

## 7

### Conclusões e Recomendações

Neste trabalho desenvolvemos um modelo eletro-químico-mecânico para o estudo do fenômeno de inchamento em trocadores iônicos poliméricos na presença de uma solução aquosa sujeita a mudanças de pH e concentração de NaCl. Para isto, derivamos as equações macroscópicas a partir do processo de homogeneização em duas escalas aplicado no modelo constitutivo microscópico. Na derivação do modelo de inchamento, as forças associadas aos fenômenos eletroquímicos foram acopladas com as forças elásticas do material polimérico através do balanço mecânico.

Parâmetros empíricos físico-químicos e estruturais do material, foram obtidos através de ensaios experimentais, softwares comerciais, e referências bibliográficas, com o intuito de caracterizar o polímero e determinar valores empíricos de inchamento que serviram como dados de entrada do modelo. No contexto da modelagem computacional foram realizadas simulações numéricas objetivando a compreensão do fenômeno de inchamento, bem como o estudo da sensibilidade do modelo, em função dos parâmetros fortemente determinantes dos fenômenos eletro-químico-mecânicos que acontecem na escala microscópica.

Os resultados numéricos de inchamento em função do pH mostram tendências similares aos valores empíricos obtidos. As simulações computacionais mostraram a presença de dois regimes de inchamento fortemente dependente do processo de troca iônica: no primeiro regime, em pH ácidos, evidenciamos os maiores inchamentos relativos, dominado pela densidade de carga superficial que incorporamos no modelo como termo de fonte no problema de Poisson-Boltzmann, e o segundo regime a pH básicos dominado pela força iônica fazendo com que o inchamento permaneça praticamente constante.

Como recomendações para trabalhos futuros sugerimos a derivação do modelo em três escalas considerando dupla porosidade e efeitos de tortuosidade, assim como a pesquisa e implementação de técnicas experimentais que permitam a obtenção direta de valores empíricos de densidade de carga elétrica superficial que permitam um melhor ajuste de parâmetros empíricos de difícil obtenção experimental.

Concluimos observando que a modelagem aqui apresentada é um caso simplificado quanto às condições experimentais previstas para a aplicação deste tipo de materiais na monitoração permanente do pH em poços esgotados.

Visando estudar o inchamento deste tipo de materiais para essa aplicação, identificamos a necessidade de criar uma família de modelos reformulados que incorporem gradativamente condições experimentais mais realistas, como reações de troca iônica com íons polivalentes, interações sólido-fluido entre o óleo cru e a superfície do material bem como possíveis incrustações de partículas sólidas microscópicas no meio poroso polimérico.