

**FELIPPE GONZAGA MIORIM**

**APLICAÇÃO DE MODELO QUASE - 1D DE SEPARAÇÃO DE GASES  
POR MEMBRANA**

**Trabalho de Conclusão de Curso  
apresentado à Escola Politécnica da  
Universidade de São Paulo como  
requisito parcial para a obtenção do  
diploma de Engenharia de Petróleo.**

**SANTOS**

**2021**

**FELIPPE GONZAGA MIORIM**

**APLICAÇÃO DE MODELO QUASE- 1D DE SEPARAÇÃO DE GASES  
POR MEMBRANA**

**Trabalho de Conclusão de Curso  
apresentado à Escola Politécnica da  
Universidade de São Paulo para obtenção  
do diploma de Engenharia de Petróleo.**

**Área de concentração: Fenômenos de  
Transporte**

**Orientador: Prof. Dr. Rafael dos Santos  
Gioria**

**SANTOS**

**2021**

## FICHA CATALOGRÁFICA

Miorim, Felipe Gonzaga  
APLICAÇÃO DE MODELO QUASE - 1D DE SEPARAÇÃO DE GASES POR  
MEMBRANA / F. G. Miorim, R. S. Goria -- São Paulo, 2021.  
31 p.

Trabalho de Formatura - Escola Politécnica da Universidade de São  
Paulo. Departamento de Engenharia de Minas e de Petróleo.

1.Membranas 2.Separação de gases I.Universidade de São Paulo. Escola  
Politécnica. Departamento de Engenharia de Minas e de Petróleo II.t. III.Goria,  
Rafael dos Santos

## **AGRADECIMENTOS**

"Se eu vi mais longe, foi por estar sobre ombros de gigantes." *Isaac Newton.*

Gostaria de agradecer aos meus gigantes.

A meus pais Vera e Paulo que sempre me motivaram e me educaram a persistir sempre.

A Thais minha companheira de vida que está junto comigo nos melhores e nos piores momentos

E ao meu orientador e mestre Jedi Rafael Goria que nunca desistiu de mim e fez possível tanto a conclusão deste trabalho quanto do curso de Engenharia de Petróleo.

## RESUMO

O trabalho detalha a concepção e análise da consistência de um modelo matemático quase 1D de separação de gás carbônico e metano por membrana. Ele é pautado no modelo de THUNDYIL; KOROS, 1997 mas com algumas adaptações para moderniza-lo com o emprego de equações recentemente propostas pela literatura.

As principais adaptações são a inclusão do sistema de perda de carga criado em SOROODAN MIANDOAB; KENTISH; SCHOLES, 2020 para separações de misturas de gases contendo CO<sub>2</sub> em membranas e a utilização do pacote coolprop uma biblioteca do programa python que contem uma ampla gama de gases para as especificidades de cada um dos gases presentes na mistura de interesse na separação.

O modelo é validado ao apresentarmos as vazões de cada um dos componentes e do total ao longo do tubo e então adicionarmos a métricas que apoiam os valores obtidos pelas vazões, sendo essas métricas o *stage cut* (Vazão do permeado/Vazão do todo), perdas de CH<sub>4</sub> e presença de CO<sub>2</sub> ao fim do tubo. Ao final é checada a variação das pressões parciais com o objetivo de fazer uma última verificação no perfil das vazões ao longo do tubo.

A principal contribuição do trabalho é o modelo em si que é altamente adaptável para problemas reais e pode ser utilizado tanto pela indústria quanto pela academia.

**Palavras-chave:** Membranas, Separação de gases, fenômenos de transporte.



## ABSTRACT

The work details the design and consistency analysis of an almost 1D model of separation of carbon dioxide and methane by membrane. It is based on the model of (THUNDYIL; KOROS, 1997) but with some adaptations to make it more modern.

The main adaptations are the inclusion of the pressure drop system created in (SOROODAN MIANDOAB; KENTISH; SCHOLES, 2020) for separations of gas mixtures containing CO<sub>2</sub> in membranes. The use of the coolprop package that uses a library of gases for the specificities of each of the gases present in the mixture of interest in the separation.

The model is validated by presenting the flows of each of the components and the total along the tube and then adding the metrics that support the values obtained by the flows, these metrics being the stage cut (Permeate flow / Total flow), losses of CH<sub>4</sub> and presence of CO<sub>2</sub> at the end of the tube. At the end, the variation of partial pressures is checked in order to make a final check on the flow profile along the tube.

The legacy of work is the model itself that is highly adaptable to real-world problems and can be used by industry and academia.

**Keywords:** Membrane, Gas separation, Coolprop.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Padrões de fluxo para cada um dos escoamentos (a) Fluxo concorrente radial (b) Fluxo contracorrente (c) Fluxo co-corrente. Fonte: (THUNDYIL; KOROS, 1997) .....	13
Figura 2 - Elementos de transferência de massa em cada um dos modelos. (a) Fluxo cruzado radial (b) Fluxo contra corrente (c) Fluxo co-corrente. Fonte: (THUNDYIL; KOROS, 1997) .....	14
Figura 3 - Fluxo no interstício da membrana em cada um dos modelos (a) Fluxo cruzado radial (b) Fluxo contracorrente (c) Fluxo concorrente. Fonte: (RAUTENBACH, 1990)Raundenbach (1990) .....	15
Figura 4 - A Configuração geral do fluxo em um sistema de fluxo cruzado radial. (THUNDYIL; KOROS, 1997) .....	16
Figura 5 - Pressão ao longo do tubo (THUNDYIL; KOROS, 1997) .....	23
Figura 6 - Pressão ao longo do tubo modelo do modelo criado .....	24
Figura 7 - Vazão do permeado ao longo do tubo do total e de cada um dos componentes para a fração molar de CO <sub>2</sub> 10% .....	25
Figura 8 - Vazão do permeado ao longo do tubo do total e de cada um dos componentes para a fração molar de CO <sub>2</sub> 60% .....	26
Figura 9 - Eixo y Stage cut e Eixo x Área da membrana. Com a fração molar de CO <sub>2</sub> na alimentação de 60%.....	27
Figura 10 - Eixo y Stage cut e Eixo x Área da membrana. Com a fração molar de CO <sub>2</sub> na alimentação de 10% .....	27
Figura 11 - Eixo y perdas de CH <sub>4</sub> ; Eixo x Área da membrana. Com a fração molar de CO <sub>2</sub> em 60% .....	28
Figura 12 - Eixo y perdas de CH <sub>4</sub> ; Eixo x Área da membrana. Com a fração molar de CO <sub>2</sub> em 10% .....	28

Figura 13 - Eixo y resíduo de CO <sub>2</sub> na saída do tubo eixo x área da membrana. Com a fração molar de CO <sub>2</sub> em 60%	29
Figura 14 - Eixo y resíduo de CO <sub>2</sub> na saída do tubo eixo x área da membrana. Com fração molar de CO <sub>2</sub> em 10%	29
Figura 15 - <i>Driving force</i> ao longo do tubo para a configuração com fração molar em 60% de CO <sub>2</sub>	30
Figura 16 - <i>Driving force</i> ao longo do tubo para a configuração com fração molar em 10% de CO <sub>2</sub>	31

## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>9</b>
<b>1.1 Objetivo .....</b>	<b>10</b>
<b>1.2 Justificativa .....</b>	<b>11</b>
<b>1.3 Organização do trabalho .....</b>	<b>Erro! Indicador não definido.</b>
<b>2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....</b>	<b>12</b>
<b>2.1 Artigos avaliados na revisão bibliográfica. ....</b>	<b>12</b>
<b>2.2 Análise dos possíveis modelos na literatura.....</b>	<b>13</b>
<b>2.3 Analise da modelagem em CFD .....</b>	<b>Erro! Indicador não definido.</b>
<b>3 METODOLOGIA.....</b>	<b>18</b>
<b>3.1 Descrição do modelo .....</b>	<b>18</b>
<b>3.2 Detalhes da construção do modelo.....</b>	<b>20</b>
3.2.1 Utilização do pacote coolprop.....	20
3.2.2 Perda de carga utilizando o modelo de E.S. Miandoab .....	21
<b>3.3 Comparação do modelo criado com o modelo de Thundiyil .....</b>	<b>23</b>
3.3.1 Pressão ao longo do tubo.....	23
<b>3.4 Vazão do permeado ao longo do tubo .....</b>	<b>24</b>
3.4.1 Visão geral.....	24
3.4.2 <i>Stage cut</i> , perdas de metano e dióxido de carbono presente no resíduo para diversas áreas de membrana.....	26
3.4.3 <i>Driving force</i> de cada um dos componentes da mistura ao longo do tubo.	
30	
<b>4 CONCLUSÃO.....</b>	<b>32</b>
<b>4.1 Contribuições do trabalho.....</b>	<b>32</b>
<b>4.2 Trabalhos futuros.....</b>	<b>32</b>
<b>REFERÊNCIAS.....</b>	<b>33</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Na produção de óleo dos campos pré-sal, metano e CO<sub>2</sub> são presentes em quantidades consideráveis e precisam ser gerenciados. O metano tem valor econômico dependendo de um grau de pureza específico. Após o processo é necessário dar um fim ecologicamente correto ao CO<sub>2</sub> no reservatório uma alternativa é reinjetá-lo no próprio reservatório de onde foi extraído.(SILVA FILHO, 2016).

O processo tradicional de separação em bateladas é inviável no ambiente mais comum de exploração e produção de petróleo brasileiro que são as plataformas. A produção em bateladas demanda muito espaço, não seria feita em tempo hábil para ser realmente útil no processo e não é um processo de fluxo contínuo. Uma maneira de fazer com que esse processo seja contínuo é executar a separação por membranas através do fenômeno de *sieving*. Faz-se então presente o desafio de modelar este processo em diversos níveis de complexidade que motiva este trabalho, em que se aborda uma modelagem do escoamento quase 1D com troca de massa através da membrana modelada com o escoamento dos gases.

A separação de gases por membranas torna-se uma importante operação unitária em diversas situações industriais. Essa prática tem funções e consequências no processo de produção como um todo e baseado com quanto de pureza de CO<sub>2</sub> a separação com membranas está a acontecendo na plataforma: mais CO<sub>2</sub> muda as iterações da fase água/óleo (pode mudar também as relações entre óleo e água) com a fase gasosa do escoamento da produção. O CO<sub>2</sub> reinjetado no reservatório também pode gerar uma melhora do fator de recuperação no reservatório, como estudado por Silva Filho (2016). Essa maior quantidade de CO<sub>2</sub> na fase gasosa que acontece como consequência da reinjeção também tem influência posterior na separação dos fluidos produzidos usando membranas em fluxo contínuo que possivelmente estaria instalada na plataforma. A viabilidade econômica deste processo também é importante uma vez que há estudos com membranas de carbono que produzem bons resultados (HAMM, 2018) e futuramente podem ser utilizadas amplamente no processo, no entanto são inviáveis economicamente no presente.

Segundo THUNDYIL; KOROS, 1997, comercialmente, separadores de gás permeados são operados de 3 maneiras: Fluxo contracorrente da alimentação e permeabilidade (alimentação na extremidade ou lateral do tubo); Fluxo concorrente da alimentação e permeabilidade (alimentação na extremidade ou lateral do tubo); e fluxo cruzado radial (alimentação na extremidade do tubo). Seguindo a maneira como THUNDYIL; KOROS, 1997 desenvolveram seus modelos, qualquer modelo matemático estudando o fenômeno deve conter as relações que governam o transporte pela membrana, as equações do balanço de massa, as relações de queda de pressão (ou hipóteses a ela aplicadas), tanto para o sentido da alimentação quanto para o da permeabilidade.

Neste trabalho serão consideradas membranas de cerâmicas e materiais poliméricos. Como diversas condições de operação são esperadas na produção de óleo e gás, a modelagem é a ferramenta adequada de abordagem para que se entenda o comportamento da membrana com diferentes proporções de metano e dióxido de carbono. Uma modelagem feita *in-house* permite essa versatilidade e pode ser utilizada em futuros estudos sobre as condições da injeção de CO<sub>2</sub> em poços. Como a separação depende da composição, das pressões e da temperatura, normalmente essas transformações são estudadas na literatura alterando-se as condições de contorno do modelo. Por este motivo é adequado o desenvolvimento de um modelo computacional.

## 1.1 Objetivo

O principal objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo computacional quase 1-D de separação de gases por membrana implementado *in house* em código aberto e que seja de fácil acesso para uso futuro da universidade em trabalhos sequentes. Devido a praticidade intencionada na implementação do modelo, este poderá servir de base para análise e otimização do processos de separação.

O objetivo secundário consiste em validar um modelo de separação de gases por membrana simplificado que represente o fenômeno e seja referência para modelos mais complexos. O modelo será desenvolvido na linguagem de programação python.

## 1.2 Justificativa

As justificativas para a realização do modelo são a necessidade de separar os gases, o fato de que se é necessário verificar como a separação funciona em diversas condições de operação e a impossibilidade de se analisar a separação experimentalmente.

Utilizando o modelo atestado como o melhor por (THUNDYIL; KOROS, 1997) realizaremos um modelo em python e então confirmaremos os resultados do modelo realizado reproduzindo os resultados do trabalho.

Então diferentes concentrações e pressões de CO<sub>2</sub> serão testadas. Após estes testes realizaremos sua comparação com os modelos concorrente e contracorrente que são os com os melhores resultados em (THUNDYIL; KOROS, 1997).

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Há muitas análises na literatura de separações em membrana para a produção de amônia na indústria química com LAVEZO; RAVAGNANI, 2006 elas também serão analisadas e seus aprendizados incorporados no modelo desenvolvido aqui.

### 2.1 Artigos científicos avaliados na revisão bibliográfica.

A modelagem que busca-se realizar neste trabalho tem boas referências na literatura como (CORONEO et al., 2009) onde é utilizado o CFD (computational fluid dynamics) e é notável a evolução das possibilidades a disposição para a simulação, em seu estudo (CORONEO et al., 2009) atinge menos de 6% de erro ao comparar com resultados experimentais. Ele utiliza em seu estudo principalmente H<sub>2</sub> e N<sub>2</sub>, que são moléculas bem diferentes das de interesse em nosso estudo, no entanto pode nos dar uma referência interessante tanto em métodos utilizáveis para a simulação devido a maior proximidade da tecnologia ao presente que (THUNDYIL; KOROS, 1997), e como ele lida com as constantes necessárias para ajuste do modelo. Há várias indicações interessantes de como chegar a constantes mais próximas à realidade e essas serão levadas em conta nos métodos de simulação apresentados neste trabalho.

Foi analisado também o segmento em (SOROODAN MIANDOAB; KENTISH; SCHOLE, 2020) que modela a perda de carga de CO<sub>2</sub> ao longo de uma membrana de fibras oca permeável, com o objetivo de adicionar ao modelo previamente citado de separação de CO<sub>2</sub> um modelo mais atualizado e com uma abordagem que o diferencie do primeiro modelo.

Outro suporte importante para o trabalho foi a validação acadêmica do pacote coolprop presente em (BELL et al., 2014), que chancela o pacote no meio acadêmico e da solidez para sua utilização neste trabalho.

## 2.2 Análise dos possíveis modelos na literatura.

Três possíveis modelagens matemáticas apresentadas em cc foram analisadas, e reproduzidas na Figura 1.

- Fluxo cruzado radial
- Fluxo co-corrente
- Fluxo contracorrente

O artigo faz uma análise dos três modelos e suas características de maneira a aprofundar o entendimento dos três arranjos e dos seus padrões de fluxo: analisam como é o padrão dos elementos de transferência de massa e o fluxo no interstício da membrana oca.

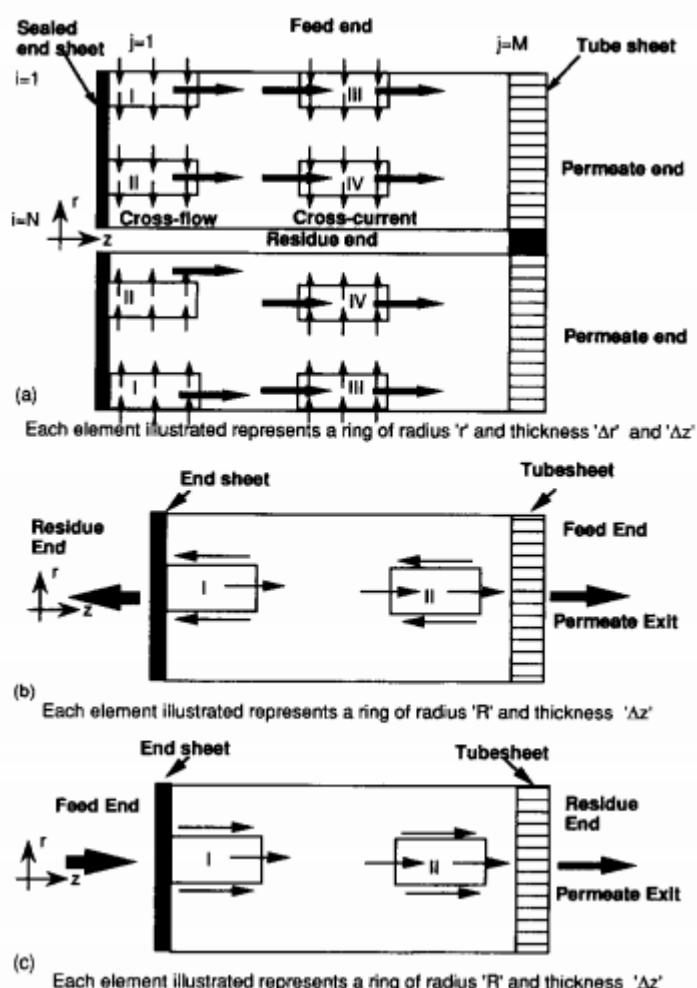


Figura 1 - Padrões de fluxo para cada um dos escoamentos (a) Fluxo concorrente radial (b) Fluxo contracorrente (c) Fluxo co-corrente. Fonte: (THUNDYIL; KOROS, 1997)

A modelagem do problema discreto (numérico) é apresentada detalhadamente em (THUNDYIL; KOROS, 1997). A montagem do sistema discreto segue particionando as fibras tubulares em pequenos trechos, (Figura 2), e combinando-os através das equações de balanço. Esta forma apresentada por esses autores é a escolhida para ser desenvolvida neste trabalho de conclusão de curso e será detalhada na seção de metodologia.

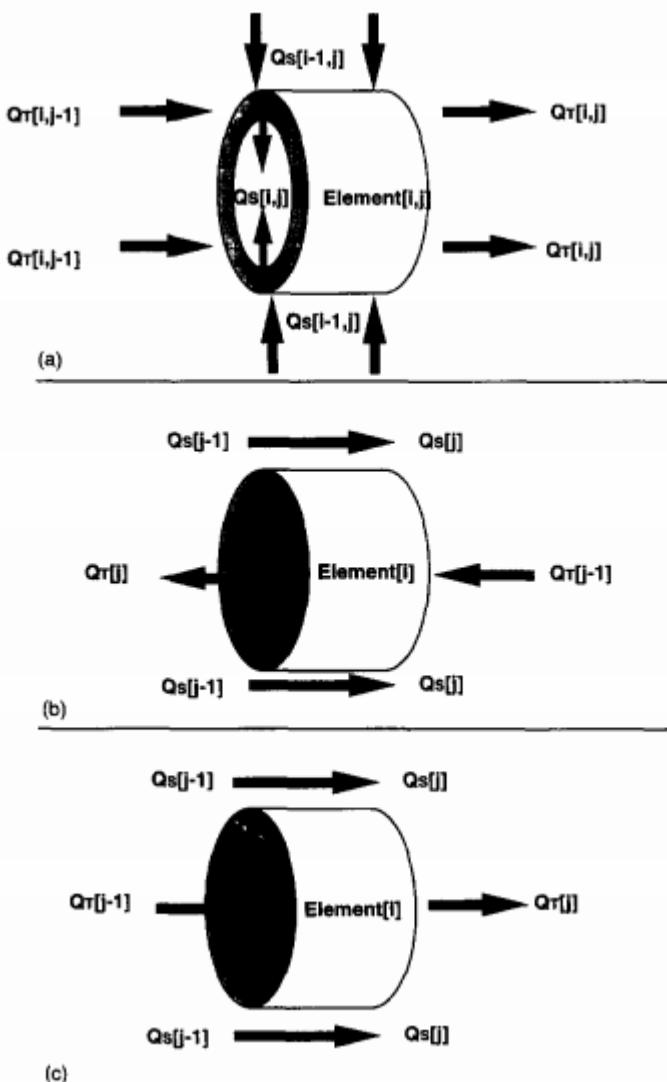


Figura 2 - Elementos de transferência de massa em cada um dos modelos. (a) Fluxo cruzado radial (b) Fluxo contra corrente (c) Fluxo co-corrente. Fonte: (THUNDYIL; KOROS, 1997)

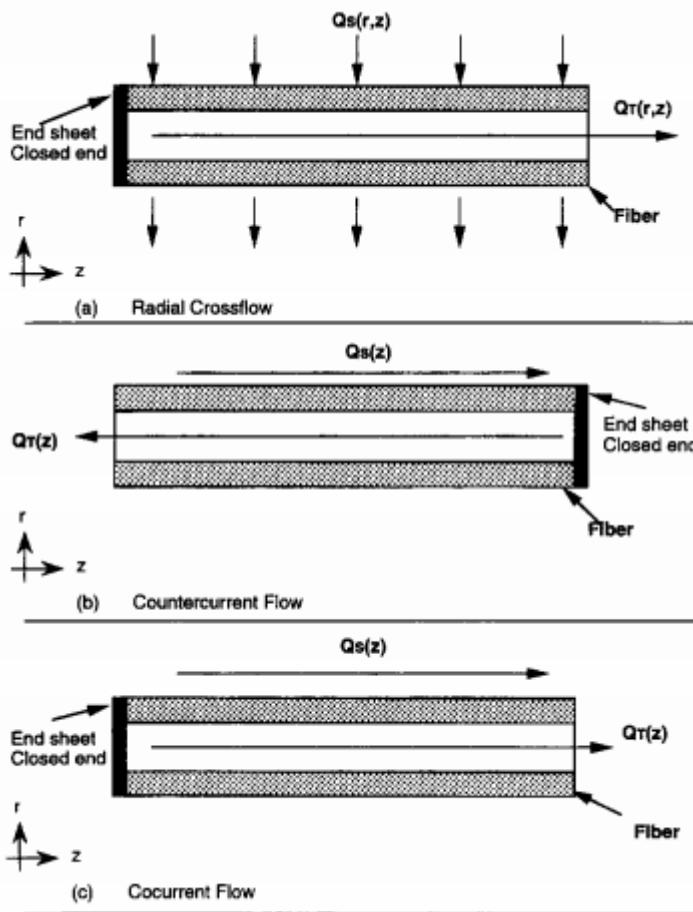


Figura 3 - Fluxo no interstício da membrana em cada um dos modelos (a) Fluxo cruzado radial (b) Fluxo contracorrente (c) Fluxo concorrente. Fonte: (RAUTENBACH, 1990) Rauntenbach (1990)

A análise foi feita utilizando o modelo de sucessão de estados considerando o modelo de fibras ocas em RAUTENBACH, 1990 Que considerou as seguintes hipótese :

- Uma simplificação para o conjunto de fibras ocas representando-as por uma métrica considerando tamanho das fibras, L; tamanho do pacote de fibras, ; R; diâmetro, D<sub>b</sub>; diâmetro interno, D<sub>i</sub>; diâmetro interno.
- Comprimento da grade da beira do tubo; l<sub>s</sub>
- Diâmetros externo e interno das fibras d<sub>o</sub> e d<sub>i</sub>
- A medida do empacotamento no conjunto de fibras representado pela equação seguinte:

$$N_f = (1 - \epsilon) / (\pi/4) d_o^2 \quad (1)$$

$$(A/V) = (1 - \epsilon) 4/d_o \quad (2)$$

O estudo então segue por analisar a separação de  $\text{CO}_2$  e  $\text{CH}_4$  concluindo que o melhor modelo para esta separação é o de fluxo cruzado radial seguido de maneira próxima pelo modelo de fluxo contra corrente. Os arranjos analisados estão apresentados esquematicamente na Figura 3.

Será utilizada para modelagem no trabalho esses resultado utilizando o fluxo co-corrente e analisando quais situação existe a possibilidade do fluxo contra-corrente, pois como citado em (THUNDYIL; KOROS, 1997) o fluxo cruzado radial é melhor em situações com o escoamento ideal.

O modelo é descrito pelo artigo da seguinte forma. Começando com uma esquemática dele com a Figura 4 a seguir.

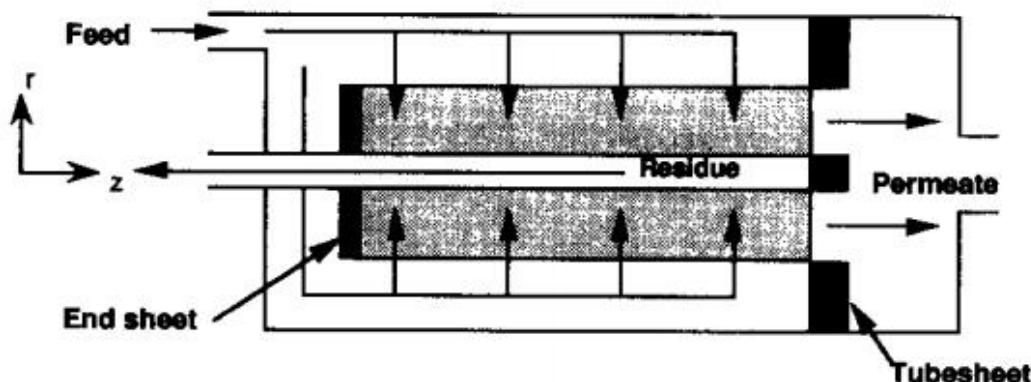


Figura 4 - A Configuração geral do fluxo em um sistema de fluxo cruzado radial. (THUNDYIL; KOROS, 1997)

O gás flui radialmente para dentro do sistema perpendicularmente pelas fibras diretamente para o coletor de resíduos no centro. O permeado nas fibras flui axialmente junto ao coletor de resíduos. Muitas condições variam dentro do permeado. Como por exemplo, o fato de que na realidade há uma queda de pressão dentro das fibras, a permeabilidade da membrana e dos vários componentes é uma função da composição pressão, temperatura e das diferenças de temperatura entre os pacotes da membrana que podem existir. No entanto esses fatores são constantes o suficiente para que ignoremos a sua variação quando modelando (THUNDYIL; KOROS, 1997). Levando em consideração esses fatores o esquema demonstrado podemos considerar esse modelo bidimensional, em que o fluxo corre radialmente da alimentação para o permeado, podendo assim ser aproximado para

quase 1D facilitando a modelagem e permitindo mais variações das condições de entrada.

### 3 METODOLOGIA

#### 3.1 Descrição do modelo.

Seguindo as seguintes hipóteses :

- (a) A pressão radialmente e axialmente no lado do casco do módulo de membranas ;
- (b) A variação de pressão no tubo pode ser calculada pela equação de Hagen-Poiseuille(  $Q = \frac{\Delta P \pi R^4}{8Ln}$ );. (PAN; HABGOOD, 1978) ;
- (c) não variação da concentração axial para o gás pressurizado na alimentação;
- (d) concentração, pressão e temperatura independente dos coeficientes de permeabilidade;
- (e) a permeabilidade dos componentes puros é a mesma da mistura de gases;
- (f) a permeação é isotérmica.

Como demonstrado na Figura 1, há quatro elementos em que a computação da transferência de massa é diferente. Suas posições devem ser levadas em consideração e computadas da seguinte forma: Axialmente o tipo III é uma sucessão dos estados do tipo I até o final do pacote até o fim do tubo até que retorna axialmente até o tipo II para então uma sucessão no tipo IV. A força que realiza a permeação é considerada constante em todos os estados e sucessivas etapas radiais são consideradas para o tubo coletor de resíduo.

A área específica dos pacotes é determinada pelas seguintes equações baseadas na densidade de empacotamento,  $\epsilon$ , o diâmetro interno,  $d_i$ , e o diâmetro externo das fibras da membrana,  $d_o$ , das fibras da membrana. Utilizando as seguintes equações:

$$S(r) = \frac{4(1 - \epsilon)}{d_o} \quad (3)$$

$$\text{Area} = 2\pi r(\Delta r)(\Delta z)(1 - \epsilon)/d_o \quad (4)$$

Para um sistema binário da composição do permeante sendo,  $y_{1,(}$  fração do componente com maior velocidade) e  $x_1$ (do componente com maior velocidade) a fração molar do lado fechado do tubo. Em várias posições radiais do tubo podemos considerar:

$$y_1 = \left\{ (\alpha - 1)(\beta x_1 + 1) + \beta \right. \\ \left. - \left[ ((\alpha - 1)(\beta x_1 + 1) + \beta)^2 \right. \right. \\ \left. \left. - 4\alpha\beta x_1(\alpha - 1) \right]^{1/2} \right\} / 2(\alpha - 1) \quad (5)$$

Onde  $\beta$  é a razão de pressão entre o lado de alta pressão e o lado de baixa pressão.

A taxa de fluxo no lado permeável é dada pela equação 6:

$$\Delta Q = [(P_1/\delta)(p_h x_1(i-1,1) - p_L y_1(i,1)) \\ + (P_2/\delta)(p_h x_2(i-1,1) \\ - p_L y_2(i,1))] \text{Area} \quad (6)$$

$$Q_s(i,1) = Q_s(i-1,1) - \Delta Q \quad (7)$$

$$Q_T(i,1) = \Delta Q \quad (8)$$

$$x_1(i,1) = [Q_s(i-1,1)x_1(i-1,0) \\ - Q_T(i,1)y_1(i,1)] / Q_s(i,1) \quad (9)$$

Com essas equações podemos considerar que as condições antes da permeação nos tipos II e IV as condições de entrada são conhecidas. Então os transportes da membrana é dado por  $\Delta Q$  da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\Delta Q = & [(P_1/\delta)(p_h x_i(i-1,j) - p_L y_i(i,j)) \\ & + (P_2/\delta)(p_h x_2(i-1,j) \\ & - p_L y_2(i,j))] \text{Area} \quad (10)\end{aligned}$$

$$\Delta Q_1 = (P_1/\delta)(p_h x_1(i-1,j) - p_L y_1(i,j)) \text{Area} \quad (11)$$

$$Q_S(i,j) = Q_S(i-1,j) - \Delta Q \quad (12)$$

$$Q_T(i,j) = Q_T(i,j-1) + \Delta Q \quad (13)$$

$$\begin{aligned}x_1(i,j) = & [Q_S(i-1,j) x_1(i-1,j) - \Delta Q_1] \\ & / Q_S(i,j) \quad (14)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}y_1(i,j) = & [Q_T(i,j-1) y_1(i-1,j) + \Delta Q_1] \\ & / Q_T(i,j) \quad (15)\end{aligned}$$

Para elementos em contato com a alimentação os termos com os sufixos ( $i-1,j$ ) são substituídos pela razão das condições de alimentação ( $Q_{s\text{ alimentação}}/M$ , e  $x_{\text{alimentação}}$ ). A computação segue até o fim do tubo.

### 3.2 Detalhes da construção do modelo

#### 3.2.1 Utilização do pacote coolprop.

As propriedades dos fluidos e códigos para suas modelagens específicas foram realizados utilizando o pacote coolprop. As propriedades do modelo são feitas utilizando o método *Helmholtz-energy-explicit-type* BELL et al., 2014, sendo esse o método mais preciso possível de se estimar as propriedades termodinâmicas de um fluido. O pacote é academicamente testado e apesar de não conter todas as misturas dos fluidos nele, ele contém as propriedades da mistura de interesse para este trabalho e, portanto, sua utilização é justificada e por ser um pacote já utilizado na academia é mais confiável e preciso que uma solução que pudesse ser criada na elaboração desta publicação.

A utilização do pacote adiciona ao modelo uma abordagem mais moderna para a definição das propriedades termodinâmicas dos fluidos e é uma das diferenças quando ao modelo original de (THUNDYIL; KOROS, 1997) que pode apresentar diferença nos resultados de ensaios similares.

Estas diferenças são uma justificativa de realização do trabalho e mostram além da necessidade de criação de um modelo para estudo do departamento a necessidade de atualização do modelo de Thundyil.

### 3.2.2 Perda de carga utilizando o modelo de E.S. Miandoab

Uma das maiores diferenças do modelo previamente realizado por (THUNDYIL; KOROS, 1997) é a aproximação quanto a perda de carga. Enquanto Thundyil utiliza o método de sucessão de estados, assim calculando a pressão para cada um dos elementos utilizando a versão diferencial da equação de *Hagen-Poiseuille* como a seguir:

$$\frac{d(p_T^2)}{dz} = \frac{25.6RT\eta}{\pi d_i^4} \left( \frac{Q_T}{n_f} \right)$$

O modelo de (SOROODAN MIANDOAB; KENTISH; SCHOLES, 2020) é um modelo de estado único, então ele considera a perda de carga utilizando a variação de pressão de entrada e de saída do modelo com as seguintes equações:

$$\Delta P_R = \frac{128\mu_R}{\pi\rho_{t,R}d_{hyd}^2(d_m^2 - N_f d_o^2)} F_R^{out} \frac{l}{N}$$

$$\Delta P_P = \frac{128\mu_P}{\pi\rho_{t,P}d_i^4 N_f} F_P^{out} \frac{l}{N}$$

Sendo  $\Delta P_R$  no lado da alimentação e  $\Delta P_P$  no lado do permeado.

A utilização do modelo de (SOROODAN MIANDOAB; KENTISH; SCHOLES, 2020) é interessante pois vem da modelagem de CO<sub>2</sub> e é coberta em vários níveis no trabalho acadêmico mesmo que seja de uma mistura com diferentes componentes, isso ressalta novamente a utilização do pacote coolprop que faz com que seja possível aplicar essas equações ao modelo criado.

Outro aspecto que favorece a utilização dessa abordagem é que pode-se conhecer as pressões ao longo do tubo dos gases individuais com o modelo criado algo que não era feito na abordagem de (THUNDYIL; KOROS, 1997) e agora com o modelo desenvolvido pode ser analisado.

## 4 RESULTADOS

### 4.1 Comparação do modelo criado com o modelo de Thundyil

#### 4.1.1 Pressão ao longo do tubo

Comparando a pressão ao decorrer do tubo nos dois modelos obtém-se os seguintes gráficos de pressão por comprimento do tubo:

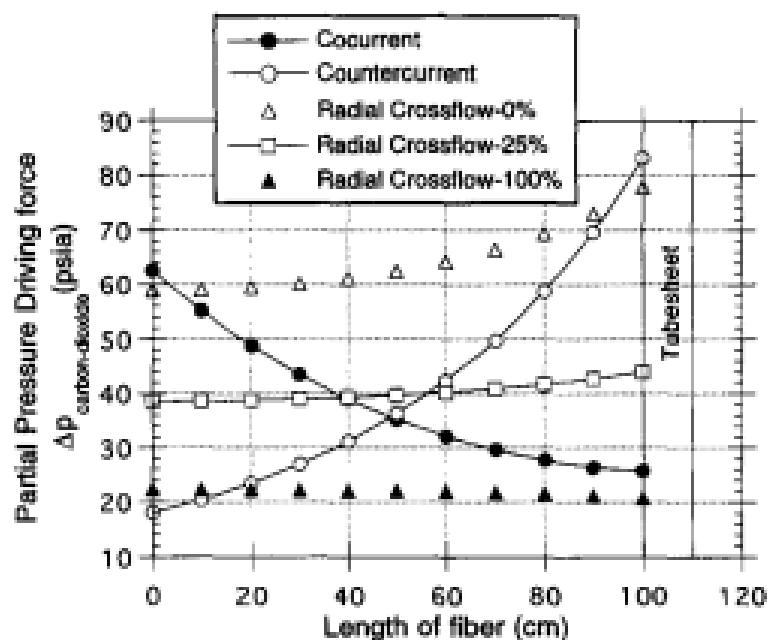


Figura 5 - Pressão ao longo do tubo (THUNDYIL; KOROS, 1997)

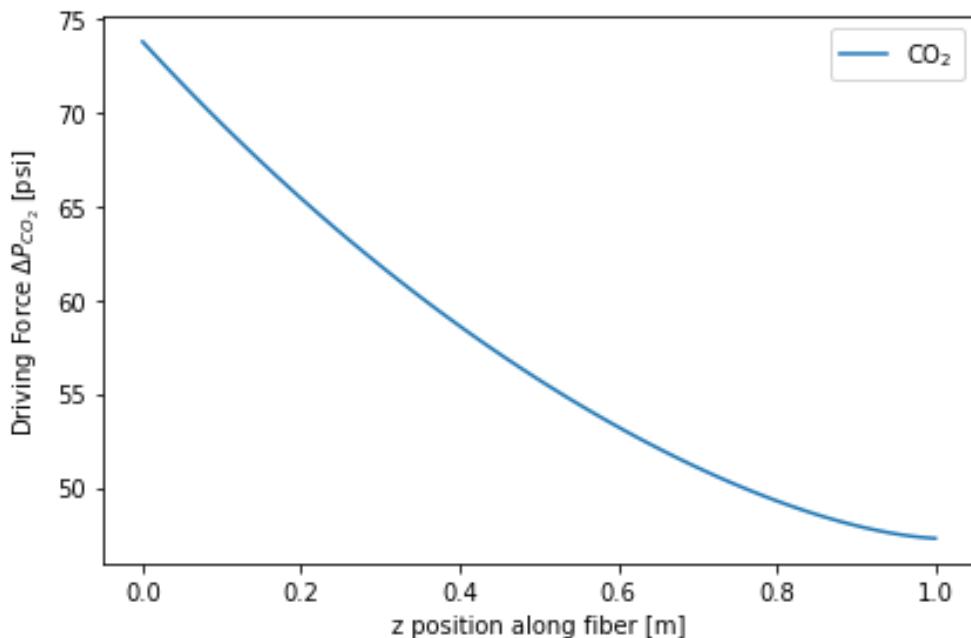


Figura 6 - Pressão ao longo do tubo modelo do modelo criado

As diferenças são justificadas pela maneira previamente apresentada de como nosso modelo mede a perda de carga.

As curvas mostram o mesmo perfil redução da força motriz da pressão parcial de CO<sub>2</sub> denotando que a combinação de outra abordagem de perda de carga mante o modelo funcional e valido.

## 4.2 Vazão do permeado ao longo do tubo

### 4.2.1 Visão geral

Uma maneira de analisar o modelo é avaliar como é a vazão do permeado ao longo do tubo segue abaixo as curvas de vazão com a fração molar de CO<sub>2</sub> em 10%.

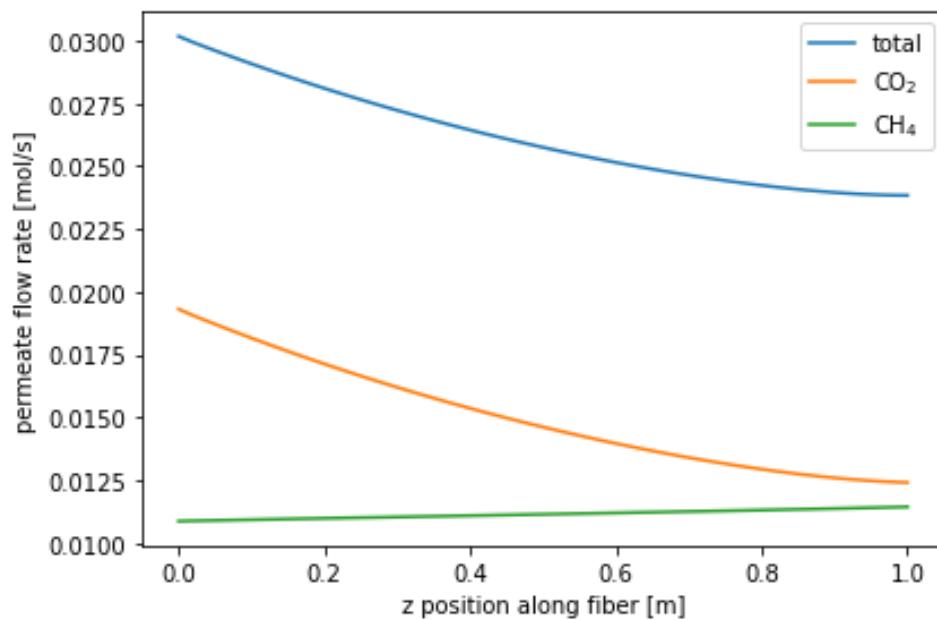


Figura 7 - Vazão do permeado ao longo do tubo do total e de cada um dos componentes para a fração molar de CO<sub>2</sub> 10%

Podemos perceber que a variação vazão total segue a variação da vazão de CO<sub>2</sub>. O CO<sub>2</sub> é a parte da mistura que é retida na membrana de fibras oca esse perfil de redução de sua vazão tem grande impacto no todo. Ao final do tubo o fluxo total não é próximo nenhum dos componentes mostrando que o fluxo ainda é uma mistura com boa presença das duas partes, apesar de no início do tubo a fração molar de CO<sub>2</sub> ser 10%.

Quando modelamos a fração molar de CO<sub>2</sub> em 60% temos as seguintes curvas:

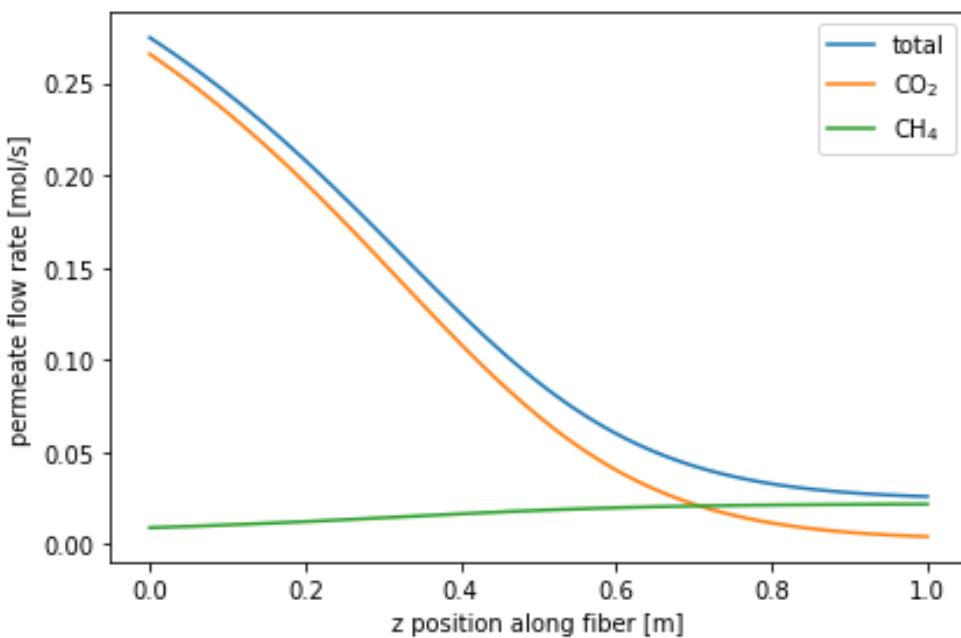


Figura 8 - Vazão do permeado ao longo do tubo do total e de cada um dos componentes para a fração molar de CO<sub>2</sub> 60%

A vazão de CO<sub>2</sub> tem uma queda muito mais brusca com a fração molar maior. No começo do tubo a vazão total é muito próxima da de CO<sub>2</sub> e ao final da fibra a vazão se aproxima muito a de CH<sub>4</sub>, mas próxima até que com uma fração molar de CO<sub>2</sub> menor.

#### 4.2.2 Stage cut, perdas de metano e dióxido de carbono presente no resíduo para diversas áreas de membrana.

O *stage cut* é a vazão de permeado sobre a vazão de alimentação. É uma medida importante para avaliar a separação de gases por membrana e normalmente há um *trade-off* entre a quantidade de gás recuperado e sua pureza após a membrana.

Vamos analisar a métrica para cada uma das configurações de fração molar de CO<sub>2</sub> com diferentes áreas de membrana com o objetivo de analisar a separação e validar o modelo. Esse é um dos principais resultados do modelo e deve o correr que quanto maior o *stage cut* maior a perda de metano e maior a presença de CO<sub>2</sub> no resíduo.

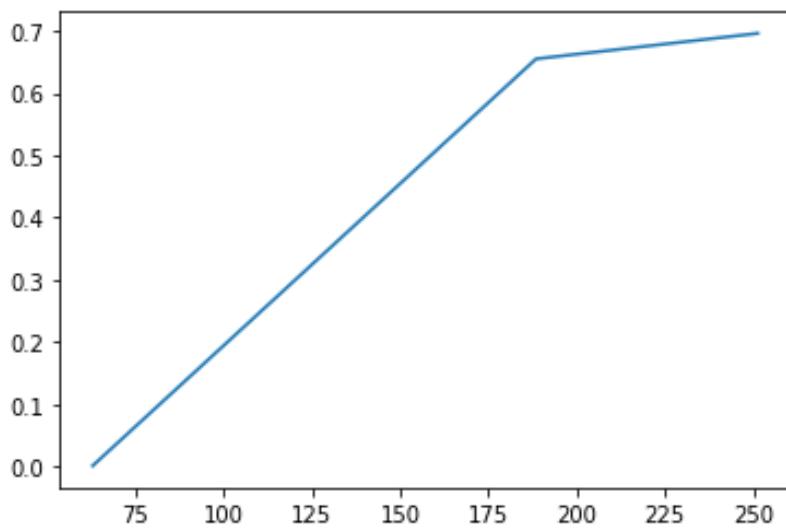


Figura 9 - Eixo y Stage cut e Eixo x Área da membrana. Com a fração molar de CO<sub>2</sub> na alimentação de 60%

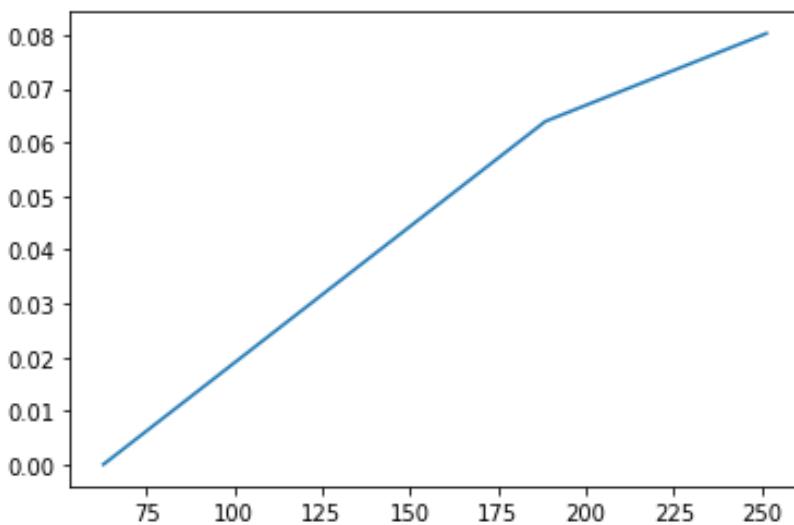


Figura 10 - Eixo y Stage cut e Eixo x Área da membrana. Com a fração molar de CO<sub>2</sub> na alimentação de 10%

Com a fração molar em 60% temos um *Stage cut* mais alto devido a maior pressão de entrada necessária para que a mistura permeie a fibra efetivamente. Considerando que a maneira de aumentar a área no caso da separação por membranas é aumentar o comprimento do tubo as variações entre as mesmas áreas são semelhantes fazendo com que a razão seja mais difícil de se aumentar quanto maior ela for.

A predição consistente do *stage cut* de diferentes composições é positivo para o modelo e um legado importante para o trabalho.

Os gráficos a seguir mostram as perdas de metano em cada composição:

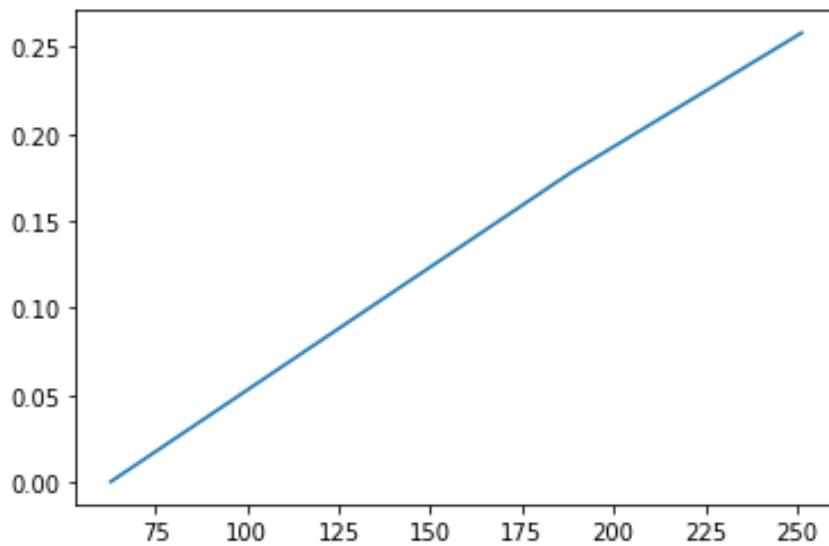


Figura 11 - Eixo y perdas de  $\text{CH}_4$ ; Eixo x Área da membrana. Com a fração molar de  $\text{CO}_2$  em 60%

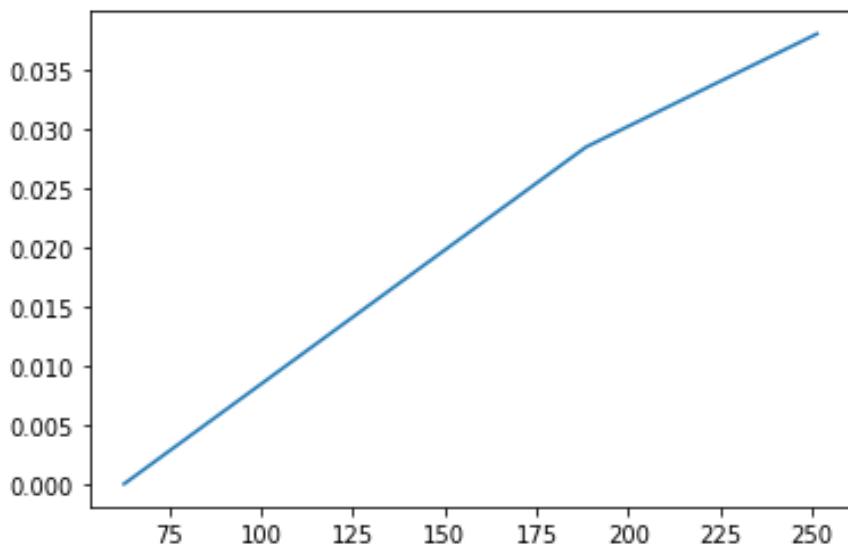


Figura 12 - Eixo y perdas de  $\text{CH}_4$ ; Eixo x Área da membrana. Com a fração molar de  $\text{CO}_2$  em 10%

As perdas de metano são outro ponto importante que o modelo aborda e suas previsões estão em concordância com os *stage cut* previamente demonstrados nos modelos anteriores. A possibilidade de prever as perdas de  $\text{CH}_4$  é um dos fatores para se adequar a membrana utilizada na separação do gás para que atenda a necessidade de futuros *stakeholders* do modelo.

O elemento restante para análise é o resíduo de  $\text{CO}_2$  na saída após a passagem do gás pelo tubo, portanto é inversamente proporcional a pureza do gás de interesse. É

uma métrica de alta importância para os interessados no processo de separação por membranas.

Na (figura 13) e (figura 14) temos o CO<sub>2</sub> residual nas duas configurações de fração molar analisadas:

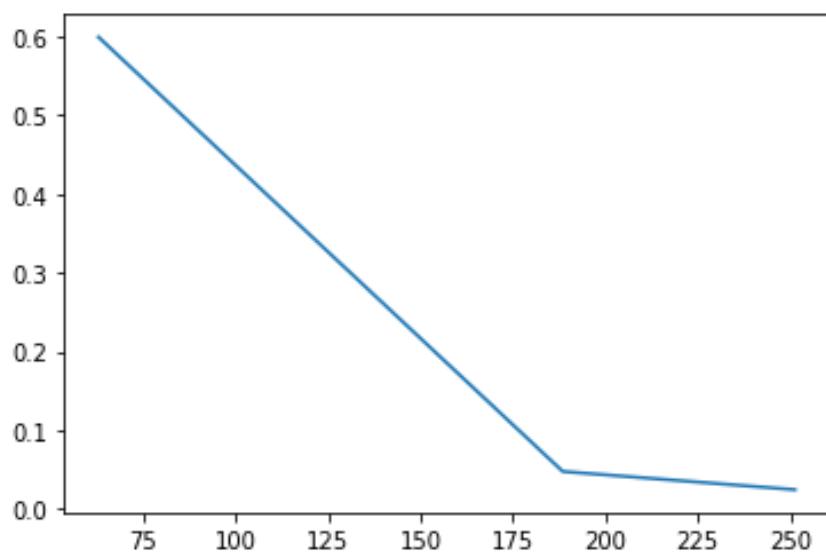


Figura 13 - Eixo y resíduo de CO<sub>2</sub> na saída do tubo eixo x área da membrana. Com a fração molar de CO<sub>2</sub> em 60%

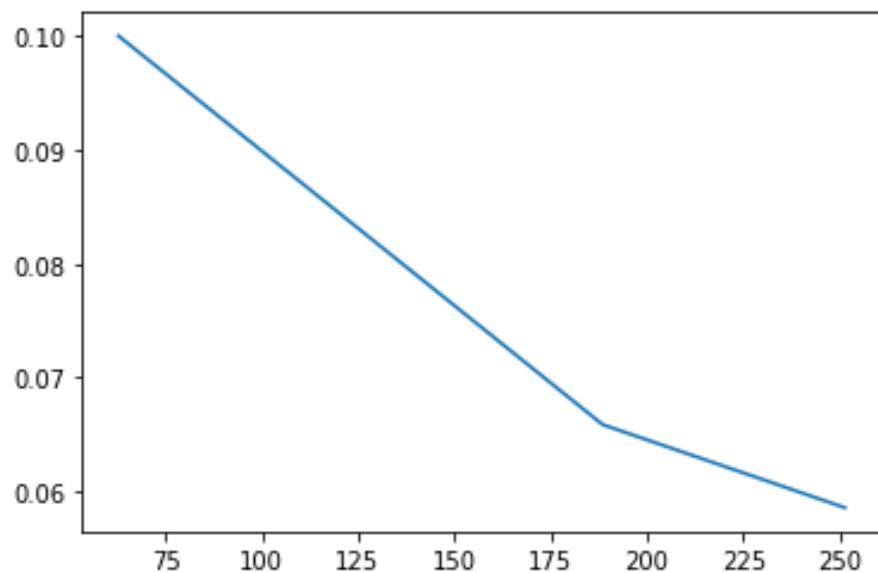


Figura 14 - Eixo y resíduo de CO<sub>2</sub> na saída do tubo eixo x área da membrana. Com fração molar de CO<sub>2</sub> em 10%

O CO<sub>2</sub> residual diminui drasticamente com o aumento da área na composição com maior fração molar mostrando que é uma separação com um aproveitamento pior que a de menor fração, como esperado.

Os gráficos apresentados mostram a utilidade do modelo. Com essas três métricas em linha com a separação apresentada em (THUNDYIL; KOROS, 1997) e com a modernização utilizando o pacote coolprop e tendo o modelo sido adaptado para uma maneira mais moderna de perda de carga apresentada em (SOROODAN MIANDOAB; KENTISH; SCHOLES, 2020), resta uma conferencia da a *driving force*(ΔP das pressões parciais) de cada uma das configurações de fração molar analisadas para confirmarmos o modelo como valido.

#### 4.2.3 *Driving force* de cada um dos componentes da mistura ao longo do tubo.

A análise da *driving force* em cada uma das configurações confirma as vazões de cada um dos componentes ao longo do tubo. Justificando as variações de vazão ao longo do tubo previamente apresentadas. Seguem os gráficos de *driving force* ao longo do tubo:

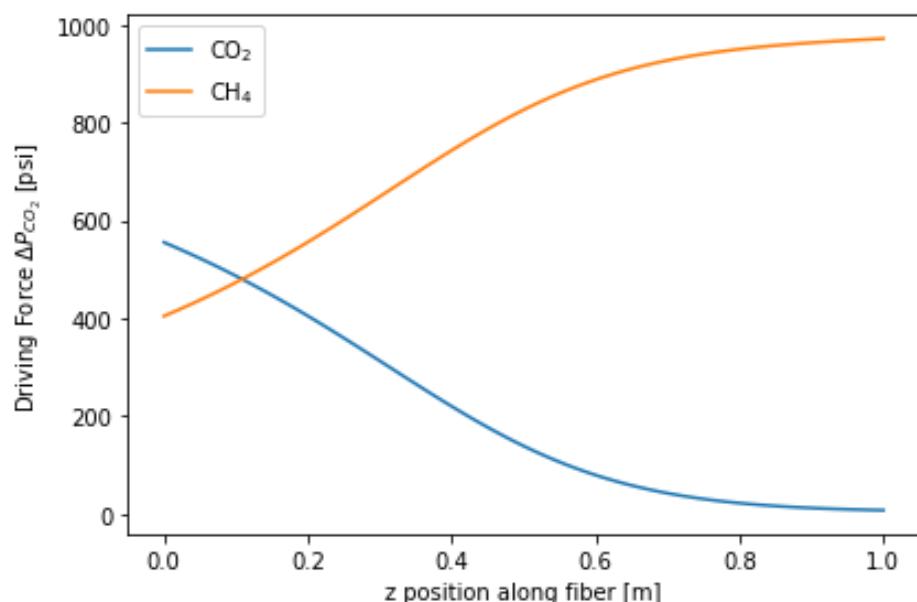


Figura 15 - *Driving force* ao longo do tubo para a configuração com fração molar em 60% de CO<sub>2</sub>

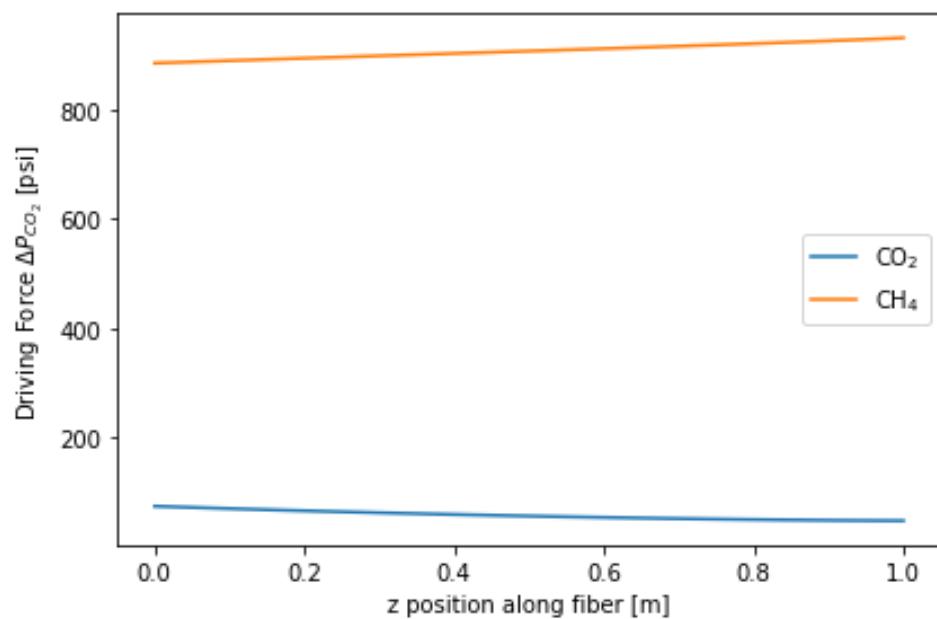


Figura 16 - *Driving force* ao longo do tubo para a configuração com fração molar em 10% de  $CO_2$

Podemos notar padrões que confirmam as vazões em ambos os casos.

No caso de 60% temos uma variação mais agressiva de ambos os componentes o que se reflete nas vazões ao longo do tubo, e com um perfil final onde a *driving force* de  $CH_4$  é muito maior que a de  $CO_2$ , perfil em linha com o que acontece no final do tubo, com a vazão de metano maior que a de dióxido de carbono. No caso da fração molar em 10% temos variações mais suaves das pressões parciais também em linha com as vazões e com a aproximação no final da vazão de metano e gás carbônico.

Os gráficos da *driving force* dão mais insumos para validar o modelo com segurança.

## 5 CONCLUSÃO

### 5.1 Contribuições do trabalho

O modelo desenvolvido é válido e apresentou consistência com o apresentado anteriormente em (THUNDYIL; KOROS, 1997) e moderniza o modelo ao adicionar um modelo de perda de carga desenvolvido recentemente em (SOROODAN MIANDOAB; KENTISH; SCHOLES, 2020). E utiliza o pacote coolprop validado academicamente em (BELL et al., 2014) fazendo também que se possa utilizar o modelo para a separação de quaisquer dois gases que estejam presentes no pacote.

O modelo agora fica com O Departamento de Engenharia Minas e de Petróleo da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo de para futuros estudos de separação de gases e está atualizado para uma abordagem mais atual do modelo de separação de CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> por membranas. A modelagem em python também o torna mais adaptável que a maneira anterior e pode ser operado por pesquisadores e graduandos do departamento uma vez que é uma linguagem de programação de alto nível e bem difundida na comunidade academica.

A contribuição principal portanto é o modelo em si que foi validado e pode ser utilizado para realizar ensaios virtuais com o objetivo de resolver problemas reais presentes na industria e na academia, com um alto grau de adaptabilidade e em uma linguagem de fácil adaptação.

### 5.2 Trabalhos futuros

As principais contribuições para o modelo seriam a adaptação dele para outros tipos de membrana uma vez que no trabalho a membrana utilizada foi a de acetato de celulose. O modelo depende um palpite inicial para a pressão para cada variação tal como fração molar de CO<sub>2</sub> ou tipo de membranam uma maneira de automatizar esse palpite tornaria o modelo mais facilmente adaptavel e utilizavel por usuarios com menor conhecimento da linguagem de programação.

## REFERÊNCIAS

- BELL, Ian H.; WRONSKI, Jorrit; QUOILIN, Sylvain; LEMORT, Vincent. Pure and Pseudo-pure Fluid Thermophysical Property Evaluation and the Open-Source Thermophysical Property Library CoolProp. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [S. I.], v. 53, n. 6, p. 2498–2508, 2014. DOI: 10.1021/ie4033999.
- CORONEO, M.; MONTANTE, G.; GIACINTI BASCHETTI, M.; PAGLIANTI, A. CFD modelling of inorganic membrane modules for gas mixture separation. **Chemical Engineering Science**, [S. I.], v. 64, n. 5, p. 1085–1094, 2009. DOI: 10.1016/j.ces.2008.10.065.
- HAMM, Janice Botelho Souza. MEMBRANAS DE CARBONO SUPORTADAS PARA SEPARAÇÃO DE GASES. [S. I.], p. 157, [s.d.].
- LAVEZO, Ana Elisa; RAVAGNANI, Dr Sergio Persio. ESTUDO DA MINIMIZAÇÃO DO CUSTO DE UM PROCESSO DE SEPARAÇÃO DE MISTURAS GASOSAS MULTICOMPONENTES ATRAVÉS DA MEMBRANA DE FIBRA OCA. [S. I.], p. 101, 2006.
- PAN, C. Y.; HABGOOD, H. W. Gas separation by permeation Part II: Effect of permeate pressure drop and choice of permeate pressure. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, [S. I.], v. 56, n. 2, p. 210–217, 1978. DOI: 10.1002/cjce.5450560208.
- RAUTENBACH, Robert. Process design and optimization. In: PORTER, M. C. (org.). **Handbook of Industrial Membrane Technology**. Park Ridge, NJ: Noyes, 1990. p. 349–400.
- SILVA FILHO, Paulo Rogerio Cruz. **Utilização da Injeção de CO<sub>2</sub> como Método de Recuperação Avançada em Reservatórios do Pré-sal**. 2016. Projeto de Graduação - UFRJ, Rio de Janeiro, 2016.
- SOROODAN MIANDOAB, Ehsan; KENTISH, Sandra E.; SCHOLES, Colin A. Non-ideal modelling of polymeric hollow-fibre membrane systems: Pre-combustion CO<sub>2</sub> capture case study. **Journal of Membrane Science**, [S. I.], v. 595, p. 117470, 2020. DOI: 10.1016/j.memsci.2019.117470.
- THUNDYIL, Mathews J.; KOROS, William J. Mathematical modeling of gas separation permeators — for radial crossflow, countercurrent, and cocurrent hollow fiber membrane modules. **Journal of Membrane Science**, [S. I.], v. 125, n. 2, p. 275–291, 1997. DOI: 10.1016/S0376-7388(96)00218-9.