad de modelar explícitamente ambas membranas (Bae et al., 2023).

La pared inferior representa la superficie activa de la membrana y se configuró con una condición de flujo de permeado implementada mediante una función definida por el usuario, (UDF) en Fluent, basada en la ecuación de van't Hoff, Ec. (9). Esta condición toma en cuenta la diferencia entre la presión hidrostática y la presión osmótica local para modelar el paso selectivo del agua a través de la membrana.

$$u_m = A(\Delta P - a_{osm}C_{NaCl}) \quad (9)$$

Donde: A = permeabilidad de la membrana al agua $5.24 \times 10^{-12} \text{ m}/(\text{s} * \text{Pa})$, a_{osm} = *coeficiente osmótico de presión* $4872 \text{ Pa} * \frac{\text{m}^3}{\text{mol}}$, C_{NaCl} concentración local de NaCl en la pared de la membrana, ΔP presión transmembrana aplicada, se calcula restando la presión de permeado de la presión aplicada calculada en la pared de la membrana. La presión de permeado es cero, lo cual es válido para representar condiciones típicas donde el permeado se descarga a presión atmosférica. Esta simplificación permite trabajar en términos de presión manométrica y calcular el flujo de permeado directamente como función de la presión local en la membrana y la presión osmótica del soluto acumulado. Por lo tanto, ΔP es igual a la presión aplicada.

Las paredes laterales se definieron como periódicas, lo cual permite simular un patrón geométrico repetitivo y reduce el tamaño del dominio computacional sin comprometer la generalidad de los resultados. Finalmente, en la salida del canal se fijó una condición de presión constante, para permitir el drenaje del fluido sin generar gradientes de presión artificiales. Esta configuración fue adoptada con base en el artículo de (Zhou et al., 2021) y en prácticas estándar en simulaciones de membranas, asegurando tanto la validez física del modelo como la posibilidad de comparación con resultados experimentales y numéricos previos.

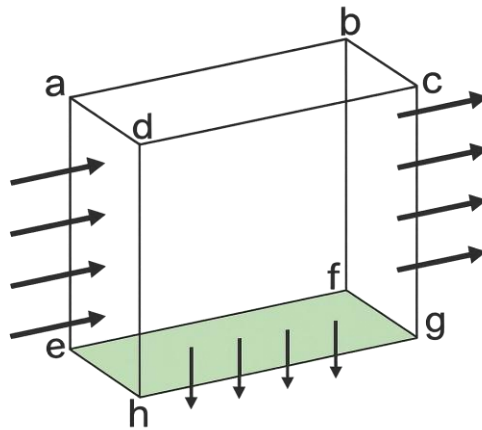


Figura 5. Modelo de bloque conceptual de la geometría. La parte inferior corresponde a la membrana

Tabla 5. Condiciones de contorno para la simulación. Las fronteras corresponden a la Figura 5

Frontera	Flujo de fluido	Transporte de masa del soluto
Pared móvil (a-b-c-d)	$u = (u_{in}, 0, 0)$	Impermeable
Entrada (a-d-h-e)	$u = (u_{in}, 0, 0)$	$C_{NaCl} = 25 \text{ mol/m}^3$
Salida (b-c-g-f)	$P = 2800 \text{ kPa}$	
Pared lateral (d-c-h-g)	Periódica	Periódica
Pared lateral (a-b-e-f)	Periódica	Periódica
Membrana permeable	$u = (0, 0, -u_m)$	Impermeable

5.1.5 Ecuaciones de gobierno

La simulación CFD del proceso de ósmosis inversa se fundamenta en la solución numérica de las ecuaciones de conservación de la masa, cantidad de movimiento (Navier-Stokes) y el transporte de especies, bajo las siguientes hipótesis:

1. Flujo laminar, incompresible y estacionario
2. Modelo tridimensional
3. Disolución binaria (agua + soluto)
4. Rechazo completo del soluto en la membrana
5. Flujo de permeado aplicado solo para el agua como condición en la pared de membrana

5.1.6 Parámetros numéricos de la simulación

- ❖ Método de resolución de ecuaciones: Para la solución numérica de las ecuaciones de gobierno en ANSYS Fluent, se empleó el algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations), ampliamente utilizado en problemas de flujo incompresible. Este método permite resolver de forma acoplada las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento, mediante un procedimiento

iterativo que corrige el campo de presión para garantizar que se satisfaga la ecuación de continuidad. En cada iteración, se resuelve primero un campo de velocidad provisional utilizando una presión estimada; luego, se corrige la presión resolviendo una ecuación derivada de la continuidad, y finalmente se ajusta el campo de velocidad con base en la nueva presión. Este proceso se repite hasta alcanzar la convergencia del sistema.

- ❖ Criterio de convergencia: El criterio de convergencia utilizado en las simulaciones se estableció en un umbral de $\sim 10^{-6}$ para los residuales, asegurando que las soluciones numéricas alcanzaran un estado estable y físicamente coherente. Este criterio se aplicó de manera estricta a las variables clave del modelo: las componentes de velocidad en x , y y z , la presión y la fracción másica de especies, permitiendo garantizar la conservación de masa, momento y concentración en todo el dominio. La reducción de los residuales por debajo de este valor indica que las correcciones entre iteraciones son mínimas y que el sistema ha llegado a un equilibrio numérico.
- ❖ Esquema de discretización: Se utilizó el esquema *Second Order Upwind* para las variables de transporte, incluyendo momento y especies. Este esquema mejora la precisión de la solución al calcular el valor de una variable escalar en la celda corriente usando una interpolación cuadrática basada en las celdas aguas arriba. A diferencia del esquema de primer orden, el cual introduce una alta difusión numérica, el esquema *Second Order Upwind* reduce significativamente los errores de truncamiento y permite capturar mejor los gradientes de concentración y velocidad, lo cual es crucial en la predicción precisa de la polarización por concentración. Aunque es más exigente computacionalmente, este esquema fue seleccionado para garantizar la estabilidad y fidelidad del modelo numérico.
- ❖ Número de iteraciones realizadas: 3000 – 5000 iteraciones
- ❖ Tiempo promedio de simulación: 15 horas

5.2 SIMULACIÓN CON LA SAL SULFATO DE MAGNESIO ($MgSO_4$)

Una vez se realizó la validación del modelo para las dos geometrías estudiadas, se realizó la simulación para la sal $MgSO_4$ en cada geometría. Las condiciones de simulación se mantuvieron, excepto por las propiedades del fluido que se describen a continuación. El coeficiente de difusión para este soluto se tomó de la literatura de donde se obtuvieron experimentalmente coeficientes de difusión para varios solutos a diferentes temperaturas [Rard et al., 1979].

Tabla 6. Propiedades del fluido – Solución $MgSO_4$

Propiedad	$MgSO_4$	Agua
Densidad (kg/m^3)	998.2	998.2
Peso molecular (kg/kmol)	120.366	18.0152
Viscosidad dinámica (kg/m s)	0.00103	0.00103
Coeficiente de difusión (20 °C) (m^2/s)	3.96×10^{-10}	-

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

6.1 VALIDACIÓN DEL MODELO

La validación del modelo constituye un paso necesario para asegurar que las condiciones físicas, las ecuaciones implementadas y la configuración numérica representan adecuadamente el fenómeno de ósmosis inversa. Los resultados obtenidos fueron comparados con los perfiles de concentración reportados en el artículo, tanto de forma cualitativa como cuantitativa. A continuación, se presentan las gráficas comparativas, seguidas de un análisis detallado de los perfiles de concentración, la tensión de cizallamiento y otros parámetros relevantes. La coincidencia entre los resultados simulados y los reportados en la literatura permite evaluar la fidelidad del modelo y establecer su validez como base para el análisis con otros solutos o configuraciones geométricas.

6.1.1 Perfil de velocidad

En la Figura 6 se presentan los perfiles de magnitud de velocidad obtenidos en las simulaciones CFD para las geometrías LG rectángulo y LG triángulo. En ambos casos, se observa un perfil característico de flujo tipo Poiseuille, donde la velocidad es mínima cerca a la membrana (pared inferior) y máxima en la parte superior del dominio, cerca de la pared móvil. Esta distribución es coherente con lo reportado por el artículo guía, quienes confirmaron que el perfil general del flujo se ajusta al comportamiento clásico entre placas paralelas.

Sin embargo, se pueden observar algunas diferencias locales inducidas por la geometría. En la geometría LG rectángulo, se observan zonas de bajo flujo y posibles formaciones de vórtices en los valles entre los obstáculos rectangulares, lo que coincide con la descripción de vórtices de baja velocidad tipo cavidad impulsada por tapa (lid-driven cavity) reportados en el artículo. Estos vórtices no generan suficiente mezcla para reducir significativamente la polarización por concentración, ya que su velocidad es baja y su efecto está confinado localmente. En el artículo se alcanzaron velocidades máximas de 0.24 m/s para la geometría

rectangular y de 0.17 m/s para la geometría triangular, mientras que en las simulaciones realizadas para esta investigación se alcanzaron velocidades máximas de 0.2 m/s para la geometría rectangular y 0.14 m/s para la geometría triangular, dando un porcentaje de error relativo del 16.6% y del 17.6%, respectivamente. Para la geometría plana no se reportaron datos de velocidad en el artículo.

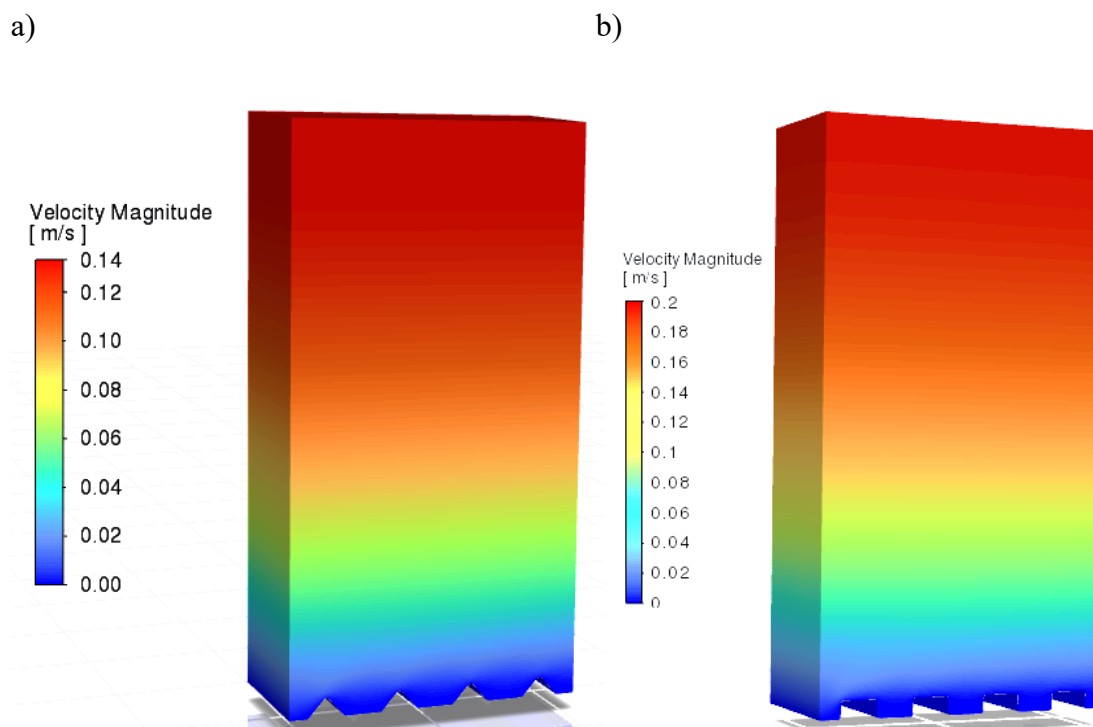


Figura 6. Perfiles de velocidad para a) LG triángulo b) LG rectángulo

6.1.2 Perfil de concentración

En la Figura 7 se comparan los resultados obtenidos para la geometría LG triángulo, Figuras 7 a) y 7 b), con los reportados en el artículo de Zhou et al., 2021, Figuras 7 c) y 7 d). La Figura 7a muestra el perfil de concentración molar de NaCl a lo largo de la membrana, y evidencia una excelente correspondencia con la curva del artículo; Figura 7c, tanto en la ubicación periódica de los picos como en la forma general del perfil. Los máximos de concentración se presentan inmediatamente detrás de cada patrón triangular, lo cual refleja

el efecto de recirculación y estancamiento de soluto en dichas regiones. Además, la magnitud máxima obtenida en esta simulación fue de 115 mol/m^3 , que es ligeramente superior a la reportada en el artículo de 100 mol/m^3 reportando un error relativo del 15%, lo que puede atribuirse a diferencias en la malla, las condiciones de contorno o la implementación del flujo de permeado. Aun así, la coincidencia en la distribución relativa y el patrón periódico validan el comportamiento hidrodinámico y de transporte de especies simulado.

Por su parte, la Figura 7 b) presenta el contorno superficial de concentración en la membrana, donde se observa una distribución alternada de zonas de alta y baja concentración alineadas con la geometría triangular, replicando de forma coherente el patrón mostrado en el artículo, Figura 7 d).

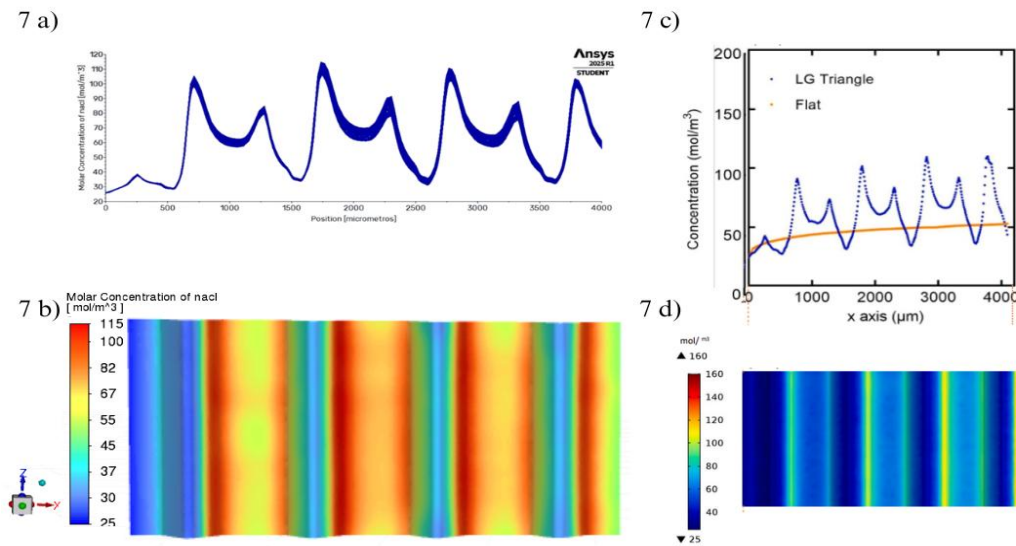


Figura 7. 7 a) y 7 b) Perfil de concentración geometría LG triángulo, 7 c) y 7 d) Perfil de concentración tomado del artículo Zhou et al. 2021

En la Figura 8 se comparan los resultados obtenidos para la geometría LG rectángulo en esta simulación CFD con los perfiles reportados por Zhou et al. 2021. La Figura 8 a) presenta el perfil de concentración molar de NaCl sobre la superficie de la membrana, donde se evidencia una correspondencia clara con la forma y localización de los picos reportados en el artículo, Figura 8 c). Cada pico de concentración se presenta inmediatamente después de los patrones rectangulares, lo que refleja las zonas de recirculación que impiden el barrido eficiente del soluto, mientras que entre los patrones se observan valles donde la concentración disminuye.

En cuanto a la magnitud, la concentración máxima obtenida fue de aproximadamente 162 mol/m³, mientras que en el artículo el valor máximo ronda los 150 mol/m³, lo que representa una diferencia relativa del 7.4%. Esta discrepancia puede atribuirse a variaciones en el refinamiento de malla o detalles en la implementación del flujo de permeado.

La Figura 8 b), que muestra el contorno superficial de concentración sobre la membrana, también refleja una coincidencia notable con la figura del artículo, Figura 8 d). Ambas presentan bandas verticales de alta concentración detrás de cada patrón rectangular, confirmando la acumulación localizada de soluto. Las zonas azules entre los picos sugieren una mayor eficiencia de arrastre en esas regiones, lo cual es coherente con el comportamiento reportado por el artículo guía. En conjunto, los resultados validan el modelo numérico implementado en ANSYS Fluent, mostrando que es capaz de reproducir con buena precisión tanto la forma como la distribución espacial de la polarización de concentración inducida por geometrías rectangulares.

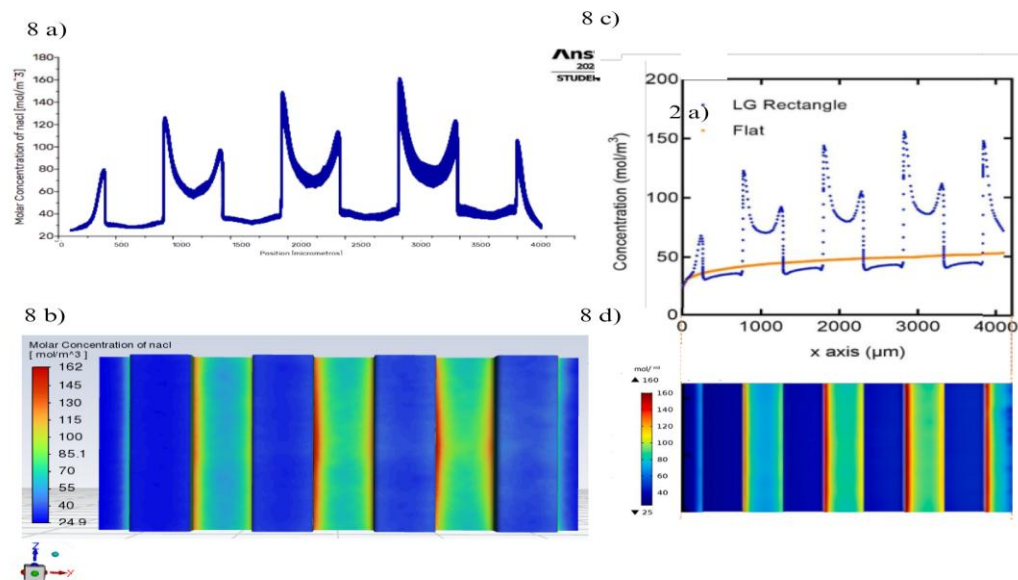


Figura 8. 8 a) y 8 b) Perfil de concentración geometría LG rectángulo, 8 c) y 8 d) Perfil de concentración tomado del artículo Zhou et al. (2021)

Adicionalmente, se realizó la simulación para una membrana plana con el objetivo de comparar el aumento de CP o flujo de permeado respecto a las geometrías patronadas. En la Figura 9 a) se puede observar el perfil de concentración obtenido para la membrana plana, donde se alcanza una concentración máxima de 57 mol/m³, y en la figura 9 b) el perfil

reportado por el artículo para el mismo tipo de membrana con una concentración máxima aproximada de 53 mol/m^3 , lo que representa un error relativo porcentual del 7.5%.

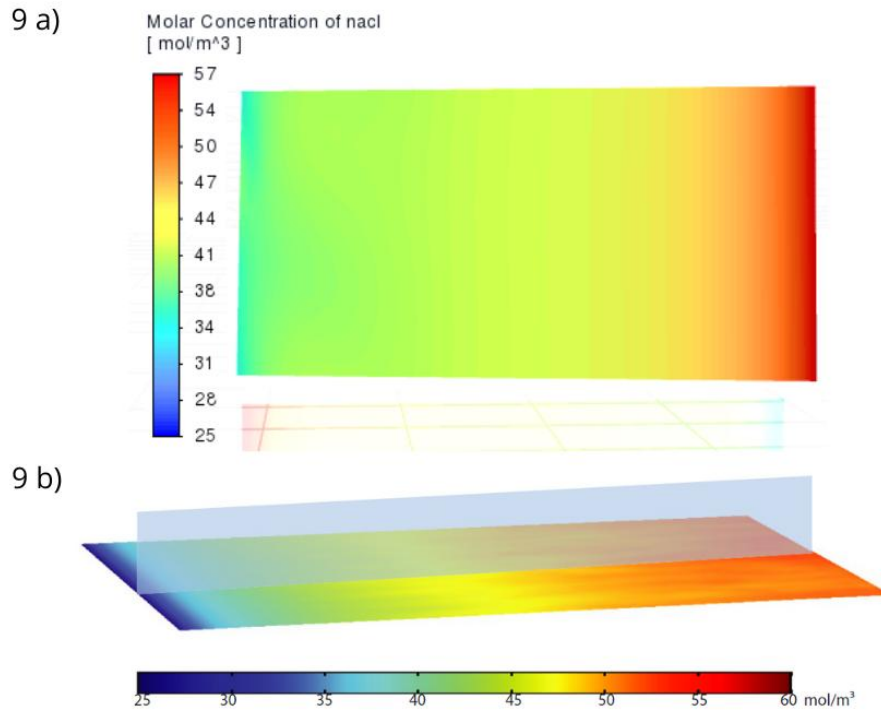


Figura 9. 9 a) Perfil de concentración geometría plana, 9 b) Perfil de concentración tomado del artículo Zhou et al. (2021)

6.1.3 Perfil de esfuerzo cortante

La figura 10 muestra la distribución del esfuerzo cortante en la pared de la membrana para las geometrías LG triángulo y LG rectángulo, obtenidas a partir de simulaciones en ANSYS Fluent. En ambas geometrías se observa un patrón característico donde el esfuerzo cortante es máximo sobre los picos de los obstáculos y disminuye considerablemente en las zonas de valle. Este comportamiento coincide con lo reportado por Zhou et al. (2021), quienes encontraron que las regiones de bajo esfuerzo cortante favorecen la acumulación de soluto, mientras que las zonas con mayor cizalladura contribuyen al arrastre del soluto hacia el flujo principal, reduciendo localmente la polarización de concentración.

En la figura 1 b) se observa que, los patrones rectangulares al presentar superficies más amplias generan mayores gradientes de velocidad, por lo tanto, generan una mayor cizalladura en las regiones frontales. Esto tiene implicaciones directas sobre el transporte másico: en la geometría rectangular, la mayor cizalladura promueve un mayor arrastre de soluto y, en consecuencia, una reducción localizada de la CP en los picos. Sin embargo, esta mejora se ve parcialmente compensada por la fuerte acumulación de soluto, que representa concentraciones entre los 100 mol/m^3 y 160 mol/m^3 , en las zonas de valle, donde el esfuerzo cortante es cercano a cero.

Para la geometría LG triángulo se observa un perfil de cizalladura más suave, con gradientes menos pronunciados, lo cual sugiere un comportamiento más equilibrado entre arrastre y acumulación. Esto puede explicar por qué, según el artículo y los resultados presentes, esta geometría produce una polarización de concentración más moderada, aunque también una menor eficiencia de arrastre.

En conjunto, los perfiles de esfuerzo cortante obtenidos son coherentes con los mecanismos descritos en la literatura: las zonas de alto esfuerzo cortante se asocian con menor CP, mientras que las zonas de bajo esfuerzo cortante favorecen la acumulación de soluto. Este análisis respalda la validez del modelo implementado y refuerza la importancia de considerar la distribución de cizalladura como un parámetro crítico en el diseño de superficies en membranas de ósmosis inversa.

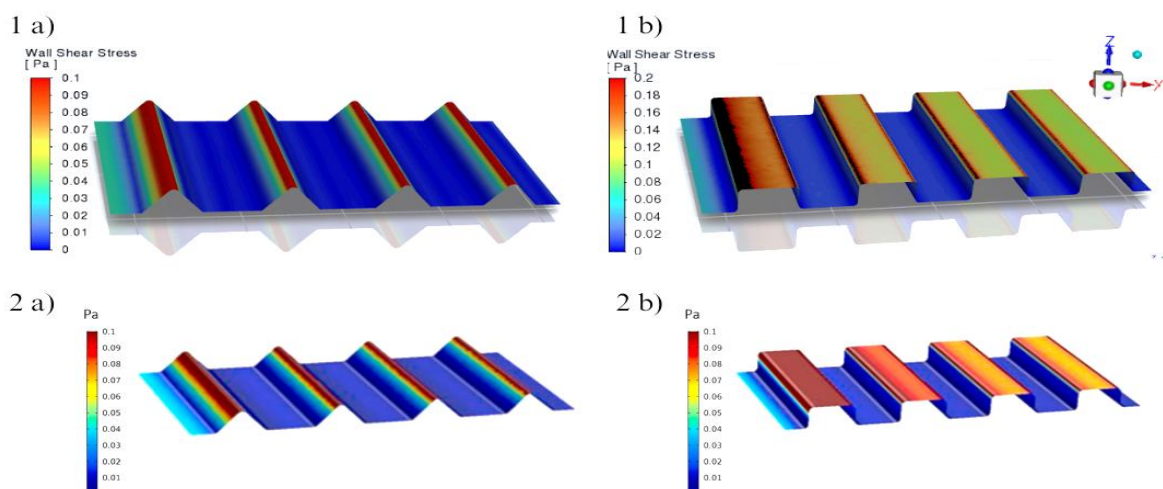


Figura 10. 1 a) y 1 b) Perfil de esfuerzo cortante geometrías LG triángulo y LG rectángulo respectivamente, 2 a) y 2 b) Perfil de esfuerzo cortante tomados del artículo Zhou et al. 2021

6.1.4 Factor CP y flujo de permeado

Se observa que la geometría LG rectángulo alcanzó el mayor flujo de permeado promedio, 1.88×10^{-5} m/s, seguida por LG triángulo, 1.62×10^{-5} m/s y finalmente la membrana plana 1.36×10^{-5} m/s, lo que indica que ambas geometrías patrón mejoran el flujo de permeado frente a la configuración plana. Sin embargo, esta mejora viene acompañada de un incremento en la concentración promedio de NaCl sobre la superficie de la membrana, alcanzando 61.95 mol/m^3 en LG rectángulo y 58.37 mol/m^3 en LG triángulo, en comparación con 43.03 mol/m^3 en la plana. Como resultado, el factor de polarización de concentración (CP factor), que representa la relación entre la concentración en la membrana y la concentración en el bulto, fue más alto en las geometrías estructuradas: 2.48 para LG rectángulo, 2.33 para LG triángulo y 1.72 para la plana. Para facilitar la comparación, se utilizó la normalización tomando como base la geometría plana.

Los valores normalizados muestran que el flujo de permeado fue 1.385 veces mayor en LG triángulo y 1.192 veces mayor en LG Rectángulo, mientras que los CP factor fueron 1.44 y 1.36 veces mayores, respectivamente. Esto indica que, si bien los patrones mejoran la permeabilidad, también intensifican la polarización de concentración, especialmente en las zonas de baja cizalladura entre patrones. Finalmente, los errores relativos frente al artículo guía fueron bajos: entre 4.16 % y 5.51 % para el flujo de permeado, y entre 5.29 % y 7.64 % para el CP factor, lo que confirma que el modelo numérico implementado en ANSYS Fluent reproduce con buena fidelidad los resultados experimentales reportados por Zhou et al. (2021). En conjunto, estos resultados validan la precisión del modelo y demuestran que las geometrías patrón modifican significativamente el comportamiento hidrodinámico y de transporte de soluto en membranas de ósmosis inversa. Dado que el artículo de referencia no reporta intervalos de confianza ni errores experimentales, los resultados se comparan a partir de valores promedio. No obstante, se consideran aceptables diferencias menores al 10 % como criterio de validación numérica.

Tabla 7. Datos de flujo de permeado y CP factor vs datos reportados en el artículo

Geometría	Flujo de permeado promedio [m/s]	Concentración promedio de NaCl [mol/m ³]	CP Factor	Flujo de permeado normalizado	CP factor normalizado	Flujo permeado error relativo vs artículo	CP factor error relativo vs artículo
LG rectángulo	1.88×10^{-5}	61.95	2.48	1.38	1.44	4.16%	5.29%
LG triángulo	1.62×10^{-5}	58.37	2.33	1.19	1.36	5.51%	7.64%
Plana	1.36×10^{-5}	43.03	1.72	1.0	1.0	4.57%	5.28%

6.1.5 Coeficiente de transferencia de masa y espesor de capa límite

Finalmente, se calcularon los coeficientes de transferencia de masa k y el espesor de la capa límite de concentración δ para las geometrías LG rectángulo y LG triángulo, replicadas del artículo de Zhou et al. (2021). Estos valores se estimaron a partir de la correlación de Sherwood propuesta en el artículo y se compararon con los resultados obtenidos en esta tesis.

A continuación, se presentan las ecuaciones usadas para el cálculo de estos dos parámetros:

❖ Número de Sherwood:

$$Sh = a * Re^b * Sc^c * \left(\frac{d_h}{L}\right)^d \quad (13)$$

Donde: $a = 1.85$, $b = c = d = 0.275$ valores hallados en el artículo guía

❖ Número de Schmidt:

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D} \quad (14)$$

❖ Número de Reynolds:

$$Re = \frac{\rho U d_h}{\mu} \quad (15)$$

❖ Coeficiente de transferencia de masa - teórico

$$k = \frac{Sh * D}{d_h} \quad (16)$$

❖ Coeficiente de transferencia de masa – simulación

$$Cp\ factor = \frac{C_m}{C_b} = \exp\left(\frac{J}{k}\right) \quad (17)$$

Donde: C_m es la concentración sobre la membrana, C_b es la concentración en el alimento y J es el flujo de permeado

❖ Espesor de capa límite

$$\delta = \frac{D}{k} \quad (18)$$

Los datos utilizados en cada ecuación fueron los siguientes:

Tabla 8. Parámetros utilizados para el cálculo de k y δ

Parámetro	Valor
Difusividad D [m^2/s]	1×10^{-9}
Densidad, ρ [kg/m^3]	998,2
Viscosidad, μ [$Pa \cdot s$]	1.03×10^{-3}
Velocidad, U [m/s]	0.1
Longitud del canal, L [m]	0.004096
Diámetro hidráulico - LG Rectángulo [m]	2.39×10^{-3}
Diámetro hidráulico - LG Triángulo [m]	2.06×10^{-3}

Los resultados obtenidos para el coeficiente de transferencia de masa k y el espesor de la capa límite δ revelan diferencias entre las geometrías LG triángulo y LG rectángulo. La geometría triangular presentó un k teórico de $2.49 \times 10^{-5} \text{ m/s}$ y simulado de $2.30 \times 10^{-5} \text{ m/s}$, mientras que su espesor de capa límite fue de $40.1 \text{ }\mu\text{m}$ teóricamente y $43.5 \text{ }\mu\text{m}$ en simulación, dando como resultado porcentajes de error relativos de 7.6% y 8.5%. Por otro lado, la geometría LG rectángulo mostró menores coeficientes de transferencia de masa tanto teóricos como simulados $2.14 \times 10^{-5} \text{ m/s}$ y $1.95 \times 10^{-5} \text{ m/s}$ respectivamente, y un espesor de capa límite más elevado $46.7 \text{ }\mu\text{m}$ teórico y $51.3 \text{ }\mu\text{m}$ simulado respecto a la geometría triangular, valores que presentan errores relativos de 8.87% y 9.85% respectivamente.

Sin embargo, al analizar el flujo de permeado obtenido en la simulación, se encontró que la geometría LG rectángulo presentó mayor flujo de permeado que LG triángulo. Esto puede atribuirse a que el perfil rectangular ofrece una mayor área para transferencia de masa. Mientras que, la geometría LG triángulo, si bien mostró un menor flujo de permeado, presentó condiciones más homogéneas de concentración y un menor CP, por lo tanto, se concluye que, la geometría LG rectángulo favorece el paso de agua y LG triángulo ofrece un mejor control sobre la acumulación de sal.

Tabla 9. Valores de k y δ calculados para cada geometría

Geometría	Coeficiente de transferencia de masa, k [m/s]	Espesor de capa límite, δ [μm]
Teórico		
LG triángulo	2.49×10^{-5}	40.1
LG rectángulo	2.14×10^{-5}	46.7
Simulación		
LG triángulo	2.30×10^{-5}	43.5
LG rectángulo	1.95×10^{-5}	51.3

6.2 SIMULACIÓN CON SULFATO DE MAGNESIO $MgSO_4$

A continuación, se presenta la simulación del sistema de membrana utilizando sulfato de magnesio ($MgSO_4$) como soluto, con el fin de analizar cómo las propiedades fisicoquímicas de un soluto diferente al NaCl afectan la distribución de concentración y el flujo de permeado. En esta simulación, el $MgSO_4$ se considera como una única especie molecular, sin modelar explícitamente su disociación en iones. Aun así, debido a su mayor masa molar y su menor coeficiente de difusión respecto al NaCl, se espera una mayor acumulación del soluto cerca de la superficie de la membrana, lo cual puede intensificar la polarización de concentración (CP) y modificar el rendimiento hidráulico del sistema (Gupta, 2003). Esta sección busca explorar esas diferencias y evaluar la respuesta del modelo ante la presencia de un soluto con menor movilidad molecular en el medio líquido.

El comportamiento del flujo en los perfiles de velocidad y esfuerzo cortante fue igual a la sal NaCl, hubo un mayor esfuerzo cortante en los picos de las geometrías y un menor esfuerzo cortante en los valles. En cuanto a la velocidad, el perfil de flujo de poseuille también se observó para el $MgSO_4$ asegurando un perfil de flujo laminar. Por lo tanto, esta sección se centra en comprar los valores de CP y flujo de permeado para cada tipo de sal en cada geometría propuesta.

6.2.1 Perfil de concentración

La simulación con sulfato de magnesio evidenció un patrón característico de polarización de concentración a lo largo de la membrana. En el contorno superior se observa una acumulación progresiva de soluto en dirección del flujo, con zonas de alta concentración localizadas en los valles del patrón geométrico. Esta acumulación se cuantifica con mayor claridad en el gráfico inferior, donde el perfil de concentración superficial muestra picos repetitivos que alcanzan valores cercanos a 130 mol/m^3 , partiendo desde concentraciones mínimas del orden de 12 mol/m^3 al inicio del canal. Esta oscilación en la concentración superficial está relacionada con la geometría ondulada, que provoca variaciones en el campo de velocidad y la renovación del fluido cercano a la pared, afectando directamente la intensidad de la CP.

Los picos de concentración más altos coinciden con zonas de estancamiento o recirculación en los valles geométricos, donde el transporte convectivo disminuye y predomina la difusión. Este comportamiento sugiere que el MgSO_4 , como soluto bivalente de mayor masa molecular y menor difusividad comparada con NaCl , es más susceptible a la acumulación en la interfase membrana-líquido. Esto resulta en una CP más intensa, incluso bajo condiciones similares de operación. La información obtenida de este perfil resalta la importancia de considerar la naturaleza específica del soluto en el diseño y optimización de módulos de ósmosis inversa. En este caso, la selección geométrica adecuada es crucial para mitigar la CP al tratar soluciones con MgSO_4 , debido a su tendencia a formar capas límite más densas y resistentes al barrido hidráulico.

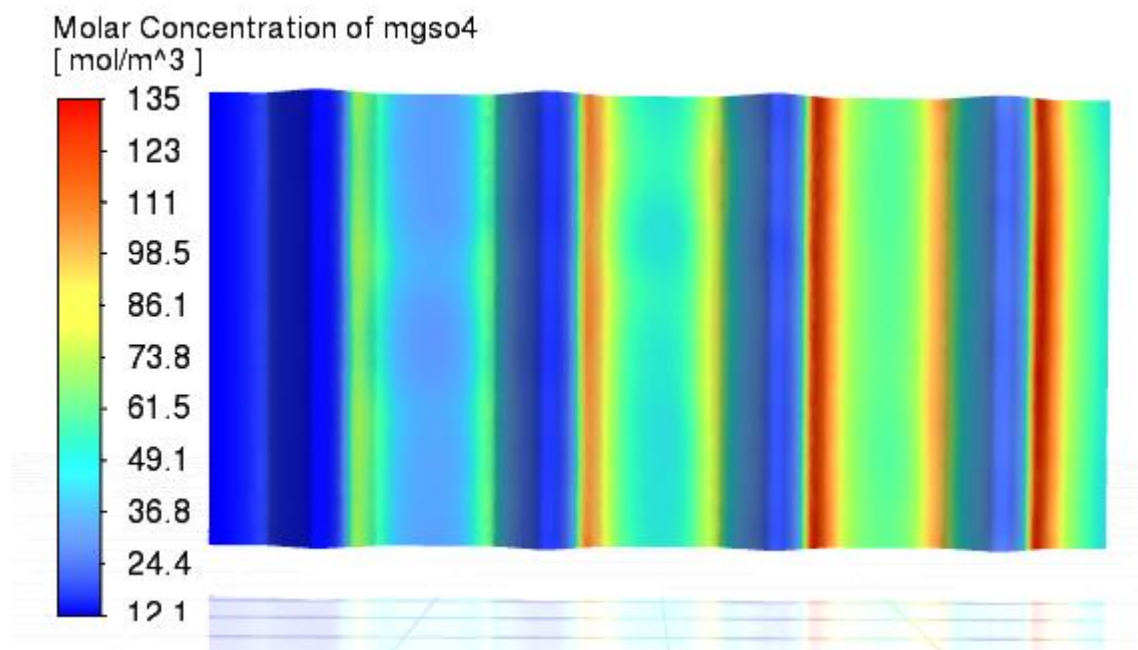


Figura 11. Perfil de concentración para el soluto MgSO_4 en la geometría LG triángulo

La geometría LG rectángulo presentó un perfil de concentración más regular, con zonas verticales de alta concentración continua que alcanzan hasta 175 mol/m^3 , un valor considerablemente mayor al observado en LG triángulo. Esta distribución sugiere que el transporte convectivo en la región cercana a la membrana es menos efectivo. Este comportamiento confirma que, aunque la geometría rectangular puede favorecer el flujo de permeado por ofrecer menor resistencia hidráulica, también aumenta la polarización de

concentración, especialmente con solutos de baja difusividad como el MgSO_4 . Por tanto, desde el punto de vista del control de CP, la geometría triangular demuestra un desempeño más favorable para el tratamiento de soluciones con este tipo de solutos multivalentes.

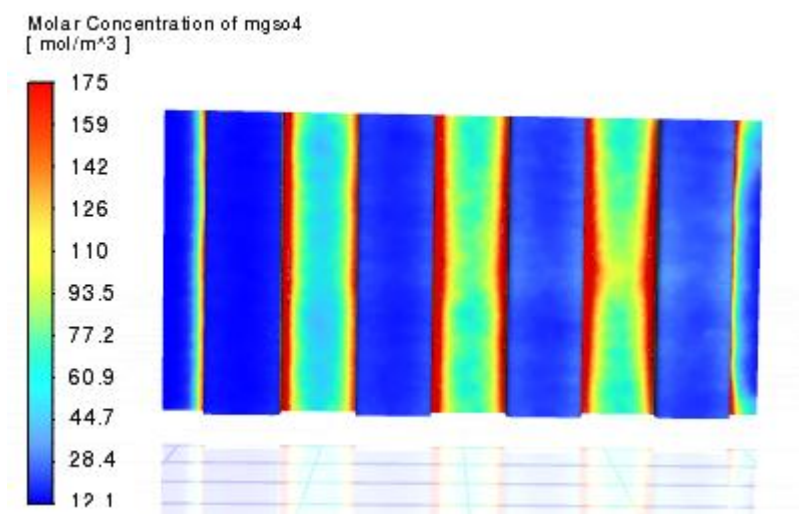


Figura 12. Perfil de concentración para el soluto MgSO_4 en la geometría LG

En las Figuras 13 y 14 se puede observar la concentración promedio sobre la membrana y el flujo de permeado para cada geometría y soluto. Con el objetivo de describir visualmente la diferencia de cada variable para cada tipo de soluto, se usó un gráfico de columnas agrupadas en donde se puede observar que para ambos tipos de geometría el soluto MgSO_4 presentó una mayor concentración promedio sobre la membrana que el soluto NaCl y, por ende, se observa que el flujo de permeado para MgSO_4 es levemente menor respecto a NaCl . Este comportamiento era predecible dado que el MgSO_4 presenta un menor coeficiente de difusión lo que hace su flujo más lento esto genera una mayor acumulación de soluto sobre la membrana y un aumento en la presión osmótica local que disminuye el flujo de permeado sobre la membrana.

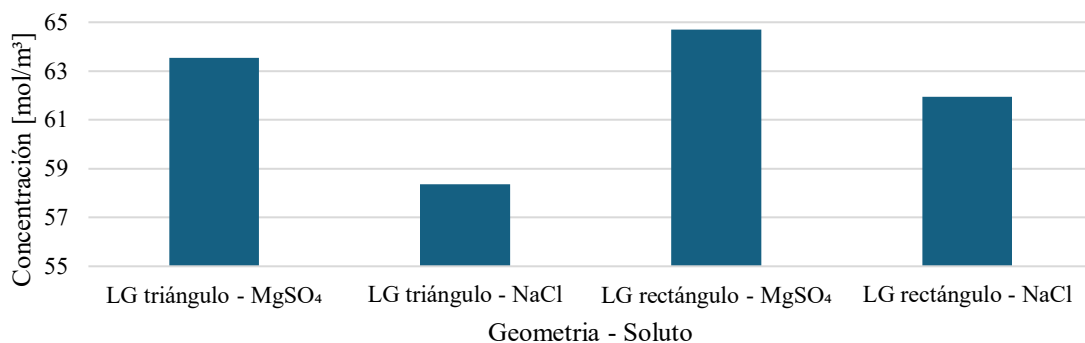


Figura 13. Concentración promedio sobre la membrana para ambos tipos de soluto

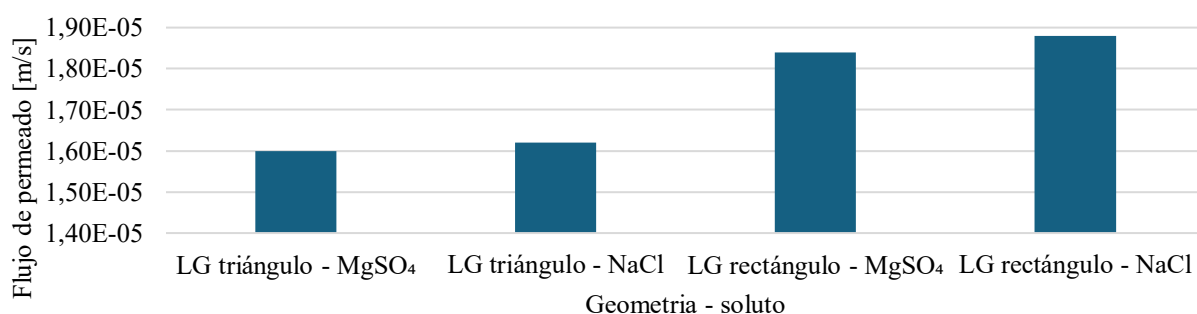


Figura 14. Flujo de permeado promedio para ambos tipos de soluto

6.2.2 Coeficiente de transferencia de masa y espesor de capa límite

Se calculó el coeficiente de transferencia de masa y el espesor de la capa límite correspondiente al soluto MgSO₄ para cada tipo de geometría, mediante las ecuaciones mencionadas en la sección 4.1.5.

Los resultados obtenidos para el sulfato de magnesio (MgSO₄) muestran diferencias importantes entre las dos geometrías evaluadas. En términos generales, la geometría LG triángulo presentó un coeficiente de transferencia de masa mayor y un menor espesor de capa límite, tanto en los valores teóricos como en los obtenidos mediante simulación. Específicamente, el valor teórico k fue de 1.667×10^{-5} m/s, mientras que el obtenido por simulación fue incluso mayor, de 1.801×10^{-5} m/s, lo cual sugiere un comportamiento más eficiente del transporte másico en esta configuración.

En contraste, la geometría LG rectángulo mostró valores inferiores de k y un espesor de capa límite más alto. Su mayor espesor de capa límite, 34 μm , refleja una mayor acumulación de soluto cerca de la superficie de la membrana, lo cual podría limitar el flujo de permeado y aumentar la presión osmótica local. Estos resultados son consistentes con el comportamiento periódico patronado de la geometría, que en el caso del triángulo podría favorecer una mejor distribución del flujo y promover mayor mezcla, reduciendo así los gradientes de concentración.

Al comparar los resultados obtenidos para NaCl y MgSO_4 , se evidencia que los valores de coeficiente de transferencia de masa k fueron en general menores para el sulfato de magnesio, tanto en los cálculos teóricos como en los simulados, lo cual es coherente con su menor coeficiente de difusión en agua. Además, en ambos casos, la geometría LG – triángulo mantuvo un mejor desempeño en términos de transferencia másica frente a la geometría rectangular, mostrando un k mayor y una capa límite más delgada. Sin embargo, debido a la mayor masa molar y menor movilidad de MgSO_4 , la diferencia entre las geometrías se hace más notoria, resaltando la importancia de considerar la naturaleza del soluto al diseñar módulos de membrana optimizados.

Tabla 10. Coeficientes de transferencia de masa y espesor de capa límite para el soluto MgSO_4

Geometría	Coeficiente de transferencia de masa, k [m/s]	Espesor de capa límite [μm]
Teórico		
LG - triángulo	1.667×10^{-5}	25.4
LG - rectángulo	1.078×10^{-5}	36.8
Simulación		
LG - triángulo	1.801×10^{-5}	23
LG - rectángulo	1.167×10^{-5}	34

6.3 EVALUACIÓN DE MATERIALES POLIAMIDA Y FLUORURO DE POLIVINILIDENO

Con el objetivo de analizar cómo las propiedades térmicas de los materiales afectan el desempeño de la membrana de ósmosis inversa, se evaluaron dos materiales comúnmente utilizados en su fabricación: poliamida (PA) y polivinilideno fluoruro (PVDF) en la geometría LG triángulo. Aunque la poliamida cumple la función de capa activa, encargada del rechazo de solutos y el paso selectivo de agua, y el PVDF actúa como soporte estructural, se consideró relevante estudiar ambos de forma independiente para identificar su respuesta frente a gradientes de temperatura (El-Gendi, 2022), (Kim et al., 2009). Para ello, se llevaron a cabo simulaciones térmicas a tres temperaturas de entrada diferentes: 10 °C, 20 °C y 40 °C, lo que permitió observar cómo varían las propiedades del fluido y de los materiales, tales como la viscosidad, la difusividad, la densidad y la capacidad calorífica específica, las cuales influyen directamente en el desarrollo de la capa límite y en la polarización de concentración.

El análisis térmico incorporó la dependencia de la presión osmótica con la temperatura a través de la ecuación de Van't Hoff, lo cual se reflejó en la formulación del flujo de permeado dentro de las condiciones de contorno impuestas. Evaluar el comportamiento térmico de los materiales es relevante porque, en la práctica, los sistemas de ósmosis inversa están expuestos a variaciones térmicas tanto ambientales como operativas, y estas afectan el rendimiento del proceso. Una mayor temperatura generalmente reduce la viscosidad del agua, aumenta la difusividad del soluto y disminuye la resistencia al paso de agua, lo que incrementa el flujo de permeado. Sin embargo, también puede generar mayor acumulación de soluto en la interfaz de la membrana, intensificando la polarización de concentración si el transporte difusivo no compensa el efecto térmico. Por tanto, se espera que la respuesta térmica de cada material influya en el gradiente de temperatura dentro de la membrana y en la eficiencia global del sistema, permitiendo identificar cuál configuración favorece un mayor rendimiento con menor impacto en la CP (Dévora-Isiordia et al., 2023).

En la Tabla 10 se encuentran los valores usados de difusividad, densidad y capacidad calorífica para cada temperatura estudiada. La concentración de entrada es igual a la usada en la validación del modelo, 25 mol/m³ por lo tanto, como es una solución diluida, las

propiedades se simplificaron como propiedades del agua excepto el coeficiente de difusión (Yuan-Hui & Gregory, 1974).

Tabla 11. Propiedades de la solución a 10 °C, 20 °C y 40 °C

Temperatura (°C)	Densidad (kg/m ³)	Viscosidad (Pa·s)	Difusividad (m ² /s)	Cp (J/kg·K)
10	999.7	1.311×10^{-3}	1.47×10^{-9}	4195.4
20	998.2	1.005×10^{-3}	1.55×10^{-9}	4184.2
40	992.2	0.654×10^{-3}	1.73×10^{-9}	4179.4

En la Figura 14 se observa el comportamiento de la concentración promedio de NaCl y el flujo de permeado en función de la temperatura para la membrana cuyo material es PVDF. A medida que la temperatura del sistema se incrementa de 10 °C a 40 °C, se evidencia una disminución continua de la concentración promedio, pasando de aproximadamente 56 mol/m³ a 52.6 mol/m³. Este descenso indica que, a temperaturas más elevadas, el transporte difusivo de sal hacia el flujo principal es más eficiente, lo cual reduce la intensidad de la polarización de concentración (CP) sobre la superficie de la membrana.

Por otro lado, el flujo de permeado promedio aumenta entre 10 °C y 20 °C, alcanzando su valor máximo a 20 °C, y luego muestra una leve disminución a 40 °C. Este comportamiento se relaciona con la influencia de la temperatura sobre las propiedades del agua: a mayor temperatura, disminuye la viscosidad y aumenta la presión osmótica y la movilidad del agua, lo cual inicialmente favorece el paso de agua a través de la membrana. Sin embargo, la disminución del flujo a 40 °C podría atribuirse a un incremento en la presión osmótica local derivado de la acumulación de sal cerca de la membrana, que reduce la presión neta de operación. Este punto sugiere que, aunque el PVDF favorece la conducción térmica, su comportamiento frente a gradientes térmicos puede generar efectos no lineales en el rendimiento del proceso, especialmente si se intensifica la CP. En conjunto, estos resultados muestran que la temperatura tiene un impacto significativo en el desempeño de las membranas, y que materiales como el PVDF deben ser evaluados térmicamente para identificar condiciones óptimas de operación.

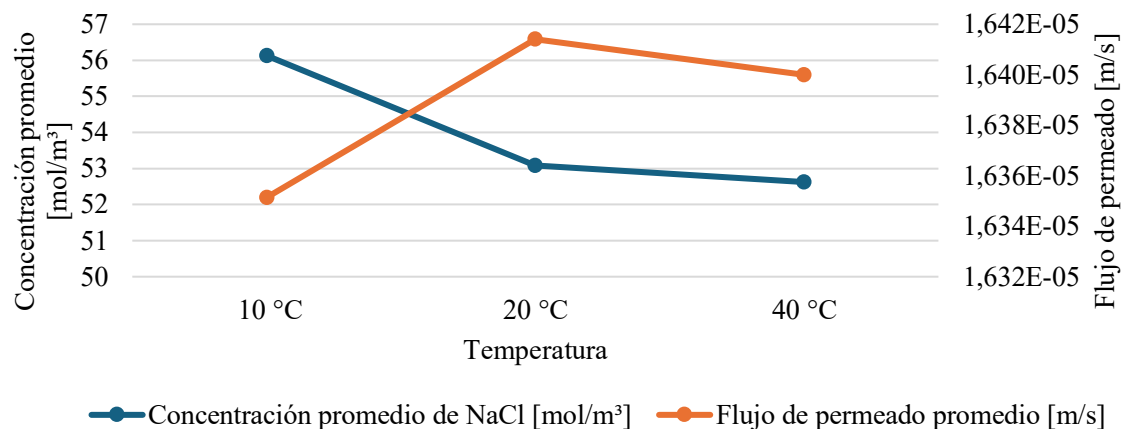


Figura 15. Concentración promedio y flujo de permeado para el material PVDF a 10 °C, 20 °C y 40 °C

El comportamiento térmico de la membrana de poliamida muestra una tendencia distinta a la observada con PVDF, Figura 15. En este caso, al aumentar la temperatura de 10 °C a 40 °C, se evidencia una disminución continua en la concentración promedio de NaCl, lo que sugiere una reducción progresiva en la polarización de concentración (CP). Este efecto está asociado al incremento de la difusividad del soluto con la temperatura, lo que facilita su transporte desde la superficie de la membrana hacia el flujo principal.

A diferencia del PVDF, donde el flujo de permeado mostró un máximo a 20 °C y luego disminuyó, en la poliamida el flujo de permeado aumenta con la temperatura, alcanzando su mayor valor a 40 °C. Esto indica que la poliamida permite un mejor aprovechamiento del efecto térmico, posiblemente debido a su menor resistencia térmica y mayor selectividad, lo que reduce la acumulación de sal en la interfaz. Además, el hecho de que el flujo de permeado crezca mientras la CP disminuye sugiere una mejora en la eficiencia del proceso.

Comparando ambos materiales, se puede concluir que la poliamida muestra un comportamiento más favorable ante el aumento de temperatura, ya que permite un mayor flujo sin incrementar la CP, lo cual es deseable en sistemas de ósmosis inversa. Por el contrario, el PVDF presenta un comportamiento más irregular, con una caída en el flujo a temperaturas altas que podría deberse a su menor capacidad de disipar la acumulación salina o a un efecto térmico no lineal en su estructura porosa.

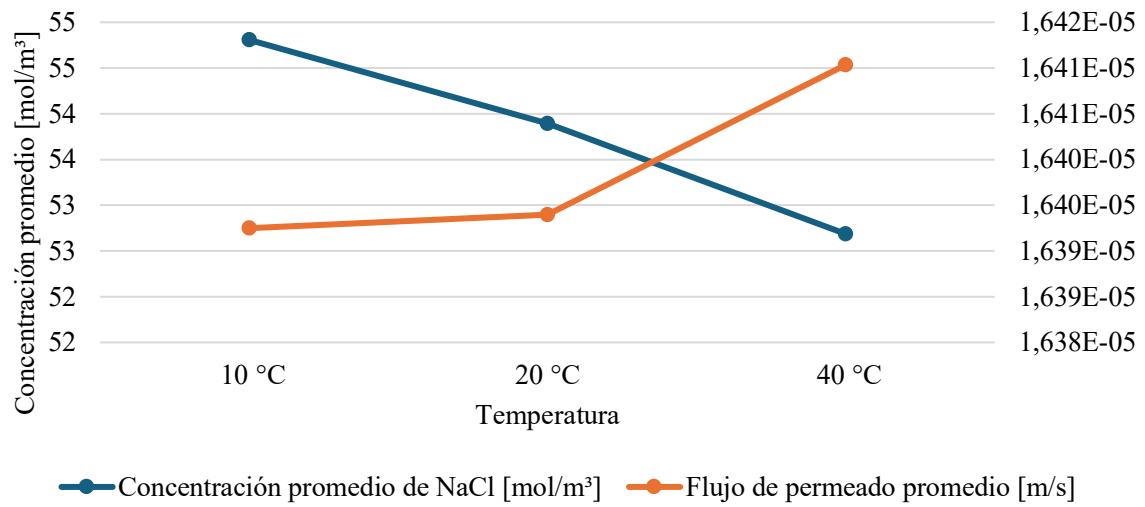


Figura 16. Concentración promedio y flujo de permeado para el material poliamida a 10 °C, 20 °C y 40 °C

7. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se desarrolló un modelo computacional mediante dinámica de fluidos (CFD) para estudiar el comportamiento de la concentración de polarización (CP) en membranas de ósmosis inversa, considerando distintas geometrías patronadas, diferentes tipos de solutos y el efecto térmico de materiales usados comúnmente en estos sistemas. A partir del cumplimiento de los objetivos propuestos, se obtienen las siguientes conclusiones:

1. Se realizó la verificación del modelo integrando las ecuaciones de Navier-Stokes, la conservación de masa y la ecuación de transporte de especies, junto con un modelo de flujo de permeado basado en la ecuación de Van't Hoff para representar la presión osmótica. Este modelo permitió capturar los fenómenos fundamentales del proceso de desalinización por membranas, tales como el desarrollo de la capa límite de concentración, el flujo de permeado y la presión osmótica local.
2. Mediante la implementación del modelo en el software ANSYS Fluent, se lograron simular con éxito la velocidad del flujo, el flujo de permeado y la distribución de concentración para diferentes condiciones. Los resultados mostraron que la geometría influye directamente en los perfiles de concentración y flujo de permeado. La geometría tipo LG triángulo presentó menor espesor de capa límite y mayor coeficiente de transferencia de masa, lo cual está asociado a una mejor redistribución del flujo y reducción de zonas de estancamiento en la interfaz de la membrana. Sin embargo, cabe resaltar que ambas geometrías aumentaron la CP respecto a la geometría plana por lo que una geometría patronada no disminuye este fenómeno sin embargo, sí permite mayor área de transferencia de masa que aumenta el flujo de permeado respecto al área proyectada de la geometría plana.
3. Se identificó que el sulfato de magnesio (MgSO_4), al poseer menor coeficiente de difusión en comparación con el cloruro de sodio (NaCl), generó mayores niveles de CP. Esto se reflejó en concentraciones promedio más elevadas y menores coeficientes de transferencia de masa para ambas geometrías. Sin embargo, también se observó un aumento en el flujo de permeado manteniendo el comportamiento del NaCl en cada geometría.

4. Se logró incorporar información del software GRANTA Selector para importar las propiedades térmicas de poliamida (PA) y fluoruro de polivinilideno (PVDF). La inclusión del efecto de la temperatura en el modelo permitió observar cómo el gradiente térmico influye en el flujo de permeado y la redistribución del soluto. En particular, la poliamida mostró un mejor aprovechamiento del efecto térmico, presentando incrementos sostenidos del flujo de permeado y disminución de la CP con la temperatura, mientras que el PVDF presentó un comportamiento más dependiente del gradiente térmico superficial. Esta evaluación resaltó la importancia de considerar no solo la geometría y el tipo de soluto, sino también el comportamiento térmico del material en aplicaciones reales.

8. RECOMENDACIONES

Para futuros estudios numéricos sobre ósmosis inversa, se recomienda enfáticamente comenzar con una verificación detallada del modelo físico y matemático, asegurando que las ecuaciones seleccionadas representen fielmente los fenómenos relevantes, como el transporte convectivo-difusivo, el rechazo de solutos y la conducción de calor.

Durante la configuración del caso en ANSYS Fluent, se deben revisar cuidadosamente las condiciones de frontera impuestas, las direcciones del flujo de permeado, los espesores de las capas conductoras y los parámetros de materiales, verificando siempre la consistencia de unidades. En simulaciones con geometrías complejas o superficies estructuradas, es indispensable realizar un estudio de sensibilidad de malla y considerar refinamientos locales en las zonas con gradientes fuertes de concentración o temperatura.

Para evaluación de efectos térmicos es común que fenómenos como el gradiente de temperatura no se resuelvan adecuadamente si el sistema no presenta una diferencia térmica; es por esto que no basta con activar la ecuación de energía, sino que debe evaluarse la física del sistema para que se justifique su uso. Se aconseja también validar visualmente los resultados mediante contornos, gráficos XY y cortes de flujo antes de concluir cualquier tendencia física, y evitar depender exclusivamente de los residuales numéricos para determinar la convergencia. Finalmente, la definición del flujo de permeado mediante UDFs debe hacerse con extremo cuidado, ya que representa una de las variables más sensibles del sistema; se recomienda incluir en la formulación factores como la dependencia de la presión osmótica y la temperatura para mejorar la precisión del modelo y la representatividad del fenómeno real.

9. BIBLIOGRAFIA

- Bae, S., Gu, B., & Lee, J. H. (2023). A 3D CFD study on the effects of feed spacer designs on membrane performance for high-permeance RO membranes. *Journal of Water Process Engineering*, 53. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2023.103887>
- Baghdadi, Y. N., Alnouri, S. Y., Matsuura, T., & Tarboush, B. J. A. (2018). Temperature Effects on Concentration Polarization Thickness in Thin-Film Composite Reverse Osmosis Membranes. *Chemical Engineering and Technology*, 41(10), 1905–1912. <https://doi.org/10.1002/ceat.201800184>
- Bai, W., Samineni, L., Chirontoni, P., Krupa, I., Kasak, P., Popelka, A., Saleh, N. B., & Kumar, M. (2023). Quantifying and reducing concentration polarization in reverse osmosis systems. In *Desalination* (Vol. 554). Elsevier B.V. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2023.116480>
- Biesheuvel, P. M., Porada, S., Elimelech, M., & Dykstra, J. E. (2022). Tutorial review of reverse osmosis and electrodialysis. In *Journal of Membrane Science* (Vol. 647). <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2021.120221>
- Chong, Y. K., Fletcher, D. F., & Liang, Y. Y. (2024). CFD simulation of hydrodynamics and concentration polarization in osmotically assisted reverse osmosis membrane systems. *Journal of Water Process Engineering*, 57. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2023.104535>
- Dévora-Isiordia, G. E., Cásares-De la Torre, C. A., Morales-Mendivil, D. P., Montoya-Pizeno, R., Velázquez-Limón, N., Aguilar-Jiménez, J. A., & Ríos-Arriola, J. (2023). Evaluation of Concentration Polarization Due to the Effect of Feed Water Temperature Change on Reverse Osmosis Membranes. *Membranes*, 13(1). <https://doi.org/10.3390/membranes13010003>
- El-Gendi, A. (2022). A critical review of the preparation, characterization and applications of polyamide membranes. *Desalination and Water Treatment*, 255, 120–135. <https://doi.org/10.5004/DWT.2022.28333>
- Ezugbe, E. O., & Rathilal, S. (2020). Membrane technologies in wastewater treatment: A review. In *Membranes* (Vol. 10, Issue 5). MDPI AG. <https://doi.org/10.3390/membranes10050089>
- Fritzmann, C., Löwenberg, J., Wintgens, T., & Melin, T. (2007). State-of-the-art of reverse osmosis desalination. *Desalination*, 216(1–3), 1–76. <https://doi.org/10.1016/J.DESAL.2006.12.009>
- Kavianipour, O., Ingram, G. D., & Vuthaluru, H. B. (2017). Investigation into the effectiveness of feed spacer configurations for reverse osmosis membrane modules

- using Computational Fluid Dynamics. *Journal of Membrane Science*, 526, 156–171. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2016.12.034>
- Kim, E. S., Kim, Y. J., Yu, Q., & Deng, B. (2009). Preparation and characterization of polyamide thin-film composite (TFC) membranes on plasma-modified polyvinylidene fluoride (PVDF). *Journal of Membrane Science*, 344(1–2), 71–81. <https://doi.org/10.1016/J.MEMSCI.2009.07.036>
- Kumar, M., Adham, S. S., & Pearce, W. R. (2006). Investigation of seawater reverse osmosis fouling and its relationship to pretreatment type. *Environmental Science and Technology*, 40(6), 2037–2044. <https://doi.org/10.1021/ES0512428>
- Li, M., Bui, T., & Chao, S. (2016). Three-dimensional CFD analysis of hydrodynamics and concentration polarization in an industrial RO feed channel. *Desalination*, 397. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2016.07.005>
- Mauter, M. S., & Fiske, P. S. (2020). Desalination for a circular water economy. *Energy and Environmental Science*, 13(10), 3180–3184. <https://doi.org/10.1039/D0EE01653E>
- Mitrănescu, A., Deutsch, A., Amin, M., & Drewes, J. E. (2025). Flow characteristics and concentration polarization of surface-patterned reverse osmosis membranes in spacer-filled feed channels: A CFD modeling study. *Journal of Water Process Engineering*, 76. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2025.108229>
- Morgante, C., Lopez, J., Cortina, J. L., & Tamburini, A. (2024). New generation of commercial nanofiltration membranes for seawater/brine mining: Experimental evaluation and modelling of membrane selectivity for major and trace elements. *Separation and Purification Technology*, 340. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2024.126758>
- Najid, N., Hakizimana, J. N., Kouzbou, S., Gourich, B., Ruiz-García, A., Vial, C., Stiriba, Y., & Semiat, R. (2022). Fouling control and modeling in reverse osmosis for seawater desalination: A review. *Computers and Chemical Engineering*, 162. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2022.107794>
- Nurjanah, I., Chang, T. T., You, S. J., Huang, C. Y., & Sean, W. Y. (2024). Reverse osmosis integrated with renewable energy as sustainable technology: A review. *Desalination*, 581, 117590. <https://doi.org/10.1016/J.DESAL.2024.117590>
- Sola, I., Sáez, C. A., & Sánchez-Lizaso, J. L. (2021). Evaluating environmental and socio-economic requirements for improving desalination development. *Journal of Cleaner Production*, 324. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.129296>

- Yaseen Khalaf Biomedical Engineering Dept, T. (2008). Effect of feed temperature on concentration polarization and efficiency of reverse osmosis systems. In *NUCEJ Spatial ISSUE* (Vol. 11, Issue 1).
- Yuan-Hui, L., & Gregory, S. (1974). Diffusion of ions in sea water and in deep-sea sediments. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 38(5), 703–714. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(74\)90145-8](https://doi.org/10.1016/0016-7037(74)90145-8)
- Zhou, Z., Ling, B., Battiato, I., Husson, S. M., & Ladner, D. A. (2021). Concentration polarization over reverse osmosis membranes with engineered surface features. *Journal of Membrane Science*, 617. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2020.118199>