

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA

João d'Araujo Marques



**REMOÇÃO DE CO₂ DE GÁS DE EXAUSTÃO DE
PLATAFORMAS OFFSHORE POR MEIO DE SISTEMA
INTEGRADO DE CONTACTOR E MICROCANAIS**

ENGENHARIA QUÍMICA

RIO DE JANEIRO

2024

João d'Araujo Marques

**REMOÇÃO DE CO₂ DE GÁS DE EXAUSTÃO DE PLATAFORMAS OFFSHORE POR MEIO DE
SISTEMA INTEGRADO DE CONTACTOR E MICROCANAIS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Orientador: Cristiano Piacsek Borges

Rio de Janeiro

2024

Gerar a página da ficha catalográfica em <http://fichacatalografica.sibi.ufrj.br/> e substituir esta página por ela, no documento final.

Se o documento vier a ser impresso, esta página deverá ser impressa no verso da anterior (folha de rosto).

João d'Araujo Marques

**REMOÇÃO DE CO₂ DE GÁS DE EXAUSTÃO DE PLATAFORMAS OFFSHORE POR MEIO DE
SISTEMA INTEGRADO DE CONTACTOR E MICROCANAIS**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Escola de Química da Universidade Federal do
Rio de Janeiro, como parte dos requisitos
necessários à obtenção do grau de Engenheiro
Químico.

Aprovado em 17 de dezembro de 2024.

Cristiano Piacsek Borges, DSc., COPPE

André Felipe Ferreira de Souza, MSc., Petrobras

Raquel Massad Cavalcante, DSc., Escola de Química

Rio de Janeiro
2024

RESUMO

D'ARAUJO MARQUES, João. **Remoção de CO₂ de Gás de Exaustão de Plataformas Offshore por Meio de Sistema Integrado de Contactor e Microcanais**. Rio de Janeiro, 2024. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química) - Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2024.

Sob o contexto das cada vez mais drásticas mudanças climáticas, as empresas exploradoras e produtora de petróleo buscam soluções para diminuir a pegada de carbono do petróleo e gás natural extraídos e comercializados. Sabendo-se que cerca de 70% do CO₂ emitido em uma plataforma se deve à queima do gás natural nos turbogeradores, soluções inovadoras e práticas para tratamento do gás de exaustão rico em CO₂ tornam-se cada vez mais importantes. O presente trabalho busca estudar, de maneira preliminar, a viabilidade técnica e econômica de um processo integrado entre contactores de membrana de fibra oca e microcanais, no qual o gás de exaustão faz duas passagens pelo equipamento: uma no casco do contactor e outra no lúmen da fibra oca. Os resultados demonstram que o equipamento não somente seria capaz de remover CO₂ com eficiência de 99% do gás de exaustão a uma vazão *standart* de 74 m³/h em cerca de 1,2 metros de comprimento utilizando apenas água como líquido absorvente, capturando mais de 155 toneladas de CO₂ anuais, como também seria economicamente viável, considerando uma vida útil 10 anos, em função de receita recorrente por meio de reinjeção do CO₂ recuperado e economia em compra de créditos de carbono.

Palavras-chave: Transferência de massa; contactores de membrana de fibra oca; microcanais; gás de exaustão; CO₂; CCS

ABSTRACT

D'ARAUJO MARQUES, João. **Remoção de CO₂ de Gás de Exaustão de Plataformas Offshore por Meio de Sistema Integrado de Contactor e Microcanais.** Rio de Janeiro, 2024. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química) - Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2024.

In the context of increasingly drastic climate change, oil exploration and production companies are looking for solutions to reduce the carbon footprint of the oil and natural gas extracted and commercialized. Knowing that around 70% of the CO₂ emitted on a platform is due to the burning of unprocessed natural gas in turbogenerators, innovative and practical solutions for treating CO₂ -rich exhaust gas are becoming more and more important. This work seeks to preliminarily study the feasibility of an integrated process between hollow fiber membrane contactors and microchannels, in which the exhaust gas passes through the equipment twice: once through the contactor shell and once through the lumen of the hollow fiber. The results show that the equipment would not only be able to purify above 99% the exhaust gas with a normal flow rate of 74 m³/h over a length of around 1.2 meters using only water as solvent, capturing more than 155 tons of CO₂ annualy, but would also be economically viable, considering a lifespan of 10 years, due to recurring revenue reinjection of the recovered CO₂ and savings in terms of carbon credits.

Keywords: Mass Transfer; hollow-fiber membrane contactors; microchannels; exhaust gas; CO₂; CCS

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Distribuição da concentração de dióxido de carbono nos poços das Bacias de Santos e de Campos	15
Figura 2 - Demonstração Esquemática da Remoção Seletiva de compostos com uso de membrana	16
Figura 3- Esquematização de absorção com leito recheado	18
Figura 4 – Esquematização de absorção de CO ₂ utilizando leito recheado rotativo (<i>Rotating Packed Bed</i>).....	19
Figura 5- Funcionamento de um contactor de fibra oca.....	21
Figura 6 – Escoamento Cruzado em Contactor de Membrana.....	23
Figura 7- Representação da Transferência de Massa em Contactor de Fibra Oca	25
Figura 8- Desenho esquemático de um microcanal	27
Figura 9- Fotos dos diferentes tipos de escoamento	29
Figura 10- Mapas de Regime de Escoamento em Microcanais	29
Figura 11- Tubo Venturi	34
Figura 12- Esquematização da Proposta do Trabalho de Conclusão de Curso	36
Figura 13 – Esquematização do cálculo computacional	38
Figura 14 - Impacto da velocidade superficial da fase líquida no diâmetro médio das bolhas produzidas	40
Figura 15 - Inequação que Representa Condições de Velocidade e Diâmetro do Microcanal para Existência de Fluxo de Taylor em Microcanal ($\varepsilon_g = 0,35$).....	42
Figura 16- Representação da Relação entre Velocidade Superficial de Líquido e de Gás para uma Razão Volumétrica de 35% de Gás.....	44
Figura 17- Perda de Carga no Venturi (Vazão de Gás=0,1 m ³ /s, razão volumétrica de gás = 35%).....	45
Figura 18 - Variação do k_{la} Conforme Variação do Diâmetro Hidráulico para Demais Constantes Fixas (Velocidade do Líquido = 2 M/S).....	47
Figura 19 – Variação do k_{la} conforme Variação da Velocidade Superficial do Líquido para Demais Constantes Fixas (Diâmetro Hidráulico = 500 Micrômetros)	48
Figura 20 - Variação da Perda de Carga por Comprimento do Microcanal de acordo com o k_{la}	49
Figura 21- Concentração de Saída de CO ₂ no Líquido para diferentes k_{la} s em Escoamento de Taylor (P=3 Atm, T=293k)	51

Figura 22 – Fração Molar de CO ₂ no Gás para diferentes k_{la} em Escoamento de Taylor (P= 3 Atm, T=293 K)	51
Figura 23 - Coeficiente Global de Transferência de Massa (Lado Líquido) para Contactor com Membrana de Fibra Oca a partir da Razão Volumétrica de Gás (Temperatura =293K, Velocidade do Líquido = 1 m/s).....	54
Figura 24– Esquemática para Equacionamento de Contactor com Membrana de Fibra Oca..	55
Figura 25 - Fração de CO ₂ no Gás de Saída do Contactor de Acordo com Tamanho do Contactor (P=1 atm, ϵ_g =35%, z_1 =0,12, K_l =0,0011 m/s)	56
Figura 26– Concentração de CO ₂ de Saída na fase líquida do Contactor (P=1 atm, ϵ_g =35%, z_1 =0,12, K_l =0,0011 m/s).....	57
Figura 27– Diâmetros de Venturi para Diferentes Razões Volumétricas na Entrada do Contactor	60
Figura 28– Perda de Carga no Venturi em função da Razão Volumétrica de Gás na Entrada Do Contactor	61
Figura 29– Velocidade Máxima do Líquido dentro do Microcanal para permitir Escoamento de Taylor em função da Razão Volumétrica de Gás.....	62
Figura 30– Número de Microcanais para Desenvolvimento de Escoamento de Taylor em função da Razão Volumétrica.....	63
Figura 31– k_{la} no Microcanal em função da Razão Volumétrica De Gás	64
Figura 32– Perda de Carga no Microcanal em função da Razão Volumétrica de Gás	64
Figura 33 – K_l do Contactor em função da Razão Volumétrica do Gás	65
Figura 34 - Tamanho do Contactor Necessário para cada Razão Volumétrica.....	66
Figura 35- Perda de carga máxima no microcanal para diferentes razões volumétricas	67
Figura 36- Fração Molar de CO ₂ no gás após passagem no microcanal	68
Figura 37 – Fração molar final por Metro de Contactor e por Perda de Carga no Microcanal e no Venturi.....	69
Figura 38 – Esquema proposto de separação gás-líquido após passagem no lúmen da fibra oca	70
Figura 39– Arranjo Proposto das Fibras no Contactor de Membrana (Fora de Escala)	71
Figura 40- % Da Área Transversal do Contactor Ocupada por Microcanais.....	72
Figura 41 – Dimensionamento do Contactor	73
Figura 42 – Dimensionamento do Venturi e Perda de Carga.....	74
Figura 43 – Influência do comprimento do Contactor sobre a Fração de CO ₂ no Gás na saída do contactor e sobre a eficiência do processo.	74

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Frações Finais de Saída e eficiência do equipamento.....	68
Tabela 2 – Análise de Viabilidade Econômica do Projeto.....	77

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AMP	2-amino-2-metil-1-propanol
CAPEX	<i>Capital Expenditures</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
DEA	Dietanolamina
DEG	Dietilenoglicol
FPSO	<i>Floating Production Storage and Offloading</i>
MDEA	Metildietanolamina
MEA	Monoetanolamina
OPEX	<i>Operational Expenditures</i>
PP	Polipropileno
PVFD	Poli(fluoreto de vinilideno)
PTFE	Poli(tetrafluoretileno)
TEA	Trietanolamina
TEG	Trietilenoglicol

LISTA DE SÍMBOLOS

K_L	Coeficiente global de transferência de massa do líquido (m s^{-1})
E	Coeficiente de Contribuição de Reação Química (-)
k_l	Coeficiente de transferência de massa do líquido (m s^{-1})
k_m	Coeficiente de transferência de massa da membrana (m s^{-1})
R	Constante Universal dos Gases (mol atm K^{-1})
T	Temperatura (K)
H	Constante de Henry (mol atm $^{-1}$ L $^{-1}$)
d_i	Diâmetro interno do microcanal (m)
d_o	Diâmetro externo do microcanal (m)
k_g	Coeficiente de transferência de massa do gás (m s^{-1})
ε	Porosidade (-)
τ	Tortuosidade (-)
δ	Espessura da Membrana (m)
$D_{CO_2\text{-poro}}$	Difusividade do CO ₂ nos poros da membrana ($\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$)
Sh_g	Número de Sherwood da fase gasosa (-)
Sh_l	Número de Sherwood da fase líquida (-)
k_l^*	Coeficiente de transferência de massa químico e físico do líquido (m s^{-1})
d_c	Diâmetro do casco do contactor (m)
$D_{CO_2\text{-casco}}$	Difusividade do CO ₂ no gás no casco ($\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$)
d_h	Diâmetro hidráulico (m)
D_{CO_2}	Difusividade do CO ₂ no líquido ($\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$)
r	Taxa de absorção (-)
d_b	Diâmetro médio das bolhas (m)
d_{th}	Diâmetro da garganta do Venturi (m)
ρ	Densidade (kg m^{-3})
σ	Tensão Superficial (N m^{-1})
μ	Viscosidade Dinâmica (Pa s)
Re	Número de Reynolds (-)
g_c	Primeira Constante de proporcionalidade do Venturi (-)
C	Segunda Constante de proporcionalidade do Venturi (-)
β	Ângulo da Seção Divergente do Venturi ($^{\circ}$)

v_l	Velocidade do Líquido (m s ⁻¹)
v_g	Velocidade do Gás (m s ⁻¹)
We	Número de Weber (-)
ε_g	Razão Volumétrica de Gás (-)
$v_{l'}$	Velocidade Superficial do Líquido (m s ⁻¹)
$v_{g'}$	Velocidade Superficial do Gás (m s ⁻¹)
Q	Vazão (m ³ s ⁻¹)
$\frac{\Delta P}{L}$	Perda de Carga (kPa)
a_{th}	área da garganta do Venturi (m ²)
k_{la}	coeficiente volumétrico de transferência de massa do líquido (s ⁻¹)
L_{UC}	Tamanho da célula unitária do Fluxo de Taylor (m)
Sc	Número de Schmidt (-)
C	Concentração (mol L ⁻¹)
P_{CO_2}	Pressão parcial de CO ₂ (atm)
P	Pressão (atm)
V	Volume (m ³)
A	Área (m ²)
N	Fluxo (mol m ² s ⁻¹)
C^*	Concentração de equilíbrio (mol L ⁻¹)
L_B	Comprimento da Bolha (m)
D_K	Difusividade de Knutsen (m ² s ⁻¹)
D_{ab}	Difusividade do par de gases (m ² s ⁻¹)
MM	Massa molar (g mol ⁻¹)
Ω_{ab}	Adimensional relacionado ao potencial de Lennard-Jones (-)
σ_{ab}	Diâmetro médio de colisão (angstroms)
d_p	Diâmetro médio dos poros da membrana (m)
F	Vazão molar de CO ₂ (mol s ⁻¹)
Z	Fração molar de CO ₂ (-)
ACM	Área de Contato de Membrana (m ²)
$LMTD$	Diferença logarítmica de concentração (-)

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO.....	14
2.	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	18
2.1.	PROCESSOS DE CAPTURA DE CO2	18
2.2.	CONTACTORES COM MEMBRANAS	20
2.2.1.	Parâmetros Operacionais	22
2.2.2.	Transferência de Massa em Contactores de Membrana	24
2.3.	ABSORÇÃO EM MICROCANAIS.....	27
2.3.1.	Introdução a microcanais	27
2.3.2.	Regimes de Escoamento.....	27
2.3.3.	Parâmetros Operacionais	30
2.3.4.	Efeito do solvente	31
2.3.5.	Abordagem Teórica	32
2.4.	FORMAÇÃO DE MICROBOLHAS EM VENTURI.....	33
2.4.1.	Descrição Geral.....	33
2.4.2.	Parâmetros Operacionais	34
3.	METODOLOGIA E OBJETO DE ESTUDO.....	36
4.	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	39
4.1.	MODELAGEM DO VENTURI E REGIME DE ESCOAMENTO NO MICROCANAL	39
4.2.	MODELAGEM DE ABSORÇÃO EM MICROCANAL.....	45
4.3.	MODELAGEM DE ABSORÇÃO EM CONTACTOR DE MEMBRANA OCA	
	52	
4.4.	MODELAGEM DO CIRCUITO INTEGRADO	58
4.4.1.	Investigação da Razão Volumétrica de gás.....	59
4.4.2.	Dimensionamento do equipamento	71
5.	ANÁLISE TÉCNICO-ECONÔMICA	76
6.	CONCLUSÃO.....	78
7.	REFERÊNCIAS.....	80
	APÊNDICE A - PROGRAMA EM PYTHON PARA CÁLCULO DO MICROCANAL	85
	APÊNDICE B – PROGRAMA EM PYTHON PARA CÁLCULO DO PROCESSO INTEGRADO PARA APENAS UMA FRAÇÃO NO CONTACTOR	94

1. INTRODUÇÃO

Em um mundo cada vez mais preocupado com o aquecimento global e suas consequências, a captura de gás carbônico derivado de processos industriais, de maneira a impedir que o dióxido de carbono seja liberado na atmosfera, mostra-se de suma importância como arma no combate ao efeito estufa.

Para além da questão ambiental, o próprio CO₂ capturado possui uma ampla gama de usos em diferentes industriais, como por exemplo (OTTO et al., 2015):

- *Enhanced Oil Recovery* para recuperação de petróleo adicional a partir da reinjeção do CO₂
- Matéria Prima na produção de ureia e de metanol
- Bebidas Carbonatadas
- Sistemas de Refrigeração
- Produção de Polímeros

Atualmente, há cerca de 40 plantas de captura de carbono ao redor do mundo, totalizando uma capacidade anual de 45 Mt de CO₂. No entanto, mesmo considerando-se que mais de 50 novas plantas de captura de carbono tenham sido anunciadas para construção entre 2022 e 2030, a previsão é de que chegaremos em 2030 com apenas um terço da capacidade necessária para que se atinja a meta de “Net Zero Carbon Emissions” em 2050, de acordo com a Agência Internacional de Energia (IEA, 2024).

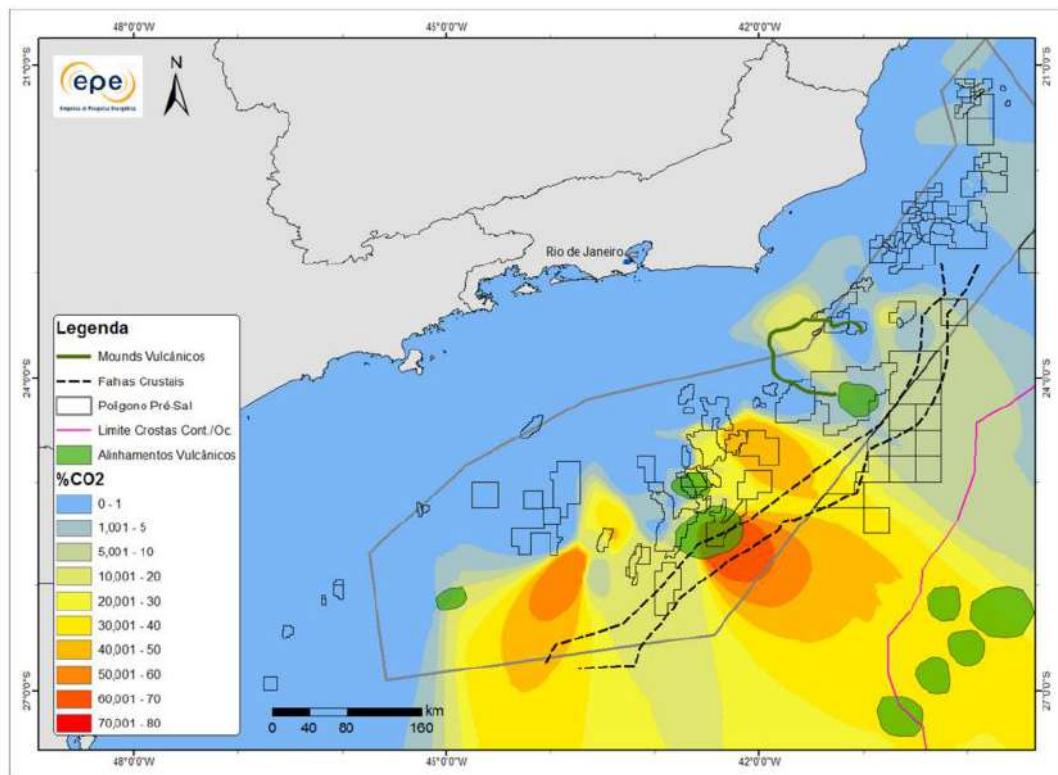
Se tratando do gás natural produzido no ambiente *offshore*, o CO₂, juntamente com o sulfeto de hidrogênio, são algumas das principais impurezas que prejudicam a qualidade deste produto e devem ser removidas o mais rapidamente possível após a extração pelos poços. Dentro os efeitos negativos provocados pelo acúmulo excessivo de dióxido de carbono no gás natural estão a diminuição do poder calorífico do gás, visto que o gás carbônico não é combustível, e a corrosão da tubulação e equipamentos, devido à formação de ácido carbônico (AGHEL et al., 2018).

Nas duas principais bacias de exploração offshore brasileiras, Bacia de Campos e Bacia de Santos, a presença de CO₂ no gás se mostra um desafio. Enquanto na Bacia de Campos a maioria dos poços contém menos de 1% molar de conteúdo de CO₂, com poucos poços chegando à marca de 20%, na Bacia de Santos o cenário é mais desfavorável: cerca de metade dos poços analisados na região possuem teor entre 10 e 60% de CO₂, com alguns poços chegando à impressionante marca de 80% do contaminante, conforme Figura 1 de distribuição de concentração de CO₂ nos campos das Bacias de Santos e Campos

(D'ALMEIDA et al., 2018). De acordo com as especificações da Agência Nacional de Petróleo, o grau máximo de CO₂ que o gás natural para venda pode ter é de 3%.

Além disso, parte do gás natural é utilizado para a geração de energia nas plataformas de petróleo. No processo de combustão para geração de energia nas turbinas, o metano é convertido a CO₂ e H₂O e o gás exausto é liberado para a atmosfera, representando uma atividade de forte impacto ambiental. Assim, a queima de gás natural pode chegar a corresponder a quase 70% do total de gás carbônico emitido por uma plataforma (CASTRO et al., 2022). Portanto, percebe-se a relevância de tecnologias que retirem o gás carbônico do gás de exaustão para possibilitar sua reinjeção no reservatório, como contactores de membrana, adsorção e remoção química.

Figura 1 - Distribuição da concentração de dióxido de carbono nos poços das Bacias de Santos e de Campos



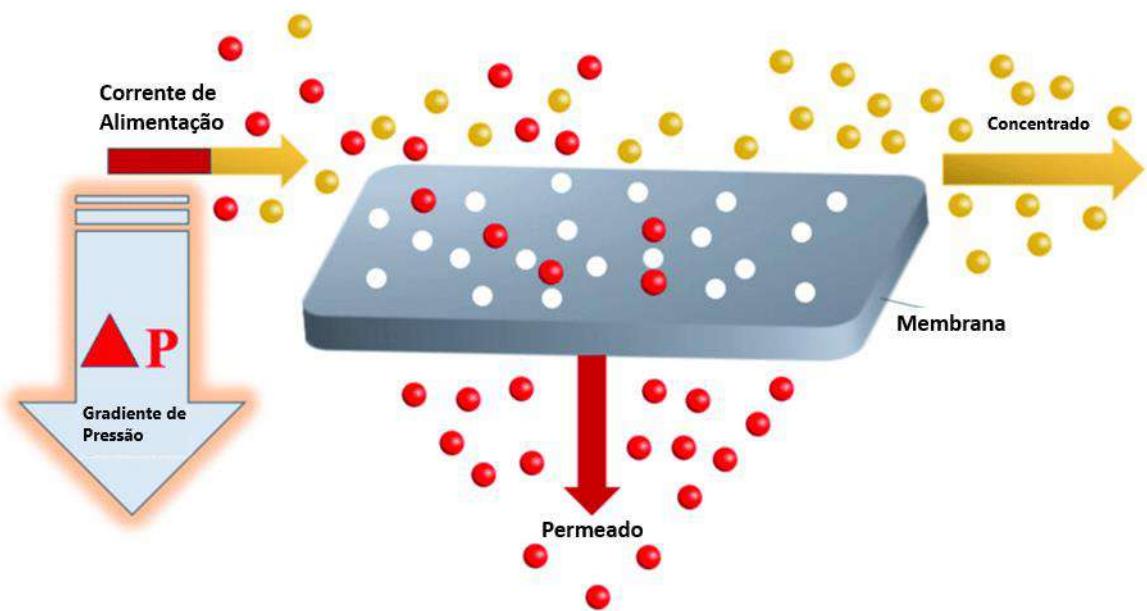
Fonte: d'Almeida et al (2018)

Diversos métodos para remoção do CO₂ de gás de exaustão têm sido desenvolvidos e aplicados, dentre eles (VAZ Jr. et al., 2022):

- Processos com membranas, que permitem a permeação seletiva do dióxido de carbono, retendo preferencialmente os demais componentes do gás de exaustão;
- Absorção, processo no qual o CO₂ é seletivamente dissolvido em solvente colocado em contato com o gás de exaustão para posteriormente ser recuperado em processo regenerativo;
- Adsorção, onde o CO₂, em vez de ser separado do restante da fase gasosa por um solvente, é adsorvido em alguma superfície porosa como zeólitas;
- Remoção química, que consiste em promover reações químicas seletivas que transformam o CO₂ em algum tipo de produto final em outro estado físico, como, por exemplo, carbonatos.

Os processos com membranas, embora de alta eficiência e compactos, possuem como característica uma baixa estabilidade – em função da escolha do material adequado para a membrana – e baixa vazão máxima de processamento comparado a outros métodos. A Figura 2 abaixo demonstra como funciona uma membrana seletiva para remoção de um gás específico de uma mistura:

Figura 2 - Demonstração Esquemática da Remoção Seletiva de compostos com uso de membrana



Fonte: Adaptado de ELHENAWY et al., 2020

Os processos com membranas ganham aplicação industrial quando são aplicados junto a contactores, conforme será detalhado posteriormente. No estudo de Scholes et al. (2020), foi testada uma planta piloto para remoção de CO₂ com contactores de membrana de gás de exaustão de queima de carvão em uma termelétrica. Os resultados mostraram uma recuperação de mais de 90% de dióxido de carbono do gás de exaustão, mostrando que a tecnologia é viável e promissora, mesmo sendo consideravelmente mais recente.

Já os processos de absorção com aminas são os mais desenvolvidos em termos de tecnologia para aplicação em ambiente *offshore*, graças à sua eficiência e menor necessidade de pré-tratamento do gás. No entanto, estes processos têm alta demanda energética devido à regeneração do solvente, parte fundamental para que haja garantia da boa funcionalidade do sistema de absorção (TAY et al., 2019). Uma solução interessante para processos de absorção que vem sendo estudada de maneira crescente na literatura é a absorção realizada em microcanais – canais com diâmetro na ordem de grandeza de 200 a 700 micrômetros -, em função da elevada área específica de contato e baixa demanda energética. (YIN, 2022).

O presente trabalho debruça-se sobre a busca de uma solução pouco custosa e prática para captura do CO₂ do gás de exaustão de turbogeradores à gás nas plataformas *offshore*. A solução proposta se trata de uma integração de dois processos para remoção de CO₂: microcanais para absorção e contactores de membrana de fibra oca. Nesta solução, o gás de exaustão realiza duas passagens: a primeira no lado do casco do contactor de membrana e a segunda percorrendo interior do lúmen da fibra oca – que neste caso funciona como microcanal - junto do líquido absorvente após formação de microbolhas de gás no líquido em tubo Venturi. O objetivo é verificar a viabilidade deste equipamento em relação à sua eficiência, dimensionamento e análise econômica. É esperado que a presença do gás de exaustão no lúmen da fibra oca possa contribuir tanto para a melhoria da transferência de massa na passagem do gás pelo contactor, diminuindo a resistência à transferência de massa no líquido, quanto para a eficiência global, absorvendo o CO₂ que não tiver sido retirado na passagem do gás pelo casco do contactor.

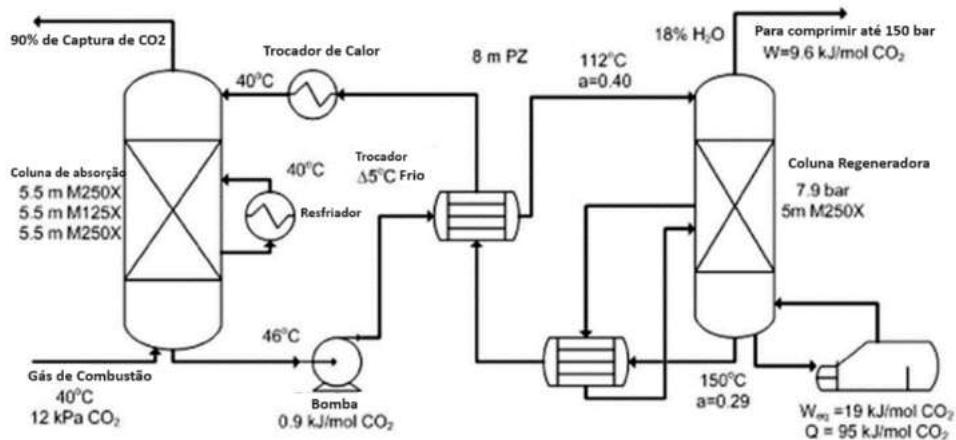
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. PROCESSOS DE CAPTURA DE CO₂

Dentre as tecnologias de absorção tradicionais disponíveis, há algumas que merecem destaque. A primeira delas é, naturalmente, a mais convencional, a tecnologia de absorção em leito recheado (*packed bed*) com aminas. Ela funciona por meio do contato em contracorrente do solvente com o gás exausto em uma coluna vertical recheada de materiais que promovem uma ampla área de contato entre gás e solvente. Ao final deste contato, o gás com baixíssimo teor de gás carbônico é recuperado no topo da coluna, enquanto o solvente, rico em CO₂, é retirado pela parte de baixo da coluna, sendo enviado para uma coluna de “stripping”, na qual ele é regenerado por meio de contato com vapor, enquanto o CO₂ é liberado na forma gasosa. Após a regeneração, o solvente pode ser recirculado para a coluna de absorção de leite recheado, completando assim o processo (BOOTH-HANFORD et al., 2014). Este processo é desenhado na Figura 3.

Outra desvantagem deste processo, além da alta demanda energética, é a alta demanda de espaço pela falta de compactação física, já que este arranjo necessita obrigatoriamente de duas colunas - uma de absorção e outra de regeneração do solvente - de tamanho considerável. De tal modo, foram desenvolvidas novas tecnologias que visam principalmente à intensificação em termos de espaço físico do processo (TAY et al., 2019).

Figura 3– Esquematização de absorção com leito recheado

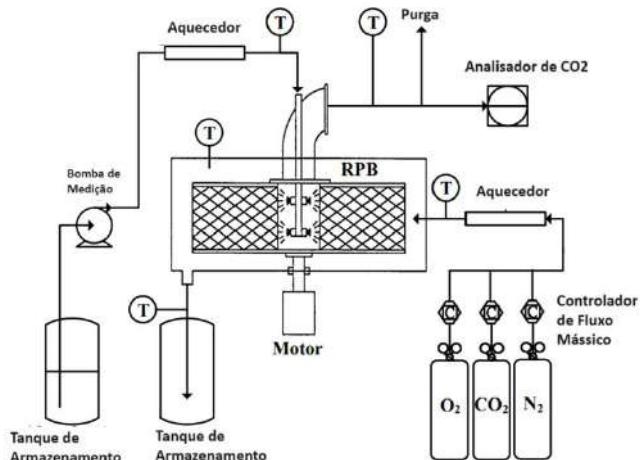


Fonte: Adaptado de Boot-Handford et al.. (2014)

Uma destas tecnologias é a utilização de leitos recheados rotativos. Neste arranjo, o leito recheado deixa de ser uma coluna tradicional e passa a possuir um rotor que promove a rotação do leito em torno de seu próprio eixo axial. Assim, o solvente é inserido no leito recheado pelo meio deste, sendo então rotacionado e expelido pela força centrífuga do leito recheado para uma “casca” externa. Já o gás rico em CO₂ entra pela casca externa e é direcionado para o interior do leito recheado rotativo, sendo coletado por uma saída em seu topo. A transferência de CO₂ para o solvente ocorre no meio do leito recheado rotativo, onde o solvente entra em contato com o gás. O solvente rico em dióxido de carbono é recolhido na parte interior da casca externa e enviado para a coluna de recuperação do solvente (YU et al., 2012). Considerando já o tamanho necessário para a instalação do rotor e seus equipamentos acessórios, o fator de intensificação volumétrico, quando comparado a um leito recheado tradicional, é de cerca de 12. Esta intensificação ocorre, pois, a rotação promovida pelo rotor cria gotículas de solvente, o que aumenta a área de contato do mesmo com o gás e por conseguinte melhora a transferência de massa do CO₂ (TAY et al., 2019). O esquema de absorção com leito rotativo é mostrado na Figura 4.

No entanto, o leito recheado rotativo também apresenta suas desvantagens, sendo a principal delas o consumo intensivo de energia em função do rotor (THIELS et al., 2016) e a persistente necessidade de utilização de duas colunas. Além disso, em função do rotor ser uma parte móvel, sua manutenção é custosa e deve ser realizada com alta frequência. Por fim, o equipamento apresenta ainda uma perda de carga significativa, o que pode implicar na necessidade de recompressão mais intensa do gás após a unidade de remoção de CO₂. (TAY et al., 2019).

Figura 4 – Esquematização de absorção de CO₂ utilizando leito recheado rotativo (Rotating Packed Bed)



Fonte: Adaptado de Yu et al. (2012)

Uma maneira inovadora de realizar a intensificação do processo de CO₂ é por meio da utilização de reator ultrassônico no qual o solvente é irradiado com ondas de frequência superiores a 20 kHz, de maneira a alterar suas propriedades físicas, promovendo a atomização e favorecendo, consequentemente, a transferência de massa e absorção do dióxido de carbono. No entanto, esta tecnologia ainda não foi desenvolvida para além de reatores em batelada, o que inviabiliza sua utilização para aplicações de exploração de gás natural (TAY et al., 2019).

Por outro lado, os processos de adsorção – onde o CO₂ é removido por uma superfície porosa com a qual possui afinidade –, embora já bem estudados e conhecidos, apresentam baixa eficiência na remoção de CO₂, baixa seletividade para o mesmo e pouca capacidade de suportar grandes vazões, o que os tornam pouco práticos para aplicações offshore. Por outro lado, a regeneração do adsorvente sólido é muitas vezes mais simples do que a regeneração de solventes líquidos, o que faz com que haja uma variedade de estudos que tentam, a partir da mudança de parâmetros operacionais, viabilizar sua empregabilidade em plataformas offshore para além da desidratação do gás natural. (VAZ JR. et al., 2022)

Por fim, o processo de remoção química se baseia na reação do CO₂ por meio de uma reação química com algum outro composto, gerando primariamente carbonatos. O grande interesse desse processo de remoção de CO₂ do gás de exaustão é que o carbonato é um produto final biodegradável e estável, dois princípios muito importantes da Química Verde. Além disso, diversos tipos de carbonato têm aplicações industriais, principalmente na indústria do cimento, o que tornaria o processo ainda mais interessante do ponto de vista da sustentabilidade. Uma série de estudos visando otimizar essa rota a partir de diferentes combinações de reagentes – além do cálcio puro- e parâmetros operacionais obtiveram bons resultados, mas a tecnologia ainda está longe de estar consolidada para qualquer aplicação offshore (VAZ Jr. et al., 2022).

2.2. CONTACTORES COM MEMBRANAS

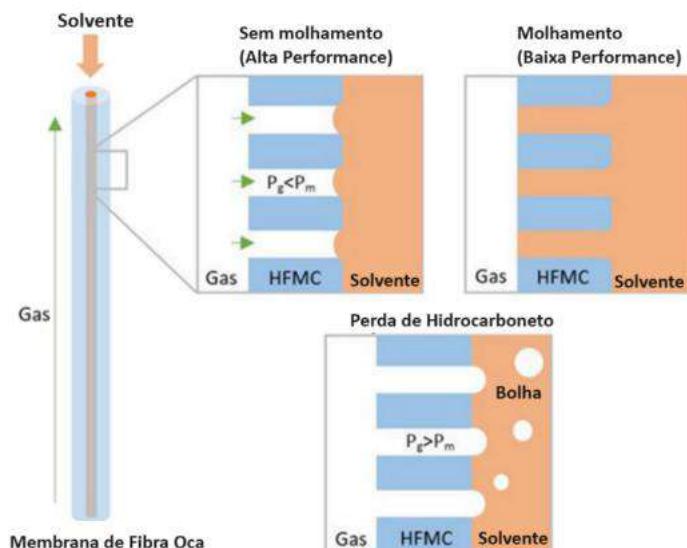
O processo de remoção de CO₂ em contactores com membranas combina as vantagens de compactação e facilidade de operação dos processos de contactores com a especificidade e seletividade dos processos de absorção. Nesse processo, uma membrana porosa separa o gás de exaustão do líquido absorvente, possibilitando o contato gás-líquido na interface formada nos poros da membrana, evitando a dispersão do gás na fase líquida. Nesta configuração, as

vazões das fases são independentes, não havendo formação de espuma e tornando o processo modular. Em termos de coeficiente global de transferência de massa, a literatura relata valores até 5 vezes maiores do que os encontrados para colunas absorvedoras. (KHAISRI et al., 2009).

A escolha do material da membrana é um parâmetro importante do dimensionamento do processo, uma vez que este deve ser termicamente estável e não reagir com nenhum dos componentes do gás ou do solvente (ZHAO et al., 2016). A principal vantagem em relação à absorção com coluna de leito recheado e leito rotativo é o menor gasto de energia adicional para realizar a intensificação do processo, já que não há nenhum rotor ou motor adicional em relação a uma coluna de leito recheada tradicional. Em termos de fator de intensificação, a literatura reporta valores desde 5 até 11 (TAY et al., 2019).

Já a principal desvantagem do contactor de membrana de fibra oca é a dificuldade para evitar o molhamento dos poros da membrana pelo solvente, o que obstrui os poros e aumenta a resistência para a transferência de massa. Esta dificuldade é ilustrada na Figura 5. Além disso, o pré-tratamento é uma necessidade visto que a presença de partículas finas pode obstruir os canais de escoamento e diminuir o desempenho do contactor (TAY et al., 2019).

Figura 5– Funcionamento de um contactor de fibra oca



Fonte: Adptado de Mosadegh-Sedghi et al., 2014

2.2.1. Parâmetros Operacionais

2.2.1.1. Escolha da Membrana

Conforme dito anteriormente, é natural que um dos principais parâmetros operacionais seja a escolha da membrana, visto que a sua existência é a base deste tipo de contactor. Dois fatores principais podem ser destacados como fundamentais na escolha do tipo de membrana: resistência à transferência de massa e estabilidade da membrana a longo prazo.

O estudo de Khaisri et al. (2009) comparou o desempenho de membranas de poli(fluoreto de vinilideno) (PVFD), poli(tetrafluor etileno) (PTFE) e polipropileno (PP). Os resultados indicaram que, em termos de facilitar a transferência de massa, a membrana de PTFE apresentou os melhores resultados, enquanto a membrana de PP, os piores. Em termos de resistência de longo prazo, a membrana de PTFE novamente performou melhor e foi capaz de performar durante 60 horas de operação contínua sem redução no desempenho da absorção. Embora a membrana de PTFE apresente os melhores resultados, seu preço elevado faz com que a membrana de PVFD se torne uma alternativa mais viável para a maioria das aplicações.

2.2.1.2. Arranjos de Fluxo Gás-líquido

Em relação ao design do contactor de membrana, algo importante a se considerar inicialmente é que o contactor pode ser configurado de maneira a fazer com que o gás passe por dentro do lúmen e o líquido por fora ou a configuração oposta, com o líquido circulando pelos tubos de membrana e o gás sendo injetado na casca do contactor. Este trabalho irá focar exclusivamente na variação com o gás sendo injetado na casca do contactor para que o tubo interno possa funcionar como um microcanal, além de que experimentalmente foi demonstrado que essa configuração tende a uma maior porcentagem de absorção de CO₂. Ademais, é comum o gás apresentar mais impurezas do que o líquido absorvente nas aplicações com gás natural, evitando entupimentos desnecessários caso o gás passasse no lúmen das membranas. (ZHANG et al., 2014).

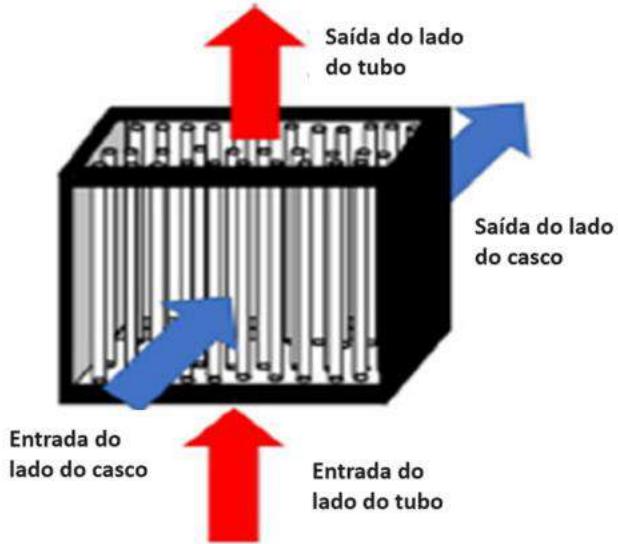
Um arranjo comumente encontrado na literatura é o arranjo longitudinal, no qual os fluxos de gás e de líquido escoam em paralelo. Naturalmente, esse tipo de arranjo se destrincha em duas possibilidades, ou seja, com o escoamento ocorrendo em contracorrente ou co-corrente. Como era esperado, experimentalmente o arranjo em contracorrente apresenta

uma eficiência significativamente maior em função do gradiente de concentração elevado em todo o comprimento do contactor, sendo mais utilizado do que o escoamento na mesma direção na realidade industrial.

As vantagens do arranjo longitudinal são a facilidade de fabricação do contactor, além dos extensos estudos teóricos acerca de sua fluidodinâmica e transferência de massa. No entanto, esse tipo de arranjo pode facilmente gerar escoamentos não uniformes no lado do gás (casca do contactor) em função de imprecisões na construção do banco de tubos, além de uma perda de carga que pode ser relevante.

Uma alternativa interessante ao arranjo de fluxos longitudinal é o arranjo cruzado, no qual o escoamento de gás no tubo se dá de maneira perpendicular ao escoamento de líquido pelos tubos, conforme mostrado na Figura 6. Esse arranjo apresenta eficiência superior ao arranjo longitudinal, além de menor perda de carga e escoamento facilitado. (IMTIAZ et al., 2023)

Figura 6 – Escoamento Cruzado em Contactor de Membrana



Fonte: Adaptado de Zhang et al.. 2014

2.2.1.3. Escolha do solvente

Juntamente à escolha da membrana, a decisão acerca do solvente líquido que irá realizar a captura é fundamental para o bom funcionamento do contactor, já que é naturalmente um dos maiores gargalos na eficiência da unidade. Há dois tipos de solventes a serem escolhidos – físicos ou químicos -, sendo normalmente utilizados solventes químicos

em função de sua maior eficiência, embora os preços possam ser mais elevados. No caso de solventes físicos, quase universalmente se trata de água em função de disponibilidade e custo.

Da mesma maneira que outras aplicações de remoção de CO₂ por absorção, a maioria dos solventes utilizados e dos estudos desenvolvidos se baseiam em solventes de soluções aquosas de aminas, que possuem alta afinidade com CO₂. Uma análise numérica feita por Wang et al. (2004) com dietanolamina (DEA), 2-amino-2-metil-1-propanol (AMP) e metildietanolamina (MDEA) mostrou que as duas primeiras soluções possuem uma capacidade de absorção de CO₂ altamente superior à solução de MDEA.

Em um outro estudo, Sun et al. (2015) realizou experimentos com soluções alcalinas de maneira mais abrangente – não se limitando apenas a compostos com aminas –, sendo a solução com maior eficiência de absorção a com hidróxido de sódio, seguida de monoetanolamina (MEA), DEA e trietanoamina (TEA). Já o estudo de Ahmad et al. (2009) testou a capacidade de absorção de um contactor de membrana PVDF com AMP como solvente para captura do CO₂, chegando a encontrar valores de coeficiente de transferência de massa K na ordem de grandeza de 10⁻³ quando utilizado CO₂ puro como gás em alta pressão, vazão total baixa e uma alta concentração de AMP.

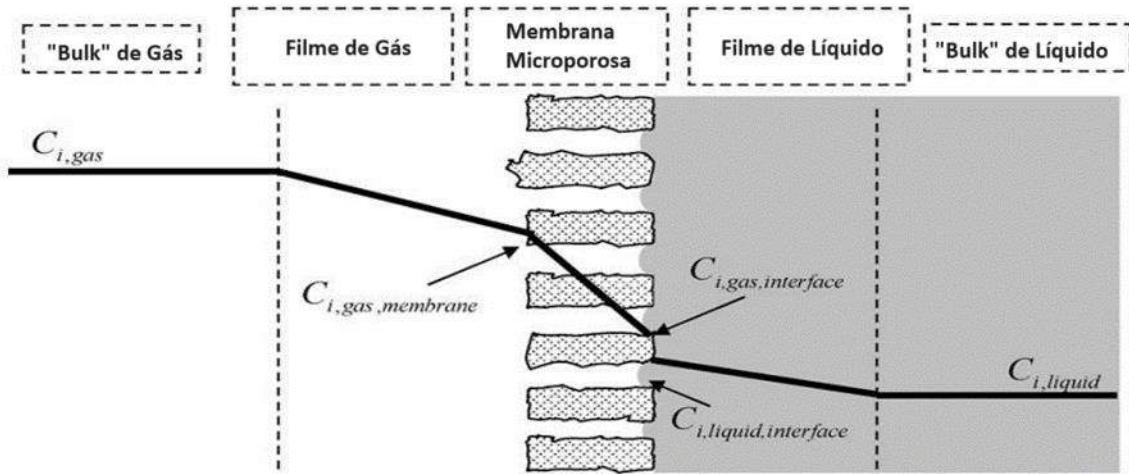
Um outro aspecto a ser considerado em se tratando de contactores com membrana é que o solvente não deve interagir de maneira negativa com a membrana, ou seja, não deve provocar de modo algum a degradação da membrana a partir de reações com a mesma ou interações físicas.

Um estudo comprehensivo realizado por Dindore et al. (2004) com uma série de membranas poliméricas e solventes orgânicos e inorgânicos mostrou que apenas as membranas de polipropileno e PTFE foram capazes de suportar a interação com solventes orgânicos sem apresentarem um nível inaceitável de degradação. Além disso, o mesmo estudo concluiu que a combinação solvente/membrana entre carbonato de propileno e polipropileno mostrou possuir a melhor relação custo-benefício dos sistemas analisados.

2.2.2. Transferência de Massa em Contactores de Membrana

Para o desenvolvimento da modelagem do contactor de membrana de fibra oca, a Figura 7 mostra esquematicamente a distribuição das fases gasosa e líquida, assim como o perfil de concentração esperado para o componente absorvido pela fase líquida.

Figura 7– Representação da Transferência de Massa em Contactor de Fibra Oca



Fonte: Adaptado de Zhang et al., 2008

Considerando o modelo de resistências em série para a transferência de massa em estado isotérmico e estacionário, em comparação com a absorção convencional, a existência de uma membrana microporosa que separa a região de gás da região líquida adiciona uma nova resistência ao processo, além das resistências ao transporte já existente nas fases gasosa e líquida. A equação usual para descrever a relação entre os coeficiente de transferência de massa para o CO₂ é:

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{E k_l} + \frac{1}{k_m} * \frac{RT}{H} * \frac{d_i}{d_o} + \frac{1}{k_g} * \frac{1}{H} \frac{d_i}{d_o} \quad (1)$$

Sendo K_L o coeficiente global de transferência de massa definido para a fase líquida, k_l o coeficiente de transferência de massa no líquido, k_g o coeficiente de transferência no gás, k_m o coeficiente na membrana, E representa a contribuição da reação química envolvida na absorção de CO₂, H é o coeficiente de Henry, d_i e d_o são os diâmetros interno e externo da membrana de fibra oca, R é a constante dos gases e T a temperatura do processo. Para estimar o coeficiente global e calcular o fluxo de remoção de CO₂ é necessário determinar os coeficientes de transferência de massa na membrana, nas fases gasosa e líquida.

O coeficiente de transferência na membrana está relacionado mais às características físicas e morfológicas da membrana do que às demais variáveis do processo, conforme observa-se na seguinte equação:

$$k_m = \frac{D_{CO_2-poro}}{\delta} * \frac{\varepsilon}{\tau} \quad (2)$$

Sendo D_{CO_2-poro} a difusividade efetiva do CO₂ dentro dos poros da membrana, ε a porosidade, δ a espessura e τ da tortuosidade da membrana.

Já para os coeficientes de transferência na fase gasosa e na fase líquida, pode-se utilizar correlações baseadas no número de Sherwood, que relaciona o número de Reynolds e o número de Schmidt, como observado nas seguintes equações para a fase gasosa:

$$Sh_g = \frac{k_g}{D_{CO_2-casco}} * d_c \quad (3)$$

E para a fase líquida:

$$Sh_l = \frac{k_l^*}{D_{líquido-lumen}} * d_h \quad (4)$$

Nesse caso, k_l^* representa o coeficiente de transferência de massa do lado líquido apenas quando há absorção física. Na maioria dos casos há também participação da absorção química, quando o CO₂ entra em contato com o solvente. Portanto, para levar em conta a absorção química também, utilizam-se as expressões abaixo:

$$k_l = E k_l^* \quad (5)$$

$$E = \frac{r_{químico}}{r_{físico}} \quad (6)$$

Onde r (químico ou físico) representam as taxas de absorção. Para estimar o número de Sherwood (gasoso e líquido) de maneira a podermos de fato utilizar as correlações acima para determinar os coeficientes de transferência de massa, o trabalho de Zhang et al. (2014) lista de maneira extensa diversas correlações que podem ser utilizadas tanto para a fase líquida quanto para a gasosa e suas condições de uso.

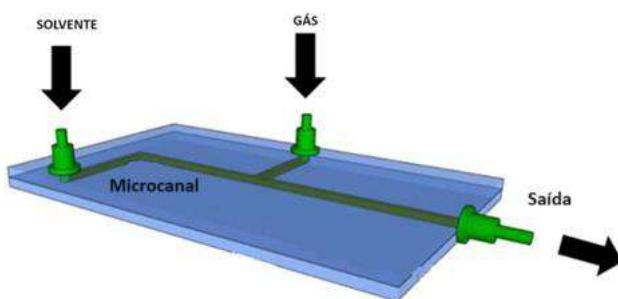
2.3. ABSORÇÃO EM MICROCANAIS

2.3.1. Introdução a microcanais

Nos processos de absorção em leito recheado, o controle da transferência de massa é dificultado pela forma em que ocorre o contato entre as fases. Desta forma, considerando-se que um dos princípios mais básicos da transferência de massa é que a vazão da substância que é transferida é diretamente proporcional à área de contato entre as fases, surge a ideia de realizar a absorção por meio de microcanais, que são microestruturas que permitem uma área específica de transferência até 3 vezes maiores do que métodos tradicionais, possibilitando uma grande compactação espacial (YIN, 2022).

Microcanais são definidos pela literatura com diâmetro hidráulico entre 10 e 700 micrômetros, não havendo consenso em relação a uma faixa específica de valores para o diâmetro hidráulico. Em termos de geometria, os microcanais podem ser circulares ou não. No caso dos não-circulares, é normal que haja uma junção na entrada do microcanal, podendo ser esta na forma de Y, de T ou concêntrica, de maneira a permitir que haja escoamento de cada fase de maneira separada antes da entrada no microcanal (SATTARI-NAJAFABADI et al., 2018). A Figura 8 mostra de forma esquemática o desenho de um microcanal que possibilita o contato gás/líquido.

Figura 8– Desenho esquemático de um microcanal



Fonte: Adaptado de Janati et al. (2021)

2.3.2. Regimes de Escoamento

Um dos principais fatores que irão influenciar na transferência de massa em microcanais entre as fases gás/líquido é o regime de escoamento de ambas as fases.

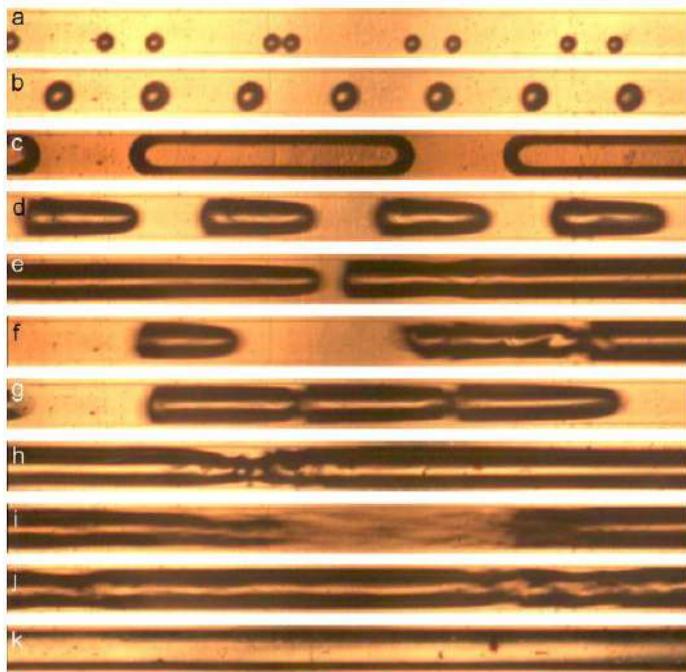
Diferentemente de canais convencionais, em função do diâmetro do canal, a tensão superficial pode ser mais significativa do que a força gravitacional na determinação do escoamento das fases. Embora haja discordância na literatura acerca dos diferentes tipos de escoamento e, principalmente, o momento de transição entre os mesmos, pode-se distinguir quatro modos de escoamento presentes no caso de absorção gás-líquido (SHAO et al., 2009) (YUE et al., 2008) (DONG et al., 2019):

- Escoamento em bolha (*bubble flow*): caracterizado quando a vazão da fase gasosa é significativamente inferior à da fase líquida, fazendo com que o gás se disperse na forma de pequenas bolhas ao longo da fase líquida.
- Escoamento intermitente (*slug flow*): também conhecido como escoamento de Taylor, é considerado o escoamento ótimo para a transferência de massa, já que a formação dos *slugs* faz com que a fase líquida seja separada por regiões intermitentes interconectadas apenas por uma camada finíssima de líquido, onde há favorecimento da transferência de massa. A rotação axial neste tipo de escoamento não é alta, porém há considerável rotação radial nas regiões da fase líquida.
- Escoamento turbulento (*churn flow*): ocorre quando os *slugs* começam a coalescer em função do aumento da turbulência no escoamento.
- Escoamento anular (*annular flow*): caracterizado por uma fase escoando de maneira cilíndrica enquanto a outra fase circunda completamente a outra, separando-a da parede interior do microcanal.

O que define qual regime de escoamento acontecerá no microcanal é a relação entre o número de Weber do líquido e o número de Weber do gás (CHENG et al., 2023), sendo o número de Weber definido pela razão entre a força aerodinâmica que provoca a dispersão de bolhas e a força de coesão, relacionada com a tensão superficial, que tende a manter a fase coesa (PEAKALL, J.; WARBURTON, J., 1996). Naturalmente, é possível também identificarmos situações em que ocorre simultaneamente mais de um regime de escoamento, como o escoamento *slug-anular*, que se caracteriza como etapa prévia ao escoamento do tipo *churn*, em que já se identifica coalescimento dos *slugs*, porém em menor grau.

Na Figura 9 é possível identificar os seguintes tipos de escoamento: A) e B), escoamento em bolha; C) e D), escoamento de Taylor; E) e F), escoamento *slug* instável; G) escoamento *slug* em trem; H) escoamento *slug-anular*; I) e J) escoamento *churn*; K) escoamento anular.

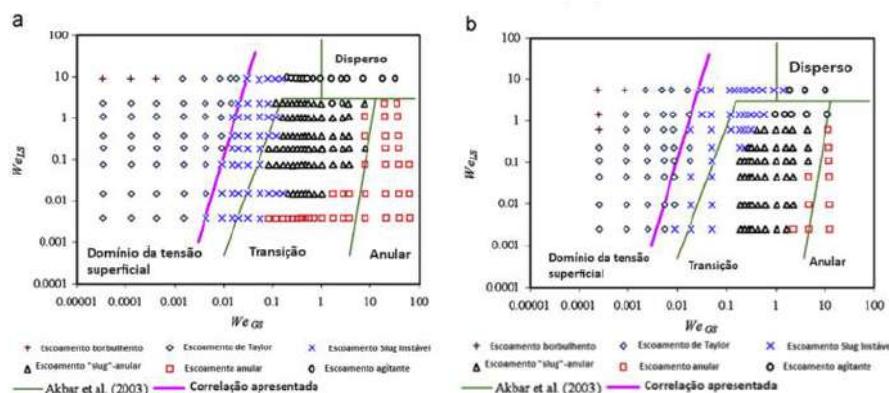
Figura 9– Fotos dos diferentes tipos de escoamento



Fonte: Yue et al. (2008)

É importante frisar também que o regime de escoamento não depende apenas da velocidade da fase gasosa e da fase líquida, mas também do diâmetro do microcanal. O estudo de Yue et al. (2008) comparou o impacto do diâmetro do microcanal no estabelecimento dos regimes de escoamento, comparando com a correlação experimental de Akbar et al. (2003) e a correlação do próprio estudo com os dados reais. Na Figura 10 o gráfico (a) à esquerda representa o mapa de escoamento para um microcanal com diâmetro de 667 micrômetros, enquanto gráfico (b) à direita representa o mapa para um com 400 micrômetros de diâmetro.

Figura 10– Mapas de Regime de Escoamento em Microcanais



Fonte: Adaptado de Yue et al. (2008)

2.3.3. Parâmetros Operacionais

Um dos principais parâmetros que determinam a eficácia da transferência de massa no sistema gás-líquido de absorção em microcanais são as vazões da fase gasosa e da fase líquida. Aghel et al. (2018) demonstraram para absorção de CO₂ que o aumento na vazão da fase gasosa diminui a recuperação da absorção do dióxido de carbono, o que resultaria numa fase gasosa com maior concentração de CO₂ ou em maiores comprimentos para o canal de escoamento. Por outro lado, o aumento na vazão do gás possibilita maior fluxo de transferência de massa, o que propicia uma quantidade absoluta maior de CO₂ sendo retirada. Portanto, este parâmetro operacional pode variar de acordo com o objetivo final do processo.

Em relação à vazão da fase líquida, o estudo de Niu et al. (2009) mostra que um aumento na velocidade superficial da fase líquida - o que é representativo de um aumento na vazão do solvente, já que a área do microcanal permanece inalterada ao longo de seu trajeto - promove uma maior absorção de CO₂. Uma possível explicação para isso é que, quanto maior a vazão do solvente, mais agitada será a fase líquida, o que promove naturalmente um aumento na transferência de massa do dióxido de carbono para o solvente. O estudo de Janati et al. (2021) não somente confirma que um aumento na vazão da fase líquida favorece a transferência de massa, como também que o aumento na vazão da fase gasosa dificulta o processo de absorção.

Outros dois parâmetros fundamentais para a operação de um sistema de absorção por microcanais são a temperatura e a pressão do sistema. Sabe-se que o aumento da temperatura da fase líquida promove uma transferência de massa mais eficaz para o solvente em função do aumento da difusividade e da cinética da reação que está envolvida. No entanto, o estudo de Niu et al. (2009) evidencia que o valor de 328 K seria o valor limite até onde a absorção é favorecida. Em temperaturas mais altas, a absorção é desfavorecida em função de uma drástica redução nos coeficientes de solubilidade de Henry, o que limita a transferência de CO₂ para o solvente. Em relação à pressão, observa-se um aumento da eficiência de remoção de CO₂ da fase gasosa em função do aumento na força motriz para a transferência de massa. Entretanto, para o CO₂ se observa um limite para a eficiência de remoção quando para pressão entre 0,5 e 0,6 MPa.

Por fim, a geometria dos microcanais é um parâmetro fundamental na eficiência do processo de absorção do CO₂. Alguns estudos indicam que uma redução no diâmetro hidráulico do microcanal favorece a transferência de massa do dióxido de carbono para a fase líquida, visto que há aumento da área específica de contato. Para microcanais retangulares,

dois fatores também são relevantes: o ângulo da junção dos tubos de inserção da fase gasosa e da fase líquida e o formato do microcanal. Quanto ao ângulo da junção, o que mais favorece a transferência de massa é o ângulo de 90°, já que as forças de cisalhamento são maiores neste ângulo e, portanto, as bolhas formadas são menores, favorecendo a transferência de massa entre as fases. Já quanto ao formato do microcanal em si, o microcanal em formato de arco pode chegar a ter um coeficiente de transferência de massa até duas vezes maior em relação ao microcanal com seção retangular (SATTARI-NAJAFABADI et al., 2018).

2.3.4. Efeito do solvente

A escolha do solvente a ser utilizado para a remoção de CO₂ do gás exausto é talvez o parâmetro mais fundamental para a absorção por meio de microcanais, já que as propriedades químicas e físicas do solvente influenciam tanto na absorção física, quanto na química, alterando diretamente os fluxos de transferência de massa de dióxido de carbono. Além disso, fatores econômicos e ambientais podem ter influência na escolha do solvente, ainda mais em condição *offshore*.

Embora uma variedade de solventes possa ser utilizada para a absorção de CO₂, na prática industrial os solventes mais utilizados são da família das alanolaminas - substâncias que possuem tanto grupo funcional amina quanto hidroxila ligados a uma cadeia carbônica saturada - em função de sua estabilidade, baixo custo e alta taxa de reação. Dentro da família das alanolaminas, podemos distinguir entre alanolaminas primárias, secundárias, terciárias e estericamente impedidas (YIN et al. 2022). Os resultados são similares aos encontrados para contactores de membrana apresentados anteriormente.

Yin et al. (2022) estudaram a eficiência da absorção de CO₂ com a utilização de AMP, uma alanolamina estericamente impedida, misturada com diferentes co-solventes: água, etileno glicol, dietileno glicol (DEG) e trietilenoglicol (TEG). Os autores observaram que a absorção aumenta de maneira inversa com a solubilidade do co-solvente em AMP, sendo a mistura AMP-TEG a mais eficaz. No entanto, em termos de eficácia energética, os pesquisadores indicam que a mistura AMP-água é a mais eficaz, já que é a mistura menos viscosa e que gera menor perda de carga.

O estudo de Janati et al. (2022) buscou identificar se a utilização de misturas de alanolaminas primárias com secundárias ou terciárias seria uma maneira eficiente de realizar a absorção de CO₂ em microcanais. Em condições ótimas, o estudo encontrou que a mistura de MEA com DEA pode apresentar uma eficácia de cerca de 98% na remoção de CO₂,

enquanto a mistura de MEA com TEA chega a cerca de 90% de eficiência, o que mostra o poder que a absorção por microcanais utilizando solventes de alcanolaminas pode atingir. Já o estudo de Aghel et al. (2018) indica que a utilização de MEA como solvente puro pode chegar, em condições ideais, a uma absorção de 100% de CO₂, além de um coeficiente de transferência de massa da fase gasosa de cerca de 4 a 5 vezes maior do que outros valores reportados na literatura.

Uma alternativa à utilização de alcanolamina são as soluções aquosa de sais de sódio de aminoácidos, tais como L-valina, glicina, L-alanila e treonina. No estudo de Zhang et al. (2022), foi descoberto que a glicina é aquela que possui a maior eficiência entre os demais aminoácidos.

2.3.5. Abordagem Teórica

Para realizar a modelagem da transferência de massa do CO₂ em direção ao solvente em um microcanal, frequentemente, considera-se apenas a absorção física, ou seja, aquela que ocorre única e exclusivamente em função do gradiente de concentração de CO₂ entre o gás e o líquido. No entanto, quando se compara os resultados deste tipo de modelagem com os resultados experimentais, percebe-se uma diferença significativa no coeficiente de transferência de massa. Esta diferença se dá em função de que a absorção - para a maioria absoluta dos solventes - não se dá exclusivamente de maneira física, tendo também participação fundamental a reação química entre o solvente e o CO₂.

Desta forma, pode-se dividir a modelagem deste processo em duas etapas principais:

- A modelagem do escoamento gás/líquido em si, de maneira a determinar as características do escoamento, tais como tamanho das bolhas de gás, da lâmina entre as bolhas e a parede do microcanal e o campo de velocidade do líquido e do gás.
- A modelagem da transferência de massa entre o dióxido de carbono na bolha de gás e o solvente.

Para o primeiro ponto, há diversas possibilidades, tais como a utilização de correlações empíricas ou semiempíricas, números adimensionais para aproximar características do escoamento ou ainda a modelagem via CFD (*Computational Fluid Dynamics*) a partir da equação da continuidade e da equação de Navier-Stokes. Para o segundo ponto, deve ser considerada tanto a difusão interna do CO₂ na própria bolha de gás, quanto a difusão de CO₂ da fase gasosa para a fase líquida. A grande diferença entre todas as modelagens que podem

ser encontradas na literatura, naturalmente, são as considerações que foram feitas, ou seja, que efeitos foram levados em conta como relevantes e que outros efeitos foram considerados como desprezíveis.

Van Baten e Krishna (2004) realizaram simulações a partir de CFD para estimarem o coeficiente global de transferência de massa. No entanto, para simplificar a simulação via CFD, considerou-se que a geometria da parte inicial e final de cada bolha eram perfeitamente hemisféricas, o que pode levar a desvios dos valores encontrados experimentalmente. Yue et al. (2008) sugeriram um modelo capaz de se adaptar a diferentes tamanhos e dimensões de bolhas, além de não considerar a fase gasosa como uniforme em termos de concentração, o que permite uma utilização mais abrangente.

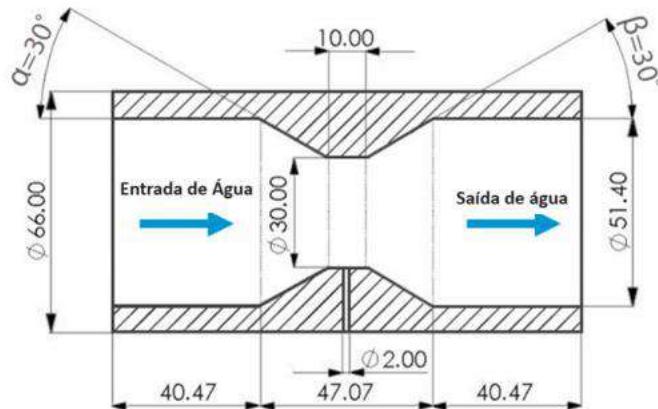
Dong et al. (2020) realizaram um estudo aprofundado para a modelagem da absorção de CO₂ em microcanais levando em conta a absorção química, o que em teoria poderia levar a resultados mais próximos daqueles levantados experimentalmente. Considerou-se que a gravidade não impacta significativamente no escoamento, que o escoamento seria laminar e que o tamanho de bolha permanece constante ao longo de todo o escoamento. Ao comparar os resultados da simulação com aqueles que podem ser obtidos utilizando fórmulas semiempíricas, é perceptível que os resultados são similares, o que pode indicar que este modelo seria adequado para descrever a absorção de CO₂ em microcanais.

2.4. FORMAÇÃO DE MICROBOLHAS EM VENTURI

2.4.1. Descrição geral

O chamado efeito Venturi é conhecido desde o final do século 18, sendo caracterizado pela variação de pressão de um fluido em que a seção transversal subitamente diminui e em seguida retorna ao seu tamanho original. Em função da equação de Bernoulli que rege a fluidodinâmica, na área de menor seção transversal – em que a velocidade é maior, já que a vazão ao longo do tubo não se altera – a pressão também é menor, enquanto nas áreas com maior seção transversal a pressão é proporcionalmente maior (HUANG et al., 2020). A Figura 11 mostra um exemplo genérico de tubo Venturi:

Figura 11- Tubo Venturi



Fonte: Adaptado de Sakamatapan et al. 2021

De maneira geral, a rápida “compressão” sofrida pelo fluido quando a seção transversal retorna ao seu tamanho original é o fator que provoca a quebra das bolhas de gás em microbolhas de diâmetro bastante reduzido (NOMURA et al., 2011). É interessante também notar que, em função das características hidrodinâmicas de uma mistura gás-líquido, a velocidade sônica é menor do que aquela encontrada somente no líquido ou no gás, podendo atingir valores como 20m/s. Portanto, uma maior eficiência na formação de microbolhas é perceptível quando a velocidade da mistura atinge o patamar de supersônica (JIANG et al., 2021).

Se compararmos com outros métodos de geração de bolhas, os tubos Venturi possuem duas grandes vantagens: são capazes de formar de maneira consistente microbolhas com diâmetro médio de 100 micrômetros e são eficientes em termos energéticos, consumindo uma quantidade menor de energia do que outros métodos que envolvem partes rotativas e de alta manutenção (HUANG et al., 2020).

2.4.2. Parâmetros Operacionais

Para se avaliar o desempenho de um gerador de bolhas Venturi, os principais parâmetros a serem avaliados são o diâmetro médio das bolhas e sua distribuição de tamanhos, que normalmente possui a forma de uma distribuição log-normal (HUANG et al., 2020). Para o diâmetro médio das bolhas, os estados de Gabbard (1972) foram recentemente confirmados por Yin et al. (2015) e Sun et al. (2017), levando à relação abaixo:

$$\frac{d_v}{D_{th}} \propto \left(\frac{g_c \sigma \rho_l D_{th}}{\mu_l^2} \right) Re_{l,th}^{-1.1} \quad (7)$$

Sendo: d_v , diâmetro médio das bolhas; D_{th} , diâmetro da seção transversal estreita; ρ_l , densidade do líquido; g_c , constante de proporcionalidade; σ , tensão superficial, $Re_{l,th}$, número de Reynolds do líquido na seção estreita do Venturi; μ_l , viscosidade dinâmica do líquido.

Conforme mostrado pelos estudos de Huang et al. (2019) e Sun et al. (2017), a vazão de líquido e de gás tem papel fundamental tanto na distribuição de tamanho de bolhas quanto em seu diâmetro médio. De maneira geral, um aumento relativo da vazão de líquido é capaz de gerar uma distribuição de bolhas mais uniforme e um diâmetro médio de bolha menor, enquanto um aumento relativo da vazão de gás gera o efeito inverso. Assim, é fundamental o controle de ambas as vazões na geração de microbolhas para que se obtenha o resultado desejado.

Naturalmente, a geometria do Venturi afeta também a formação de bolhas. Aspectos como diâmetro hidráulico de entrada e saída, ângulo convergente e divergente e tamanho da seção estreita podem impactar no diâmetro médio e distribuição de tamanho de bolas em um Venturi. De maneira geral, o que se encontra é que um maior ângulo divergente e uma menor relação entre diâmetro da seção transversal estreita e seção transversal divergente produzem bolhas de diâmetro menores do que outras configurações (HUANG et al., 2020). A correlação de Zhao et al. (2019) é uma versão modificada da de Gabbard (1972) e leva em conta o ângulo divergente (β) para determinar o diâmetro médio das bolhas (d_v) utilizando uma constante C de correlação:

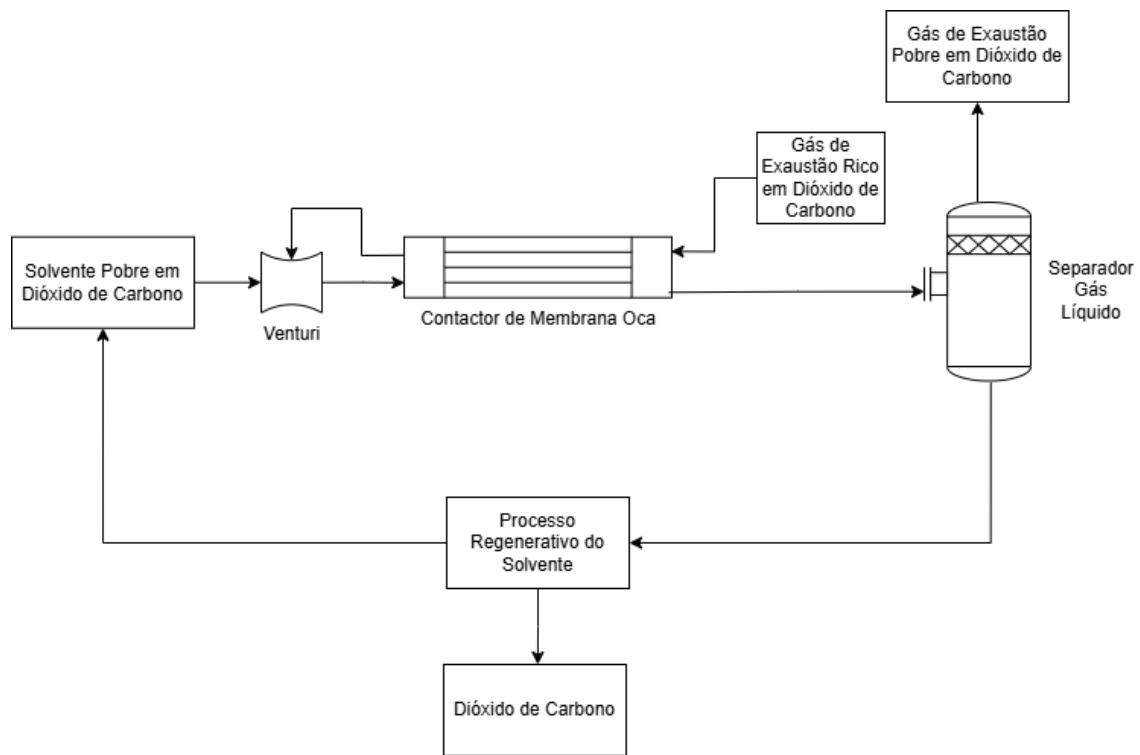
$$\frac{d_v}{d_{th}} = C Re_{l,th}^{-[1.1 + \left(1 - e^{-\frac{\beta}{90}}\right)]} \quad (8)$$

3. METODOLOGIA E OBJETO DE ESTUDO

O objetivo deste trabalho é verificar a viabilidade de um processo integrado de absorção de CO₂ do gás de exaustão gerado após queima do gás natural em plataformas offshore para geração de energia, visto que o dióxido de carbono liberado pelo gás de exaustão corresponde a quase 70% das emissões de um navio *Floating, Production, Storage and Offloading* (FPSO).

O processo integrado consiste em um contactor de membrana de fibra oca, havendo uma primeira passagem do gás pelo casco do contactor e é absorvido pelo solvente que escoa pelo lumen da fibra. Em seguida, este gás é direcionado para um Venturi formador de bolhas dispersas no líquido solvente de CO₂, sendo esta mistura direcionada para o lumen das fibras oca do contactor, que funcionarão como um microcanal para absorção. Assim, o gás passará por duas etapas integradas de remoção de CO₂: a primeira delas no contactor de membrana no lado do casco e a segunda no lumen da fibra oca do contactor no qual o lumen atuará como um microcanal realizando a absorção do CO₂. Após essas duas passagens, a mistura de gás tratado e solvente rico em CO₂ passa para um vaso separador, e o líquido rico em CO₂ passará por processo regenerativo. A Figura 12 abaixo esquematiza a proposta:

Figura 12– Esquematização da Proposta do Trabalho de Conclusão de Curso



Fonte: Produção Própria

Antes de detalhar a metodologia e as demais considerações, é fundamental frisar que este trabalho não irá considerar nem realizar qualquer modelagem da etapa de regeneração de solvente nem da separação gás-líquido no caso, sendo o foco apenas a modelagem do processo integrado de remoção de CO₂ do gás de exaustão.

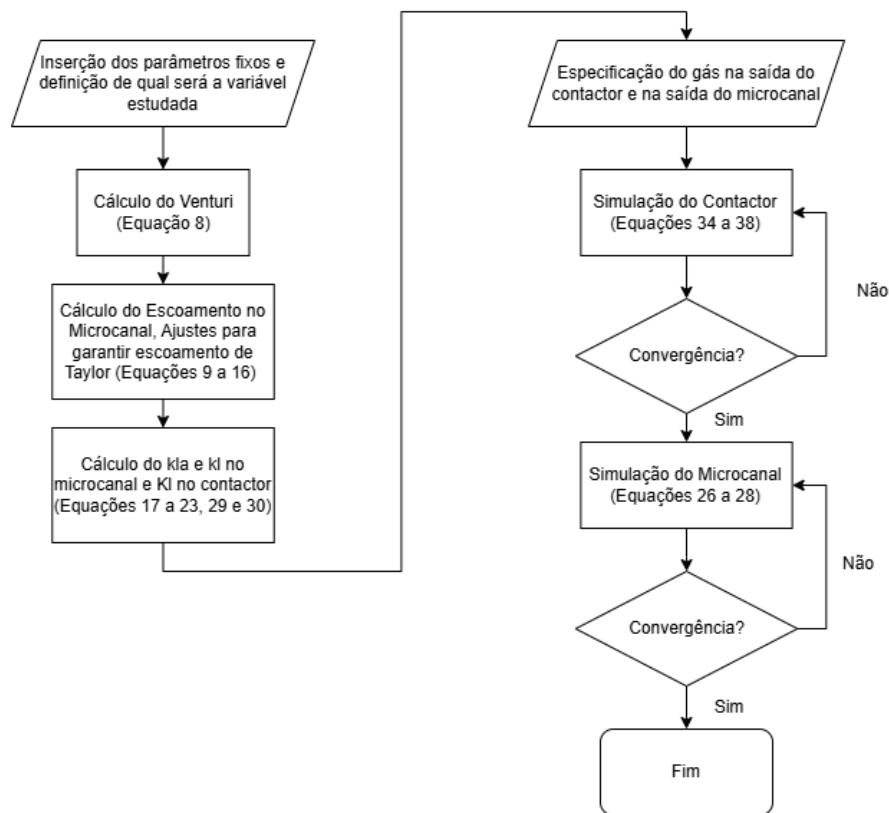
De maneira a entender-se bem o comportamento esperado de cada parte do sistema, realiza-se a simulação de cada componente do sistema – Contactor, Venturi e Microcanal – de maneira individual, em seções separadas, para, somente ao final destas simulações, realizar-se a simulação integrada. A primeira simulação individual a ser feita é a da formação de bolhas no Venturi. A equação utilizada é a equação (8) que correlaciona o ângulo interno do Venturi, o número de Reynolds do líquido e o diâmetro do Venturi com o diâmetro médio das bolhas. O líquido será inicialmente a água. O objetivo é determinar uma maneira de se achar a vazão de líquido no Venturi compatível com a formação de um diâmetro médio de bolhas para o estabelecimento de um escoamento de Taylor em uma quantidade determinada de microcanais com diâmetro definido (lúmen das fibras ocas).

Para a absorção no microcanal, os trabalhos de Dong et al. (2020), Yue et al. (2007) e Sattari-Najafabadi et al. (2018) trazem uma série de correlações que podem ser utilizadas para este tipo de modelagem, principalmente em relação ao coeficiente volumétrica de transferência de massa (k_{la}). No entanto, deve ser ressaltado que estas equações possuem validade limitada em função do número de Reynolds, tanto do gás quanto do líquido, não podendo ser amplamente utilizadas sem provocar um grande desvio dos valores reais. Entretanto, estas equações são válidas para o estabelecimento da metodologia de cálculo do processo integrado. A composição do gás de exaustão inicial é conhecida, mas a composição na entrada do microcanal depende do processo a montante (contactor com membranas) e será admitida com um valor especificado na simulação individual do microcanal.

A modelagem da absorção inicial do gás no contactor é realizada a partir de estudo de Mendes (2017,2024) e Van Baten e Krishan (2004). Os resultados obtidos são utilizados para o cálculo das condições de entrada nos microcanais.

Por fim, para a simulação integrada, demonstra-se na Figura 13 em linhas gerais a lógica computacional implementada:

Figura 13 – Esquematização do cálculo computacional



Fonte: Produção Própria

Após a simulação integrada, realiza-se uma etapa final de dimensionamento do contactor a partir de comparação com o modelo comercialmente disponível Liqui-Cel™ EXF-14x40 da 3M™ e análise técnico-econômica para verificar se o sistema é economicamente viável ou não.

Para a simulação integrada e individuais, foi utilizada linguagem de programação Python na versão 3.11.10 e método numérico Runge-Kutta. Todas as imagens deste Trabalho de Conclusão de Curso produzidas pelo autor foram geradas com esta linguagem e transcrevem-se nos Apêndices os códigos que contêm método numérico implementado.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1. MODELAGEM DO VENTURI E REGIME DE ESCOAMENTO NO MICROCANAL

Conforme mencionado anteriormente, a equação base para a modelagem do Venturi é a equação (8), que faz a correlação entre diâmetro da seção estreita do Venturi, ângulo divergente e número de Reynolds do líquido na garganta com o diâmetro médio resultante das bolhas.

A principal consideração feita para esta modelagem é que a passagem pelo Venturi ocorre de maneira rápida o suficiente para que não ocorra qualquer tipo de processo de absorção no equipamento, ou seja, a única interação entre as duas fases ocorre no âmbito da mecânica dos fluidos para formação das bolhas. Em relação aos parâmetros acima mencionados, o único que é fixado inicialmente será o diâmetro divergente (30°), pois, conforme estudo de Sakamatapan et al. (2021), é o ângulo que produz microbolhas com menor diâmetro dentre a faixa entre 0° e 45° .

Para o cálculo do número de Reynolds, foi utilizada a fórmula abaixo para levar em conta o impacto da porcentagem de gás na seção estreita do Venturi na velocidade do líquido:

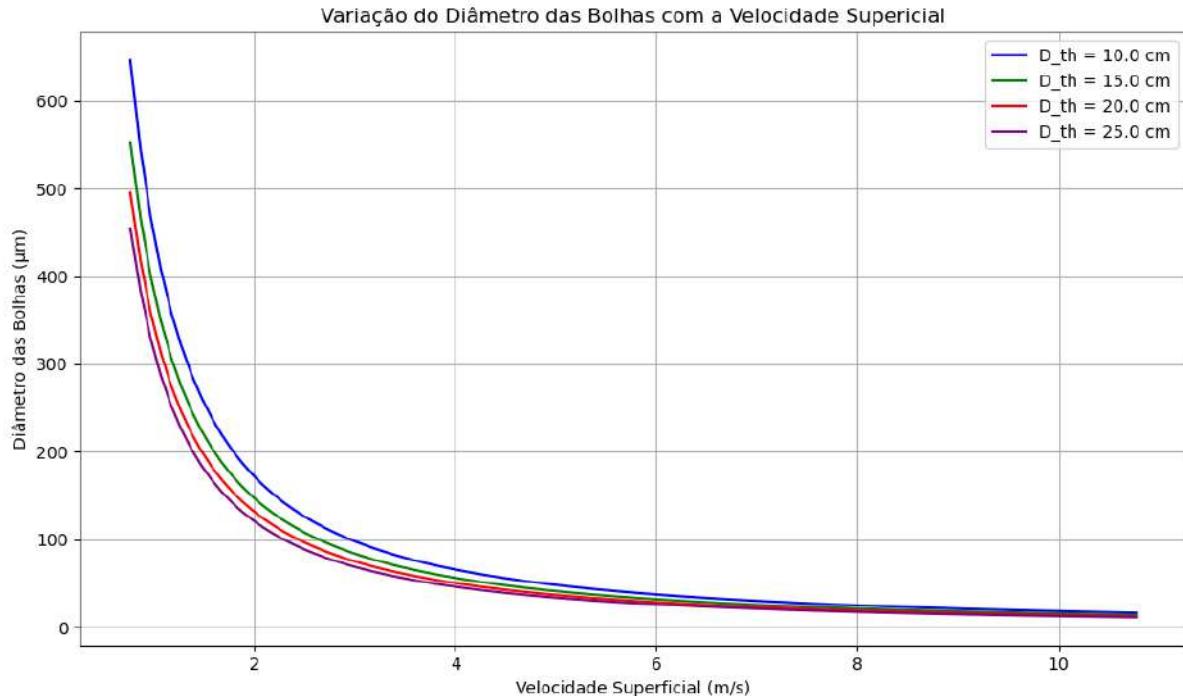
$$Re_{l,th} = \frac{\rho * d_{th} * \frac{v_l}{(1 - \% \text{ de gás})}}{\mu} \quad (9)$$

Como o gás é inserido num Venturi na seção estreita, o percentual de gás em relação ao volume total impacta na velocidade do líquido, visto que parte do diâmetro da seção será ocupada por este gás. Portanto, o líquido irá acelerar mais do que o previsto, fazendo-se necessária esta correção. Naturalmente, a mesma pode ser desprezada a depender do percentual de gás considerado no Venturi.

Para esta modelagem, o percentual de gás também foi considerado fixo em 35%. Embora o estudo de Vilaida et al. (2019) mostre que percentuais menores produzem microbolhas de menor diâmetro, este percentual foi fixado para atender à necessidade de uma vazão maior de gás relativa à quantidade de absorvente utilizado. A validade deste percentual para uma escala industrial será verificada uma vez que seja realizada a integração do sistema. O processo foi considerado operando a 20°C e a densidade de água foi considerada como 997 kg/m^3 .

Simulou-se então a equação supracitada para verificar o impacto da variação da velocidade corrigida de líquido. Foram traçadas 4 curvas, representando 4 diâmetros diferentes da seção estreita: 10cm, 15cm, 20cm e 25cm, conforme Figura 14:

Figura 14 - Impacto da velocidade superficial da fase líquida no diâmetro médio das bolhas produzidas



Fonte: Produção Própria

A partir da Figura 14, podemos notar dois efeitos interessantes: o primeiro deles é que, conforme esperado pela própria forma da equação, o aumento da velocidade da fase líquida provoca diminuição – de maneira exponencial – do diâmetro médio das microbolhas. Isto ocorre pois o número de Reynolds, que depende de maneira diretamente proporcional da velocidade, está elevado a um expoente negativo menor do que 1 na equação. De tal maneira, o aumento de velocidade na faixa de 0 a 6m/s provoca impacto significativo no diâmetro médio das bolhas geradas, porém, a partir dos 6m/s, o aumento contínuo da velocidade passa a provocar cada vez menos impacto no diâmetro. O segundo efeito a ser notado é em relação ao diâmetro da seção estreita: de maneira similar à velocidade, o impacto do diâmetro da garganta é significativo na faixa 0 a 6 m/s e se reduz após os 6m/s.

Em relação à vazão, naturalmente esta é diretamente proporcional à velocidade corrigida e ao diâmetro da seção estreita. Portanto, a partir desta análise, vemos que, caso seja

necessário um grande aumento de vazão, sem que se deseje impactar de sobremaneira o diâmetro das microbolhas, é possível – a partir de 6 m/s – aumentar sem maiores problemas tanto a velocidade do líquido quanto o diâmetro da seção estreita, a depender, claro, da faixa de microbolhas a serem geradas.

A próxima etapa é entender o regime de escoamento no microcanal que se localiza em etapa imediatamente posterior ao Venturi. Será utilizada a correlação apresentada para a região onde ocorre fluxo de Taylor no microcanal na Figura 10, que possui a seguinte fórmula:

$$We_g < 0,0172We_l^{0,25} \quad (10)$$

We o número de Weber, correspondente a:

$$We = \frac{\rho * v^2 * d}{\sigma} \quad (11)$$

Sendo ρ a densidade do fluido, σ a sua tensão superficial, v a velocidade do fluido (velocidade relativa entre fase gasosa e líquida no caso da fase gasosa) e d , o diâmetro característico. Para ambos os números de Weber, o diâmetro característico é o próprio diâmetro do microcanal. Para a tensão superficial e densidade, será feita uma proporção entre os componentes do gás de exaustão, considerando 95% de ar e 5% de CO₂. A tensão superficial do CO₂ a 20°C é igual a do ar (0,072 N/m), conforme Lubketin et al. (1997). Já para a densidade, tem-se que a densidade do ar é de 1,204 kg/m³ e a densidade do CO₂ é de 1,997 kg/m³. Assim, a densidade da mistura será considerada como 1,244 kg/m³. A densidade da água será considerada como 997 kg/m³. Para a fase gasosa, iremos utilizar a velocidade relativa entre o líquido e o gás.

Substituindo (11) em (10), tem-se que:

$$\frac{\rho_g * (v_g - v_l)^2 * d_h}{\sigma_g} < 0,0172 \left(\frac{\rho_l * v_l^2 * d_h}{\sigma_l} \right)^{0,25} \quad (12)$$

Para calcular a velocidade do gás, irá ser utilizada a fórmula de Armand apresentada em Yue et al. (2008):

$$\varepsilon_g = 0,833 * \frac{v_g'}{(v_g' + v_l')} \quad (13)$$

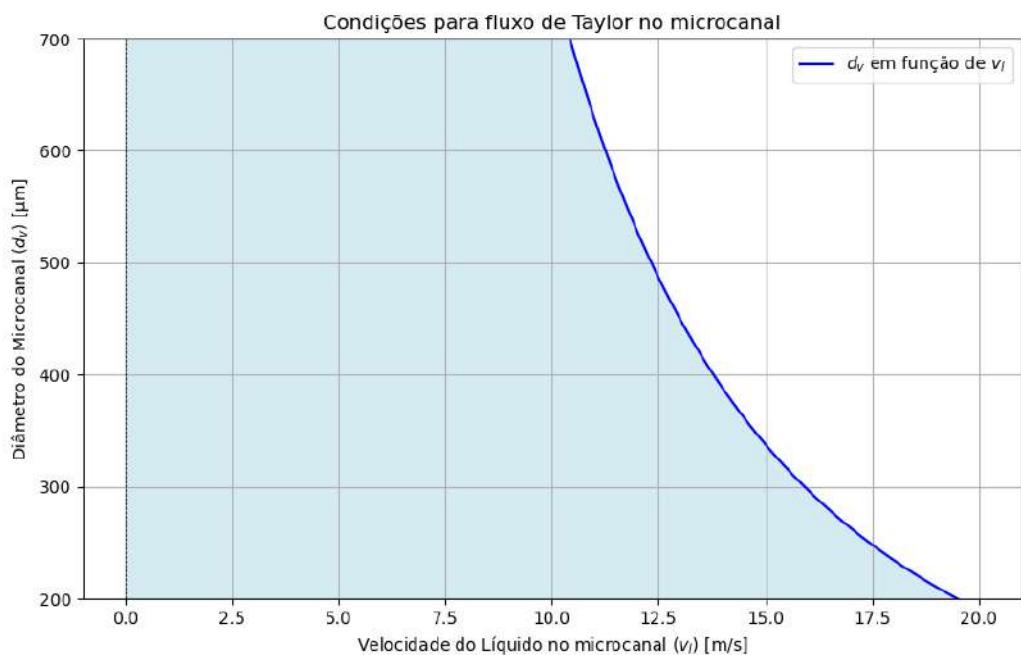
Sendo ε_g a porcentagem de gás relativo ao volume total, v_g a velocidade superficial do gás e v_l a velocidade superficial do líquido. Nota-se que, em função da estrutura da equação e da relação entre velocidade superficial e velocidade real, estas variáveis são intercambiáveis na equação (13).

Substituindo então (13) em (12):

$$\left(\frac{\varepsilon_g * v_l}{0,833 - \varepsilon_g} - v_l \right)^2 * \frac{d_h}{v_l^2} < \frac{\sigma_g}{\rho_g} * 0,0172 * \left(\frac{\rho_l * d_h}{\sigma_l} \right)^{0,25} \quad (14)$$

Em sua forma gráfica, a inequação é representada pela figura 15:

Figura 15 - Inequação que Representa Condições de Velocidade e Diâmetro do Microcanal para Existência de Fluxo de Taylor em Microcanal ($\varepsilon_g=0,35$)



Fonte: Produção própria

Portanto, como se pode perceber a partir do gráfico, uma grande gama de velocidades é permitida para diâmetros entre 700 e 200 micrômetros. É importante frisar que, caso se esteja utilizando razões volumétricas no microcanal próximas a 35%, uma boa margem de segurança deve ser considerada nesta transição entre o escoamento de Taylor e os demais regimes de escoamento, visto que a maioria dos estudos disponíveis não realiza testes para além de 2 a 3 m/s de velocidade do líquido e a maioria seja realizada com razões volumétricas de gás consideravelmente menores (Yue et al., 2007). No entanto, caso haja algum tipo de bomba de microbolhas após o Venturi, a razão volumétrica de gás pode diminuir significativamente em função da compressão do gás, o que desloca a curva acima para a esquerda, chegando em valores próximos aos da literatura e mitigando esta preocupação. Isto será analisado na simulação do processo integrado.

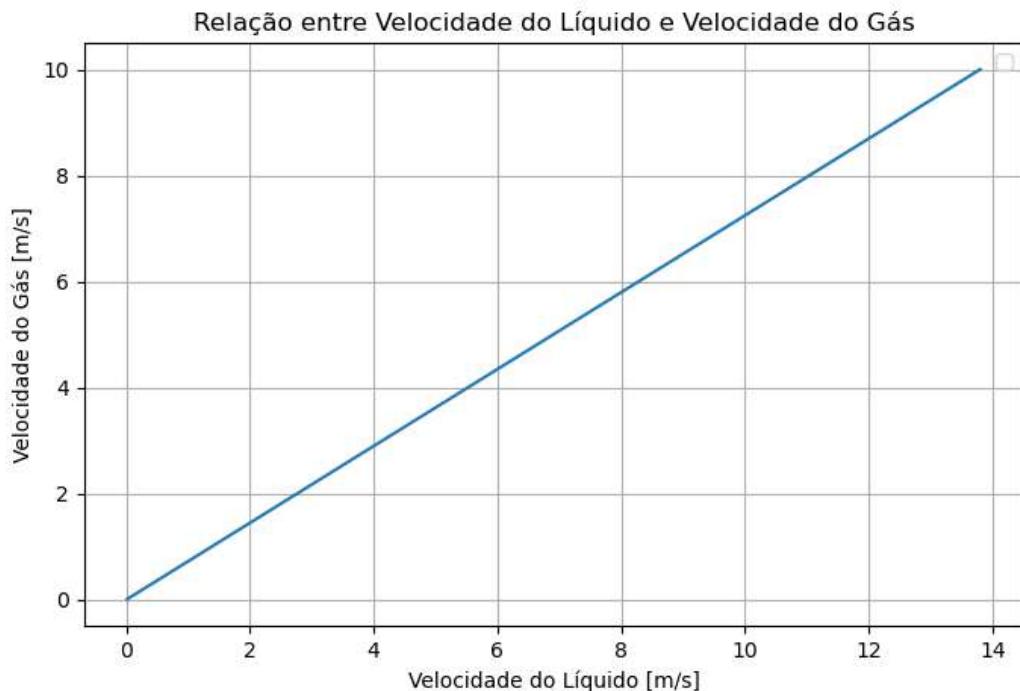
Finalmente, a vazão de entrada de líquido no Venturi deve ser escolhida de tal maneira a produzir bolhas de diâmetro similar ao diâmetro do microcanal – considera-se que não há coalescência de bolhas entre o Venturi e a entrada do microcanal, inicialmente não havendo compressão posterior - e respeitar a velocidade máxima do líquido no microcanal para produzir escoamento de Taylor e lembrando que a vazão no Venturi é dividida entre uma série de microcanais.

$$Q_{l,microcanal} = \frac{Q_{l,venturi}}{N^o \text{ de microcanais}} \quad (15)$$

A partir das equações (7) a (15), é possível realizar o ajuste dos parâmetros básicos do sistema, como número de microcanais, vazão na entrada do Venturi, diâmetro do Venturi, de maneira a promover o escoamento de Taylor no interior dos microcanais e maximizando a absorção de CO₂ pelo solvente. Assim, uma vez definido o diâmetro do microcanal, a velocidade máxima para o líquido no lúmen da fibra oca é definida pela Figura 14, que por sua vez define a vazão máxima nos microcanais. Além disso, é possível definir o diâmetro do Venturi e o número mínimo de microcanais que serão necessários para produzir Fluxo de Taylor, o que satisfaz os objetivos da modelagem inicial do Venturi.

Para facilitar a conversão das velocidades de líquido e gás no microcanal, a Figura 16 representa graficamente a equação (13), bastando saber os limites para cada uma, conforme a Figura 15.

Figura 16– Representação da Relação entre Velocidade Superficial de Líquido e de Gás para uma Razão Volumétrica de 35% de Gás



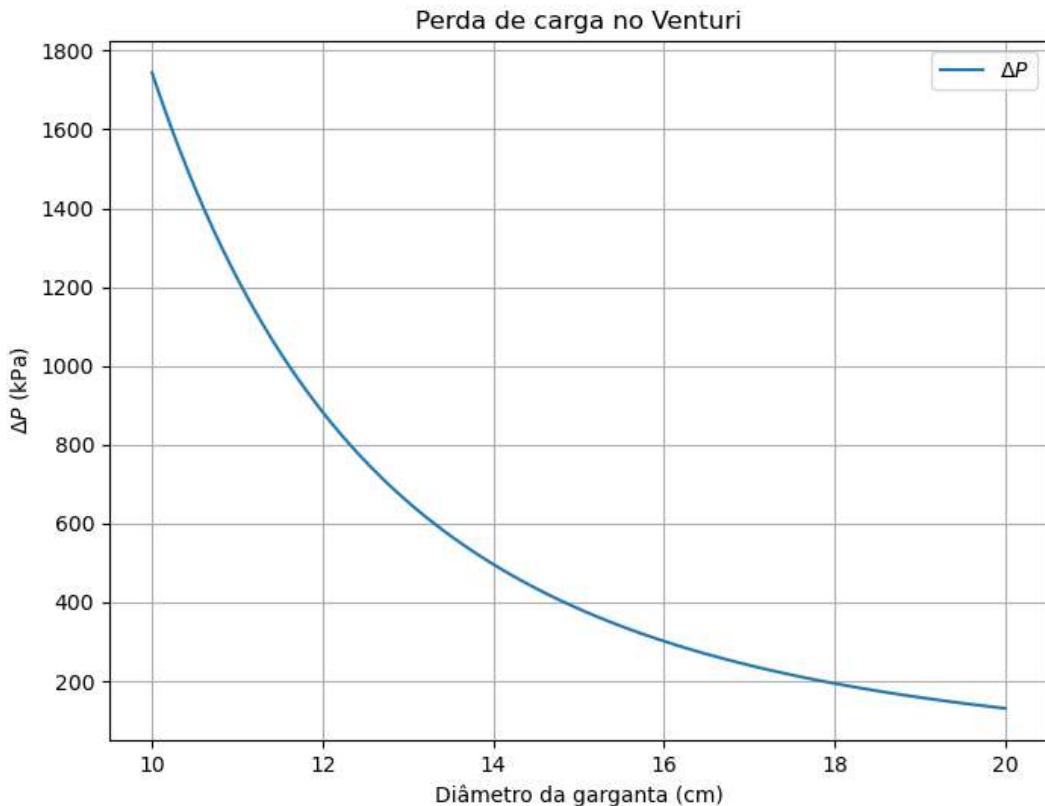
Fonte: Produção própria

Por fim, a perda de carga no Venturi deve ser calculada, visto que não é desprezível, sendo na realidade a força motriz do funcionamento do equipamento. Diversas correlações empíricas e semiempíricas existem na literatura, tendo sido escolhida a de Hesketh et al. (1972) para este caso em função de suas variáveis serem as que estão sendo estudadas neste trabalho:

$$\Delta P = 190 \rho_g * v_g^2 * a_{th}^{0,133} * \varepsilon_g^{0,78} \quad (16)$$

Sendo a_{th} a área da garganta em m^2 . O resultado já é expresso em kPa, conforme a Figura 17 abaixo, a partir da variação de diâmetro no Venturi:

Figura 17– Perda de Carga no Venturi (Vazão de Gás=0,1 m³/s, razão volumétrica de gás = 35%)



Fonte: Produção Própria

O resultado expresso é o esperado, já que o aumento no diâmetro da garganta para uma vazão fixa provoca a diminuição da velocidade, o que reduz de maneira significativa a perda de carga, visto que a velocidade está elevada ao quadrado na equação (16).

4.2. MODELAGEM DE ABSORÇÃO EM MICROCANAL

De início, o primeiro dado que será necessário determinar será o k_{1a} (coeficiente volumétrico da transferência de massa), possibilitando determinar a concentração de saída do CO₂ no gás ao final do microcanal e a quantidade absorvida.

Algumas hipóteses terão que ser admitidas, conforme abaixo:

- A transferência de massa é governada pela teoria de filme, ou seja, estabelece-se um filme tanto do lado gás quanto do lado líquido onde há gradiente de concentração;
- Não há interferência da absorção no contactor na absorção no microcanal;

- O escoamento é de Taylor e pistão (*plug flow*);
- A resistência à transferência de massa na fase gasosa é pequena comparada com a fase líquida, em função da agitação do gás no *slug*;
- Não ocorre transferência de massa no Venturi, ou seja, a concentração de CO₂ na entrada do microcanal na fase líquida é desprezível;
- O regime é estacionário e o fluxo é plenamente desenvolvido desde seu início;
- Embora haja absorção de CO₂ ao longo do escoamento, não haverá diminuição no volume da bolha de gás;
- A absorção é predominantemente física, sendo desprezível a contribuição da reação química.

Para se determinar o $k_l a$ e simular o escoamento, deve-se inicialmente escolher alguma das correlações disponíveis na literatura, respeitando sempre suas condições de utilização. Por exemplo, a equação de Bercic e Pintar (1997), mostrada abaixo, embora funcione bem para diâmetros na ordem de milímetros e razão volumétrica de gás próxima a 50%, apresenta resultados irrealistas e superdimensionados quando avaliada para microcanais com diâmetro em torno de 400 micrômetros e razão volumétrica de gás de 30 a 35%:

$$k_l a = 0.111 \frac{(v_l' + v_g')^{1.19}}{((1 - \varepsilon_g)L_{UC})^{0.57}} \quad (17)$$

A equação utilizada, portanto, é baseada em números adimensionais e apresentada em Yue et al. (2007):

$$Sh_l * a * d_h = 0.084 * Re_g^{0.213} * Re_l^{0.937} * Sc_l^{0.5} \quad (18)$$

Esta fórmula relaciona os números de Sherwood, Schmidt, e Reynolds do líquido, o número de Reynolds do gás, a área específica e o diâmetro hidráulico do microcanal. A definição de cada adimensional é dada abaixo:

$$Sh_l = \frac{k_l * d_h}{D_{CO_2}} \quad (19)$$

$$Re_l = \frac{v_l' * d_h * \rho_l}{\mu_l} \quad (20)$$

$$Re_g = \frac{v'_g * d_h * \rho_g}{\mu_g} \quad (21)$$

$$Sc_l = \frac{\mu_l}{\rho_g * D_{CO_2}} \quad (22)$$

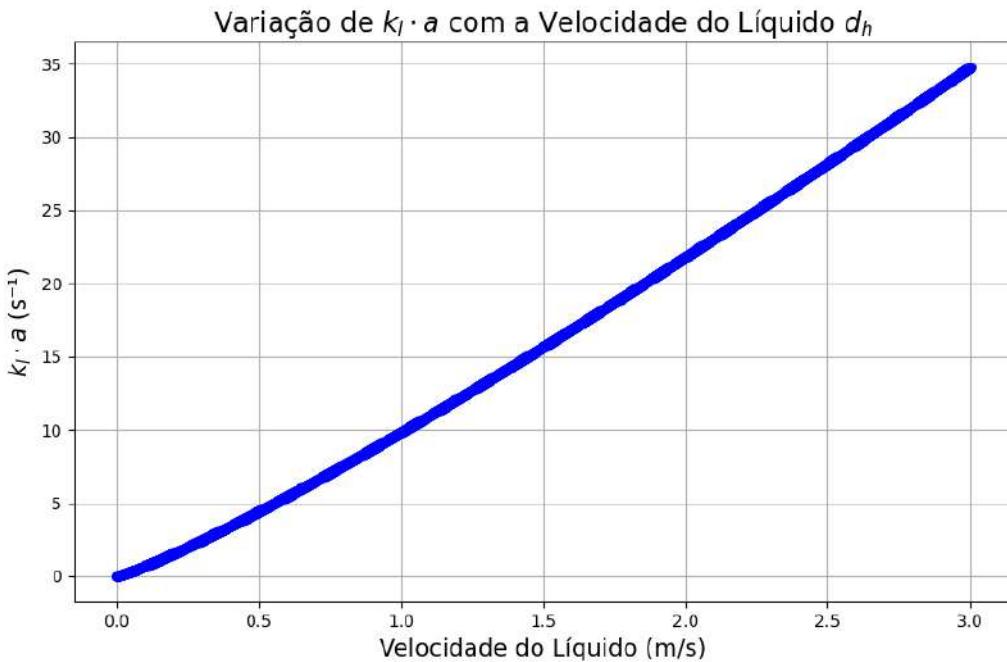
Pode-se, portanto, variar k_{la} a partir da equação (18) com auxílio das equações de (19) até (22) a partir de diversas variáveis de interesse do processo, como diâmetro, velocidade superficial do líquido e velocidade superficial do gás. As Figuras 18 e 19 demonstram essas variações de k_{la} tanto em função do diâmetro do microcanal quanto da velocidade do líquido – o que também altera, conforme equação (13), a velocidade do gás. Considerou-se a difusividade do CO₂ na água como $1,9 \cdot 10^{-9}$ m²/s, a densidade da água como 997 kg/m³, a densidade do gás como 1,244 kg/m³, a viscosidade da água como 0,001 Pa.s. A viscosidade do gás é feita de maneira proporcional, conforme explicação da seção anterior, sendo $1,79 \cdot 10^{-5}$ Pa.s, o que pode ser visto em função da baixa concentração de CO₂ que afeta pouco a viscosidade como um todo. A razão volumétrica de gás foi de 35%.

Figura 18 - Variação do k_{la} Conforme Variação do Diâmetro Hidráulico para Demais Constantes Fixas (Velocidade do Líquido = 2 M/S)



Fonte: Produção Própria

Figura 19 – Variação do $k_l a$ conforme Variação da Velocidade Superficial do Líquido para Demais Constantes Fixas (Diâmetro Hidráulico = 500 Micrômetros)



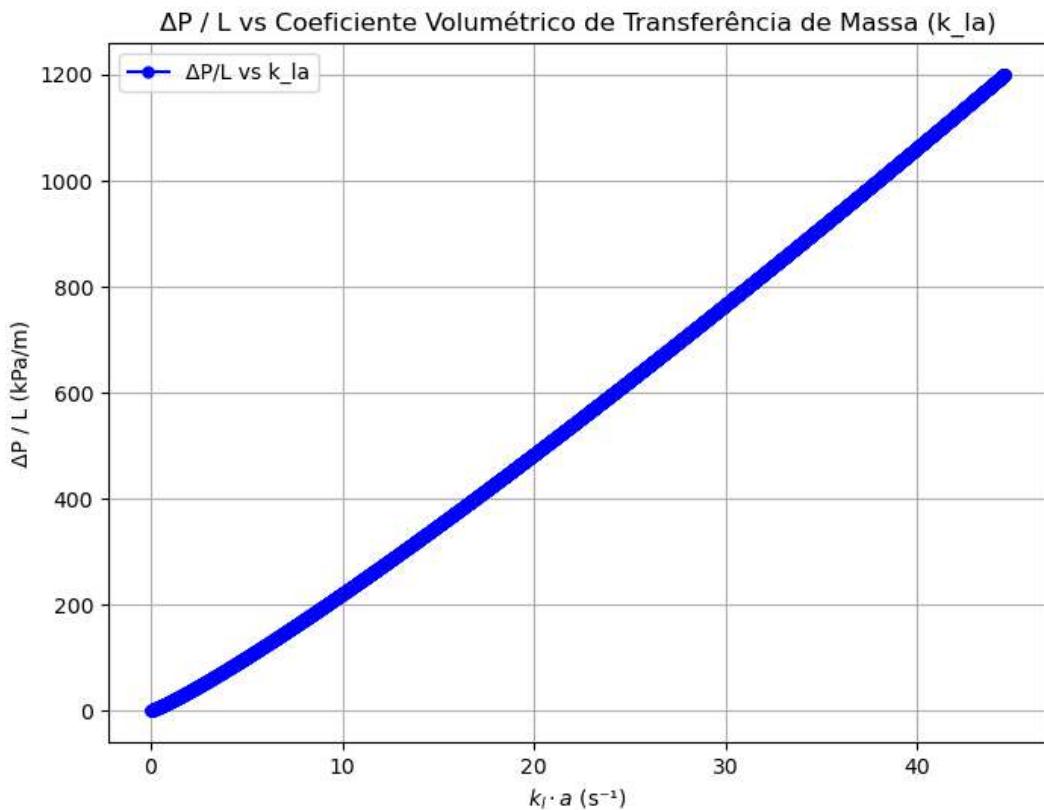
Fonte: Produção Própria

Os resultados da modelagem do $k_l a$ estão conforme esperados. Uma diminuição no diâmetro do microcanal aumenta o $k_l a$ uma vez que a área específica também é inversamente proporcional ao diâmetro. Já um aumento na velocidade do líquido provoca uma agitação maior nele, o que diminui o tamanho do filme e acarreta uma diminuição na resistência à transferência de massa do lado líquido, o que por sua vez aumenta também o $k_l a$.

Um ponto de grande importância a ser levado em conta é a perda de carga ao longo do microcanal. De acordo com o estudo de Yue et al. (2007), a perda de carga para o microcanal pode ser relacionada ao próprio $k_l a$ pela equação (23), demonstrada de forma gráfica na Figura 20. É necessário atentar-se nesta correlação que a perda de carga está em k.Pa.

$$k_l a = 0.0863 \left(\frac{\Delta P}{L} \right)^{0.881} \quad (23)$$

Figura 20 - Variação da Perda de Carga por Comprimento do Microcanal de acordo com o k_{la}



Fonte: Produção Própria

Identifica-se, portanto, que a perda de carga é significativa no microcanal, sendo fundamental que haja uma bomba de microbolhas localizada entre o Venturi e o microcanal para que se vença a perda de carga gerada no mesmo. A pressão de 3 atm no microcanal irá ser considerada para as próximas simulações de maneira a poder-se vencer à perda de carga, e a aplicabilidade disto será verificada na simulação do processo integrado.

A partir do k_{la} , pode-se calcular a quantidade de CO_2 removida pela absorção no microcanal de maneira independente do restante do sistema. Para isso, é necessário deduzir as equações constitutivas da transferência de massa. Inicialmente, tem-se o balanço de massa da fase líquida que pode ser representado como:

$$V * \frac{dC}{dz} = N * A \quad (24)$$

Sabe-se que V – volume de líquido – é proporção do volume total da região de controle – volume interno do microcanal do início ao final de uma bolha no escoamento de Taylor – em relação à fração de líquido, enquanto A – área da troca – pode ser estimada como uma proporção da área transversal e da fração de gás. A coordenada z se refere à coordenada axial do microcanal e N é o fluxo de CO_2 dado pela Lei de Fick. Assim, chega-se à equação:

$$V_t * (1 - \varepsilon_g) * \frac{dC}{dz} = N * A_t * \varepsilon_g \quad (25)$$

Dividindo-se a área de troca pelo volume da região de controle e substituindo-se o fluxo de massa de CO_2 pela multiplicação entre $k_l a$ e o gradiente de concentração, tem-se que:

$$\frac{dC}{dz} = k_l a * (C^* - C) * \frac{\varepsilon_g}{(1 - \varepsilon_g) * (L_B)} \quad (26)$$

$$\frac{dp_{\text{CO}_2}}{dz} = -k_l a * (p_{\text{CO}_2} * H - C) * \frac{\varepsilon_g * R * T}{(1 - \varepsilon_g) * (L_B)} \quad (27)$$

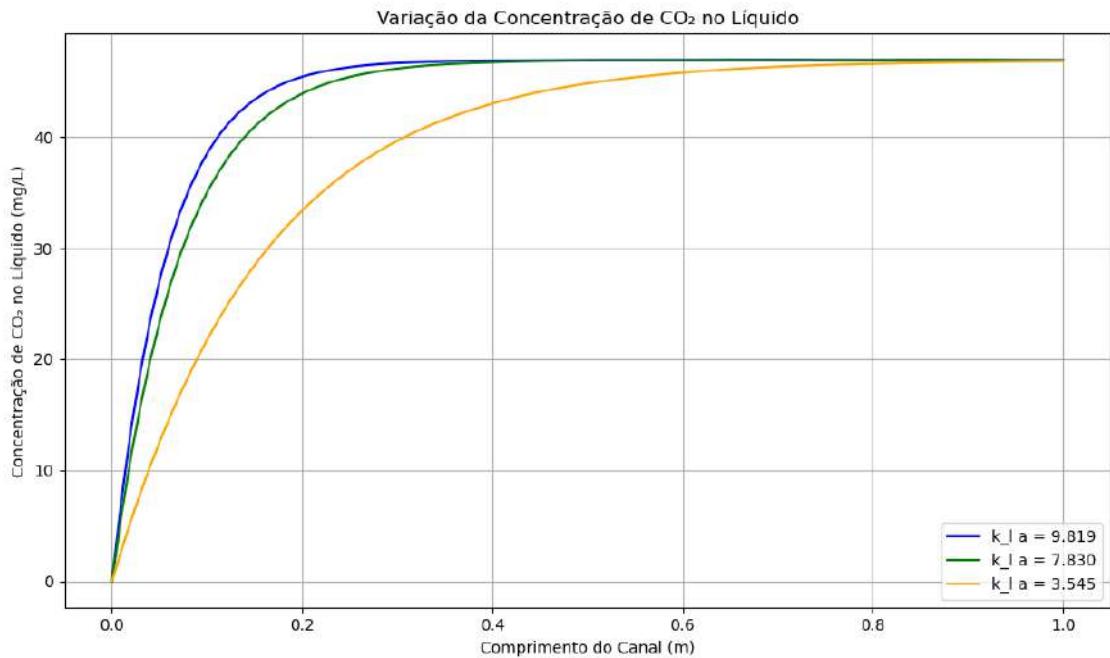
$$C^* = H * (p_{\text{CO}_2}) \quad (28)$$

L_b é o tamanho da bolha de gás em metros, H é a constante de Henry, considerada em 0,031 mol/atm.L, p_{CO_2} é a pressão parcial de CO_2 no gás, C é a concentração de CO_2 no líquido, R é a constante universal dos gases e T é a temperatura do sistema. A concentração de CO_2 no líquido na entrada será 0. Este sistema de equações diferenciais teve de ser utilizado já que, ao longo do microcanal, a pressão parcial de dióxido de carbono diminui em função de sua absorção, pois se trata de uma mistura gasosa e não de CO_2 puro. O tamanho da bolha de gás é objeto de uma série de estudos na literatura, porém não há correlações simples que consigam chegar com precisão aos valores reais, sendo normalmente utilizadas técnicas computacionais como CFD que vão além do escopo deste trabalho. (LIU et al., 2005) (VAN BASTEN et al., 2004) (KREUTZER, 2003). Neste caso, definiu-se o tamanho da bolha como sendo de 5 milímetros de maneira conservadora, já que a literatura indica que o tamanho da bolha no escoamento de Taylor varia entre 1 a 10 vezes o diâmetro do microcanal (Yue et al, 2008), que no caso é considerado como 500 micrômetros.

Em relação à fração molar de entrada do CO_2 , considera-se uma fração molar inicial de 0,02, o que representaria que, na passagem do gás pelo casco do contactor, a eficiência de remoção fora de cerca de 83,3%.

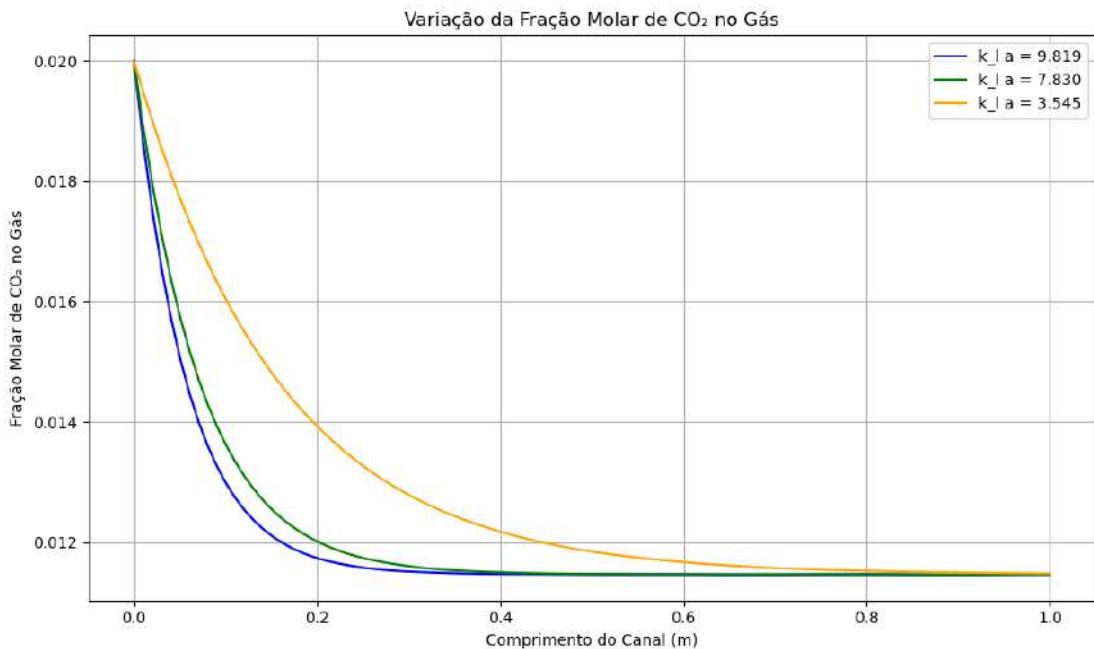
As Figuras 21 e 22 mostram o impacto do tamanho do microcanal na absorção para diversos cenários.

Figura 21– Concentração de Saída de CO₂ no Líquido para diferentes $k_{l,a}$ em Escoamento de Taylor (P=3 Atm, T=293k)



Fonte: Produção própria

Figura 22 – Fração Molar de CO₂ no Gás para diferentes $k_{l,a}$ em Escoamento de Taylor (P= 3 Atm, T=293 K)



Fonte: Produção Própria

A forma da curva é o que se espera de um modelo tal qual o das equações 26 a 28, sendo assintótico em direção ao equilíbrio. O escoamento dos fluidos em microcanal não provoca uma absorção de CO₂ maior do que a demonstrada nos gráficos em função do escoamento em paralelo e da redução da pressão parcial de CO₂ ao longo do microcanal, o que faz com que a solubilidade máxima do CO₂ em água diminua de acordo com a Lei de Henry (28).

No entanto, o comprimento para que se atinja o equilíbrio é rápido em função do alto k_{la} e do baixo tamanho da bolha, sendo, portanto, o microcanal uma ferramenta eficiente para a remoção de CO₂ em pequenos comprimentos. Para que haja uma maior remoção considerando somente microcanais, seriam necessários de 2 a 3 microcanais em série com solventes puros na entrada de cada um.

Considerando a remoção já realizada no contactor – de 0,12 de fração molar de CO₂ no gás para 0,02 – e sendo o valor final da fração molar de 0,011, tem-se uma eficiência no equipamento de cerca de 90,4% -calculada pela razão entre fração final e fração inicial - , o que já nos indicaria um equipamento altamente eficiente. No entanto, é necessário confirmar nas próximas seções que o contactor realmente seria capaz de remover essa quantidade de CO₂.

4.3. MODELAGEM DE ABSORÇÃO EM CONTACTOR COM MEMBRANA DE FIBRA OCA

Antes de iniciar a integração do sistema contactor-venturi-microcanal, a última etapa que precisa ser calculada individualmente é a de absorção no contactor. Novamente, será preciso determinar o k_{la} global, além de admitir algumas hipóteses:

- A absorção do CO₂ das bolhas que escoam no lúmen do microcanal não interfere na absorção do CO₂ na fase gasosa que escoa pelo casco do contactor;
- O escoamento se dá em contracorrente;
- A resistência à transferência de massa no gás é desprezível em função de sua agitação, sendo relevantes apenas a resistência na membrana e no líquido;
- O regime é estacionário e o fluxo é plenamente desenvolvido desde seu início;
- O escoamento do gás se dá em pistão;
- A absorção é predominantemente física, sendo desprezível a contribuição da reação química;

- A resistência à transferência de massa no líquido será equivalente à resistência encontrada no microcanal.

Para a determinação do K_L global, pode-se utilizar a equação (1), excluindo-se os termos relacionados ao coeficiente na fase gasosa e à reação química de absorção. A equação se torna então:

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{k_l} + \frac{H}{k_m} * \frac{d_o}{d_{ln}} \quad (29)$$

Como no cálculo do microcanal nós possuímos apenas o k_l e não o k_i , será necessário estimar o mesmo a partir da correlação dada por Van Baten e Krishna (2004):

$$k_L = 2 * \frac{2}{\sqrt{\pi}} * \left(\frac{D_{CO_2} * v_g}{d_h} \right)^{1/2} \quad (30)$$

O coeficiente da membrana pode ser estimado utilizando a equação (2), sendo a tortuosidade e a porosidade da membrana definidas a partir de seu material constituinte. A difusividade do CO₂ no poro da membrana é calculada usando o método da difusividade de Knutsen (D_K) e do par de gases (D_{ab}) conforme metodologia de Mendes (2024), exposta abaixo, e considerando o gás de exaustão como mistura binária ar-CO₂:

$$\frac{1}{D_{CO_2-poro}} = \frac{1}{D_{ab}} + \frac{1}{D_K} \quad (31)$$

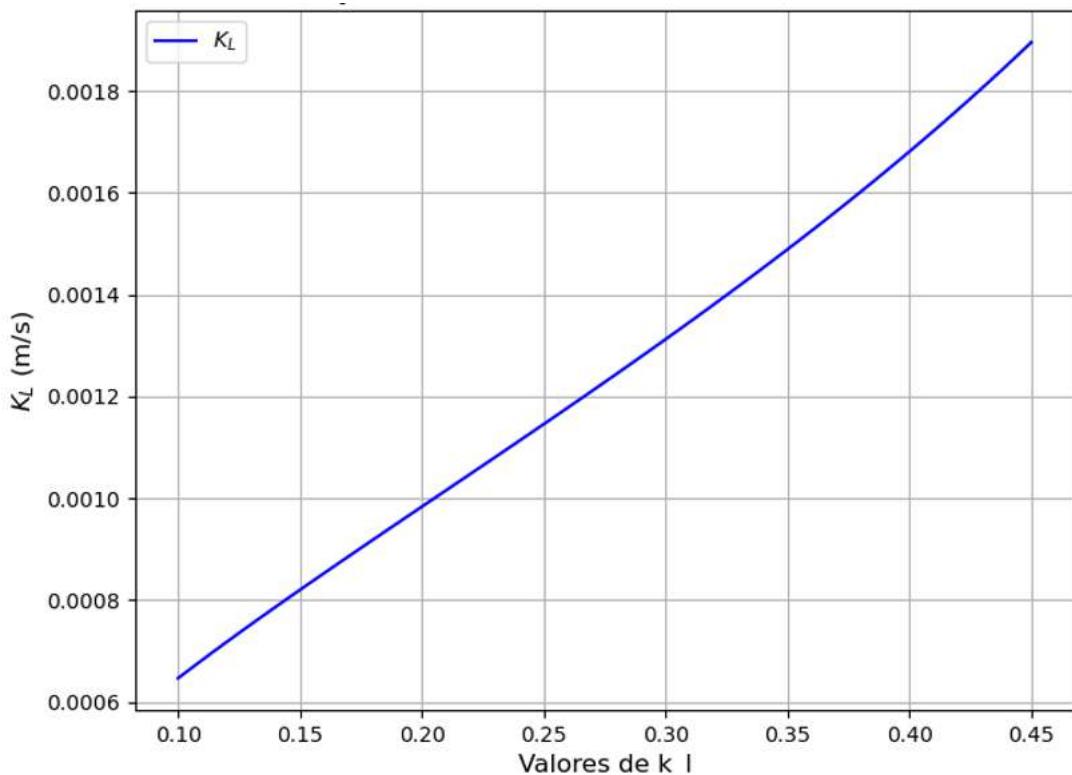
$$D_{ab} = 1,8583 * 10^7 * \frac{T^{3/2} * \left(\frac{1}{MM_{ar}} + \frac{1}{MM_{CO_2}} \right)}{\rho_{mistura} * \Omega_{ab} \sigma_{ab}^2} \quad (32)$$

$$D_K = 4 * \frac{\varepsilon * d_p}{3 * \delta} \sqrt{\frac{8 * R * T}{\pi MM_{CO_2}}} \quad (33)$$

Sendo a espessura da parede δ considerada como 10% do diâmetro interno do microcanal, Ω_{ab} um número adimensional relacionado ao potencial de Lennard-Jones com valor de 0,9996 e σ_{ab}^2 o diâmetro de colisão entre CO₂ e N₂ de 3,8695. As propriedades da membrana do estudo de Mendes (2017, 2024) serão utilizadas neste estudo, sendo a porosidade equivalente a 0,30, a tortuosidade a 2,60 e o diâmetro dos poros – d_p – igual a 30 nanômetros.

A partir das equações (29) e (33), pode-se estabelecer uma relação entre k_l do microcanal e o K_l do contactor, já que v_g depende da fração volumétrica e velocidade do líquido, conforme a equação (13). A relação é expressa na Figura 23:

Figura 23 - Coeficiente Global de Transferência de Massa (Lado Líquido) para Contactor com Membrana de Fibra Oca a partir da Razão Volumétrica de Gás (Temperatura =293K, Velocidade do Líquido = 1 m/s).



Fonte: Produção Própria

Este comportamento era o esperado, visto que, quanto maior a razão volumétrica de gás, maior sua velocidade, o que promove uma maior agitação no microcanal, que por sua vez aumenta o coeficiente de transferência de massa. Em termos numéricos, o resultado parece excelente, pois trabalha-se com K_L na ordem de grandeza de 10^{-3} , o que indica que haverá uma boa transferência de massa no contactor utilizando-se apenas a água.

É necessário, no entanto, fazer uma ressalva quanto aos valores atingidos. A correlação utilizada para estimar k_l na equação (30) faz parte de um estudo que corrobora os achados de Bercic e Pintas (1997) para o k_{la} , que, para as condições estudadas neste trabalho, apresentou valores superdimensionados (duas ordens de grandeza acima do esperado). Portanto, é possível que o mesmo esteja ocorrendo com o K_l . Por outro lado, Ahmad et al.

(2009), conforme detalhado na seção X, demonstrou que, sem a utilização de gás no lúmen da fibra oca e com utilização de absorvente de amina, é possível se obterem coeficientes globais de transferência de massa de ordem de grandeza 10^{-3} . Assim, não seria tão irrealista pensar que, em função da grande melhora na transferência de massa com a utilização de gás no lúmen da fibra, atinja-se resultados parecidos apenas com água. Portanto, em função dos poucos estudos disponíveis na literatura e destas considerações, será dada como correta a equação de k_l apresentada.

Possuindo o K_l , pode-se então realizar a modelagem do contactor utilizando-se as equações abaixo, evitando utilizar sistemas de EDOs como no caso do microcanal pois em sistemas contracorrente há notória dificuldade de utilizá-los pois deve ser utilizado um segundo método numérico para estimar os valores finais das correntes já que os mesmos não são inicialmente conhecidos:

$$0 = F_l * z_l - F_{II} * z_{II} - ACM * K_l * LMTD \quad (34)$$

$$0 = (c_{III} - c_{IV}) * Q + ACM * K_l * LMTD \quad (35)$$

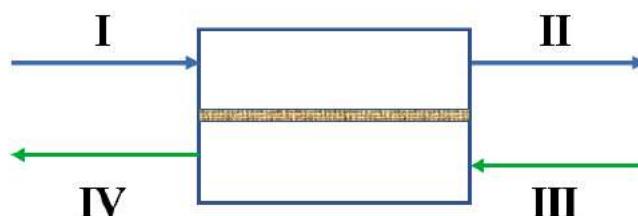
$$LMTD = \frac{DT0 - DTL}{\ln \left(\frac{DT0}{DTL} \right)} \quad (36)$$

$$DT0 = H * P * z_l - c_{IV} \quad (37)$$

$$DT0 = H * P * z_{II} - c_{III} \quad (38)$$

Sendo F vazão molar de CO_2 na fase gasosa, z a fração molar de CO_2 na fase gasosa, ACM a área de contato dos microcanais, c a concentração molar de CO_2 no líquido. Os números se explicam conforme apresentado na Figura 24, sendo a corrente azul correspondente ao gás e a verde, ao líquido.

Figura 24– Esquemática para Equacionamento de Contactor com Membrana de Fibra Oca

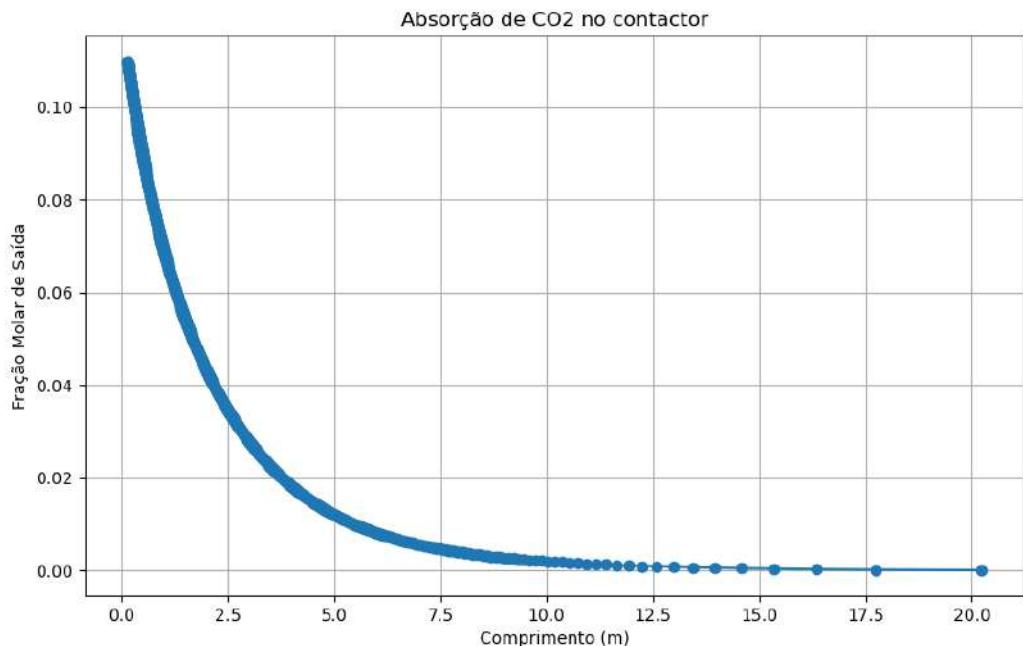


Fonte: Mendes (2024)

Para dimensionar, portanto, o contactor, é necessário especificar a fração molar de CO₂ de entrada e saída do gás, a concentração de entrada do líquido e as vazões de gás e líquido, fazendo variar a área de membrana para determinar a concentração de saída do líquido. Conhecendo a quantidade de microcanais presentes no contactor e sua área externa, é possível estabelecer uma relação entre comprimento do contactor e sua concentração de saída de CO₂. O diâmetro externo dos microcanais foi considerado como 550 micrômetros e o número de microcanais foi fixado em 10000. Para a totalidade deste trabalho, a concentração de entrada de CO₂ no líquido será considerada como 0 e a fração de entrada do CO₂ como 0,12.

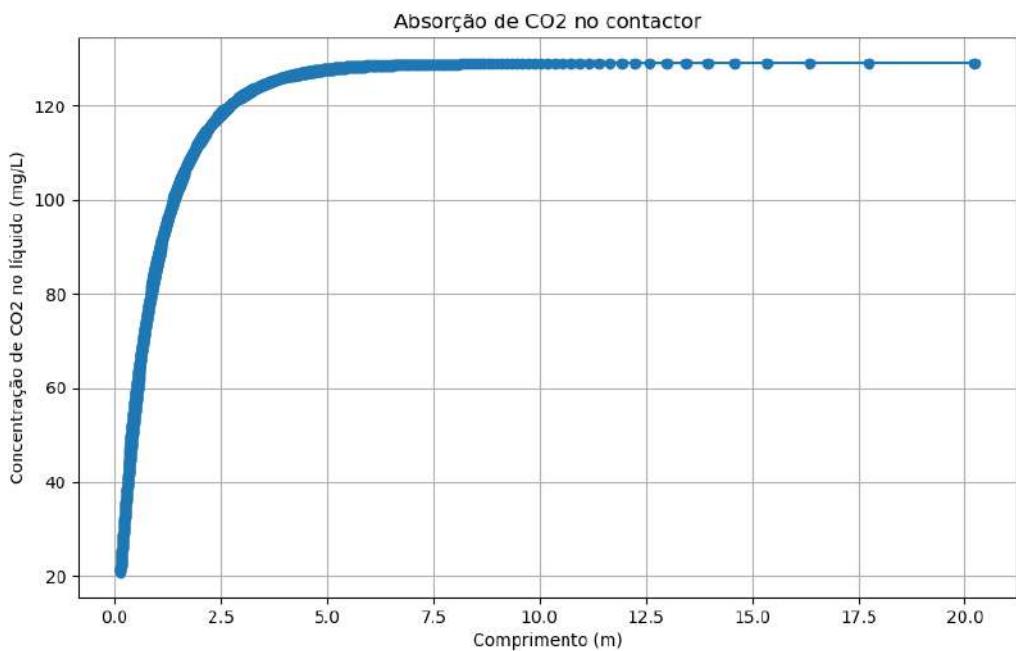
O resultado está expresso na Figuras 25 e 26:

Figura 25 - Fração de CO₂ no Gás de Saída do Contactor de Acordo com Tamanho do Contactor (P=1 atm, $\varepsilon_g=35\%$, $z_1=0,12$, $K_l=0,0011$ m/s)



Fonte: Produção Própria

Figura 26– Concentração de CO₂ de Saída na fase líquida do Contactor (P=1 atm, ε_g=35%, z₁=0,12, K_l=0,0011 m/s)



Fonte: Produção Própria

Nota-se que, para estas especificações, o contactor precisa de um comprimento considerável (acima de 10 metros) para depurar o gás de CO₂, mas com um comprimento de cerca de 3 metros já seria possível atingir uma eficiência de cerca de 85% no contactor, o que nos dá indícios promissores desta integração, visto que esses valores somente são possíveis utilizando-se água, em função do grande ganho de transferência de massa no microcanal com a inserção de bolhas gasosas.

Em relação à perda de carga, no lado do gás pode-se considerar que a mesma é desprezível, e apenas a perda de carga do líquido possui relevância no cálculo da perda de carga total (BORIBUTH et al., 2011). Como o lúmen da fibra oca funciona como um microcanal, pode-se utilizar a equação (23), representada na Figura 20, para determinar a perda de carga total no contactor.

4.4. MODELAGEM DO CIRCUITO INTEGRADO

Tendo sido feitas as modelagens individuais de cada componente do circuito, pode-se agora iniciar a simulação do circuito integrado a partir de modelo computacional apresentado na Figura 12. As seguintes considerações são estabelecidas:

- A absorção do CO₂ das bolhas que escoam no lúmen do microcanal não interfere na absorção do CO₂ na fase gasosa que escoa pelo casco do contactor;
- O escoamento se dá em contracorrente no contactor e em co-corrente no microcanal;
- A resistência à transferência de massa no gás tanto no contactor quanto no microcanal é desprezível em função de sua agitação, sendo relevantes apenas a resistência na membrana no caso do contactor e no líquido, em ambos os casos;
- O regime é estacionário e o fluxo é plenamente desenvolvido desde seu início tanto no contactor quanto no microcanal;
- A absorção é predominantemente física, sendo desprezível a contribuição da reação química;
- O coeficiente de transferência de massa no líquido no contactor será equivalente ao coeficiente encontrado no microcanal;
- A transferência de massa é governada pela teoria de filme, ou seja, estabelece-se um filme do lado líquido onde há gradiente de concentração;
- O escoamento é de Taylor no microcanal;
- Não ocorre transferência de massa no Venturi, ou seja, a concentração de CO₂ na fase líquida na entrada do microcanal é igual a zero;
- Embora haja absorção de CO₂ ao longo do escoamento, não haverá diminuição no volume da bolha de gás no microcanal;
- A fração molar de CO₂ na saída do contactor será a fração molar de entrada do CO₂ no microcanal.

Para se chegar a um equipamento funcional e que seja capaz de obter uma eficiência de mais de 90% de remoção de CO₂ em sua totalidade, será necessário entender qual a razão volumétrica de gás e líquido na entrada do contactor que apresenta melhor efetividade e qual o dimensionamento deste equipamento.

4.4.1. Investigação da Razão Volumétrica de gás

Em relação à razão volumétrica de gás de entrada no sistema, o objetivo é identificar um valor “otimizado” da razão volumétrica que gere as maiores razões de CO₂ absorvido por metro de contactor e por perda de carga, o que representaria a razão volumétrica de maior eficiência de absorção em relação ao tamanho do equipamento e à energia empregada para seu funcionamento. Para isso, variou-se a razão volumétrica de gás inicial entre 0,15 e 0,40.

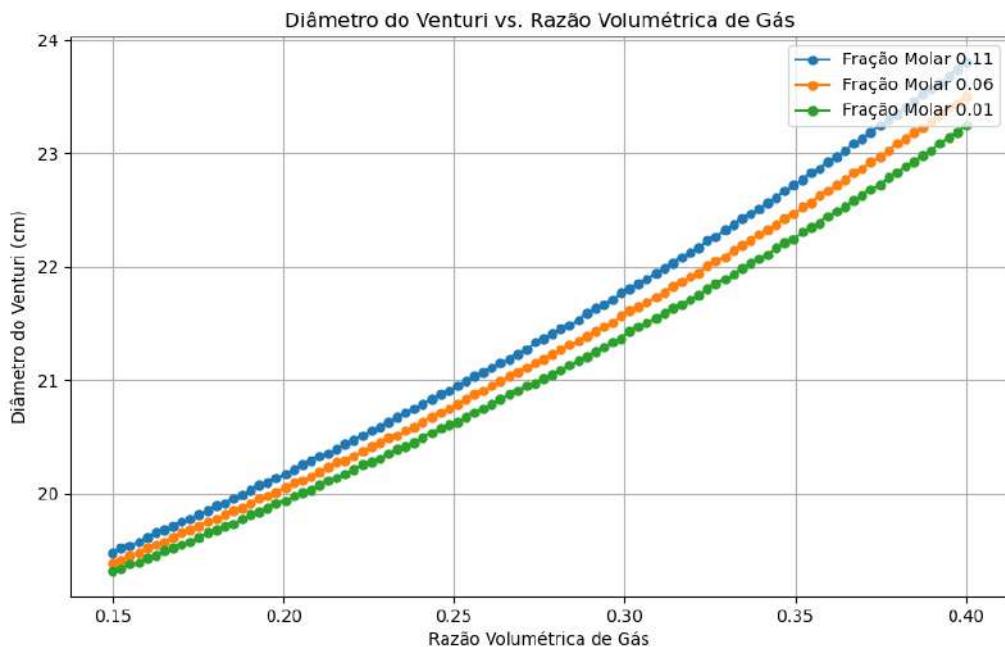
É fundamental frisar que esta razão volumétrica se refere à razão entre as vazões de entrada do gás no casco do contactor e a soma desta vazão de gás com a vazão do líquido no lúmen das membranas. Naturalmente, como a primeira etapa é a absorção de gás no contactor, a vazão de gás diminui após a passagem no contactor e a razão volumétrica de gás no Venturi deve ser recalculada. Serão simuladas três eficiências distintas no contactor: fração molar de saída do contactor de 0,11 – correspondente a uma eficiência baixa de 8,34% no contactor-, fração molar de saída de 0,06 – correspondente a uma eficiência intermediária de 50% no contactor – e finalmente fração molar de saída de 0,01, o que corresponde a uma eficiência alta de remoção de CO₂ de aproximadamente 91,67% no contactor.

Também é importante mencionar que, embora a razão volumétrica seja recalculada após a passagem no contactor, os gráficos a seguir são apresentados relacionando as variáveis de interesse no eixo y com os valores originais de vazão de gás que entra no contactor, visto que essa vazão é o dado de entrada do sistema. A vazão de gás na entrada do contactor foi inicialmente fixada em 0,01 m³/s *standart*.

Por fim, em função da perda de carga que ocorre no microcanal, é necessário colocar uma bomba de microbolhas entre o Venturi e a entrada dos microcanais para permitir o escoamento pleno. Será considerada uma bomba que eleve a pressão do sistema dentro dos microcanais a 3 atmosferas, verificando-se o efeito de redução volumétrica da fase gasosa e a necessidade de superar a perda de carga para escoamento no microcanal. Foi considerado também que não haveria molhamento da fibra em função desta pressão aumentada no lúmen do microcanal, o que é suportado com base no contactor comercialmente disponível Liqui-Cel™ EXF-14x40, que admite uma diferença de até 8 atmosferas de pressão entre o lúmen do microcanal e da fase externa.

Conforme metodologia previamente definida, o primeiro cálculo a ser feito é o do diâmetro do Venturi, que pode ser mostrado na Figura 27 abaixo:

Figura 27– Diâmetros de Venturi para Diferentes Razões Volumétricas na Entrada do Contactor



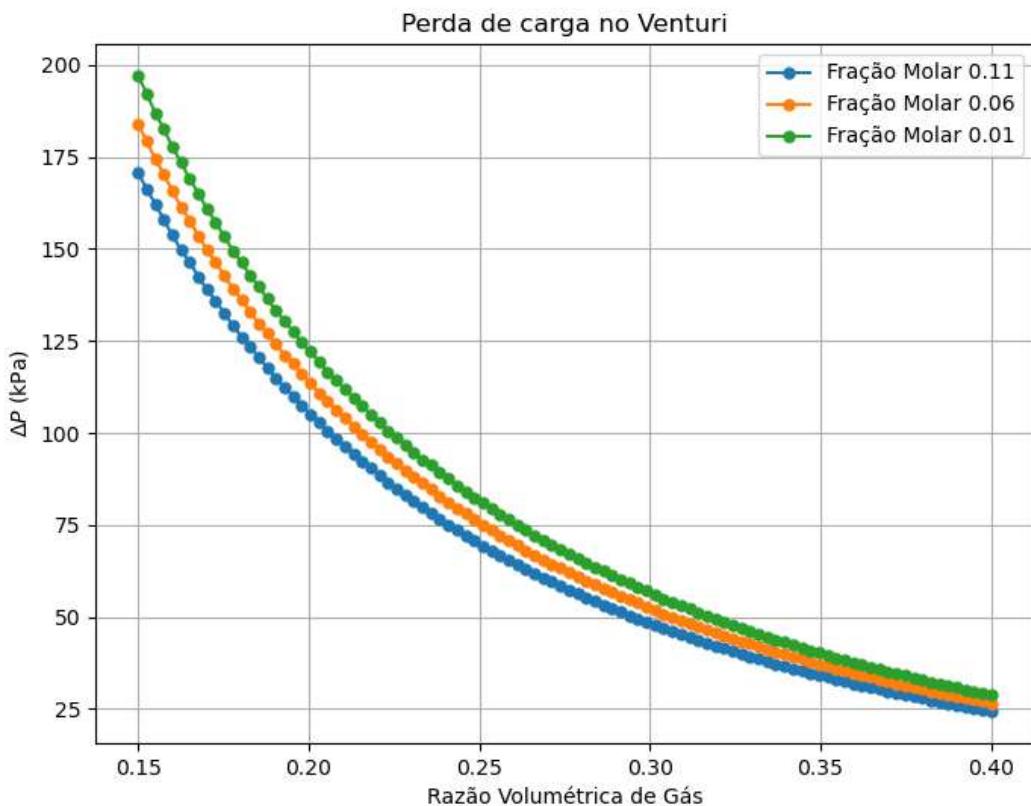
Fonte: Produção Própria

É importante frisar que, como estamos aplicando uma bomba após o Venturi, este equipamento agora deve gerar bolhas que, depois da compressão, possuam diâmetro similar ao do microcanal de 500 micrômetros. Isto é facilmente calculado visto que o volume é inversamente proporcional ao aumento da pressão, e a bolha pode ser inicialmente considerada como uma esfera.

Em relação ao resultado, este pode parecer contraintuitivo, pois seria plausível esperar que, conforme maior a vazão de líquido – que aumenta conforme diminui a razão volumétrica de gás, visto que a vazão de gás é fixa –, maior fosse o diâmetro necessário de Venturi. No entanto, o inverso ocorre em função do aumento da competição por espaço na garganta do Venturi, que diminui a área efetiva de passagem do líquido no Venturi. Percebe-se também que é pouca a diferença no tamanho do Venturi provocada pela variação na absorção no contactor, sendo menos de 1 cm mesmo para razões volumétricas de gás mais elevadas.

O segundo ponto a ser levado em conta é a perda de carga no próprio Venturi, conforme Figura 28 abaixo:

Figura 28– Perda de Carga no Venturi em função da Razão Volumétrica de Gás na Entrada Do Contactor

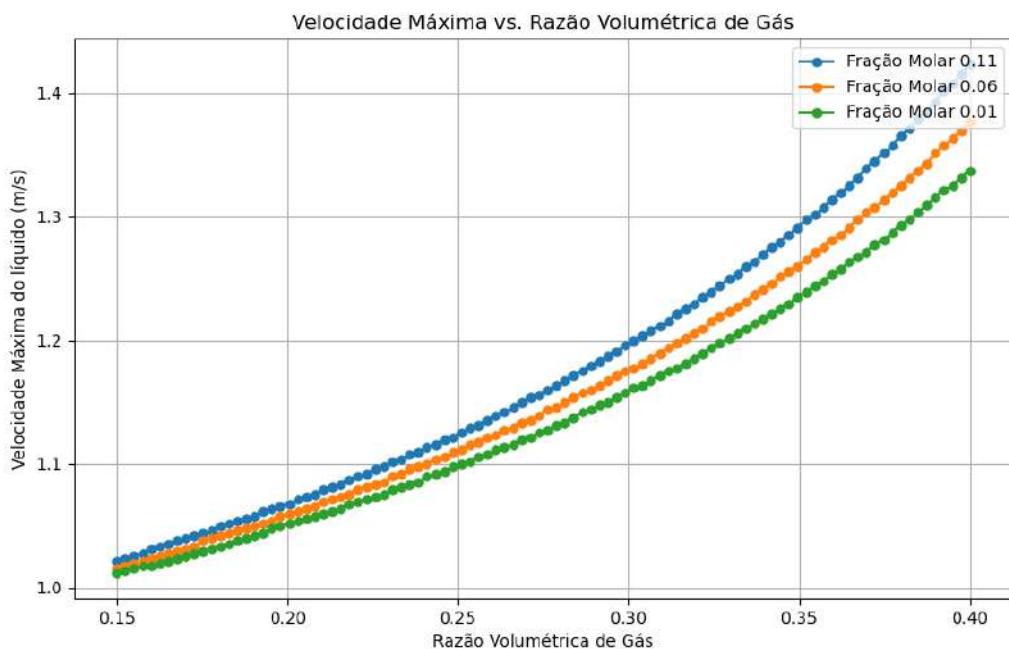


Fonte: Produção Própria

A perda de carga apresenta valores maiores para menores razões volumétricas, o que era esperado, uma vez que, conforme Figura 27, o diâmetro do Venturi aumenta conforme aumenta a razão volumétrica. Em termos dos valores numéricos, esta perda não é tão elevada, sendo facilmente superada com uma bomba de líquido antes do Venturi.

O próximo passo é entender quantos microcanais serão necessários no contactor. Para isso, é necessário garantir que se desenvolva fluxo de Taylor em todos os microcanais. Uma consideração importante é que, conforme se aumentou a pressão do gás com a bomba de microbolhas, a densidade da fase gasosa também muda, sendo considerada a partir de agora como $4,5 \text{ kg/m}^3$. A Figura 29 abaixo demonstra a relação entre velocidade máxima efetiva e a razão volumétrica

Figura 29– Velocidade Máxima do Líquido dentro do Microcanal para permitir Escoamento de Taylor em função da Razão Volumétrica de Gás

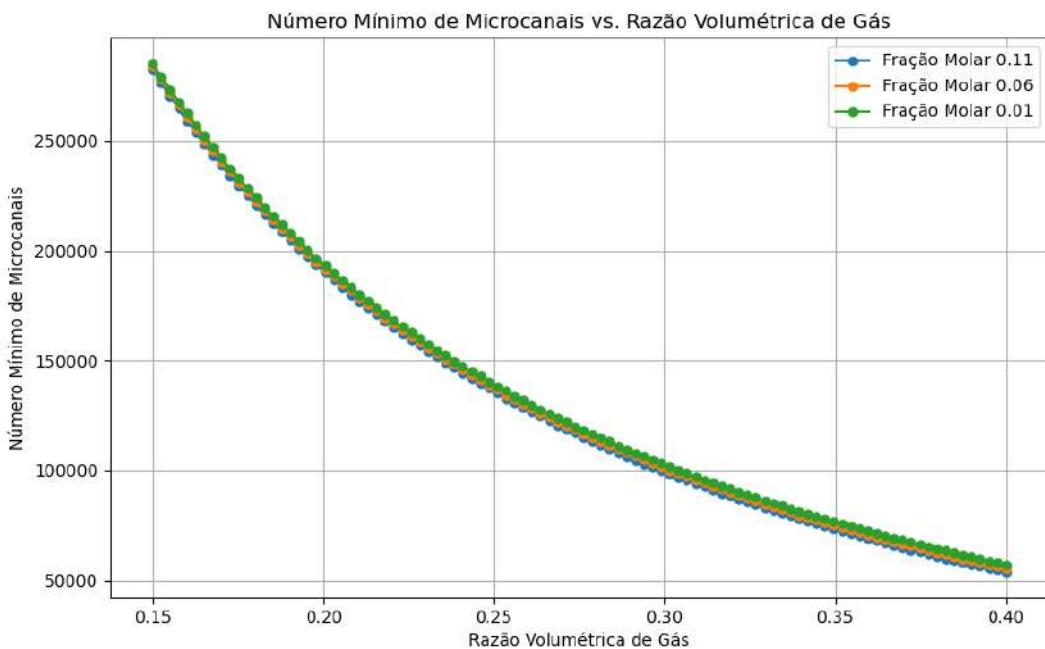


Fonte: Produção Própria

Percebe-se que os valores da velocidade de líquido estão dentro da faixa de valores dos artigos estudados na literatura, conforme esclarecido na seção 4.1. Portanto, não há preocupação quanto à validade dos dados expostos. A diferença de absorção de CO₂ no contactor provoca diferenças irrisórias na velocidade, sendo estas de menos de 0,1 m/s para razões volumétricas elevadas.

Analizando-se o número de microcanais necessários para comportar esta vazão, calculado a partir da vazão de líquido total e a vazão em cada microcanal a partir da velocidade máxima permitida para escoamento de Taylor, tem-se a Figura 30 abaixo:

Figura 30– Número de Microcanais para Desenvolvimento de Escoamento de Taylor em função da Razão Volumétrica



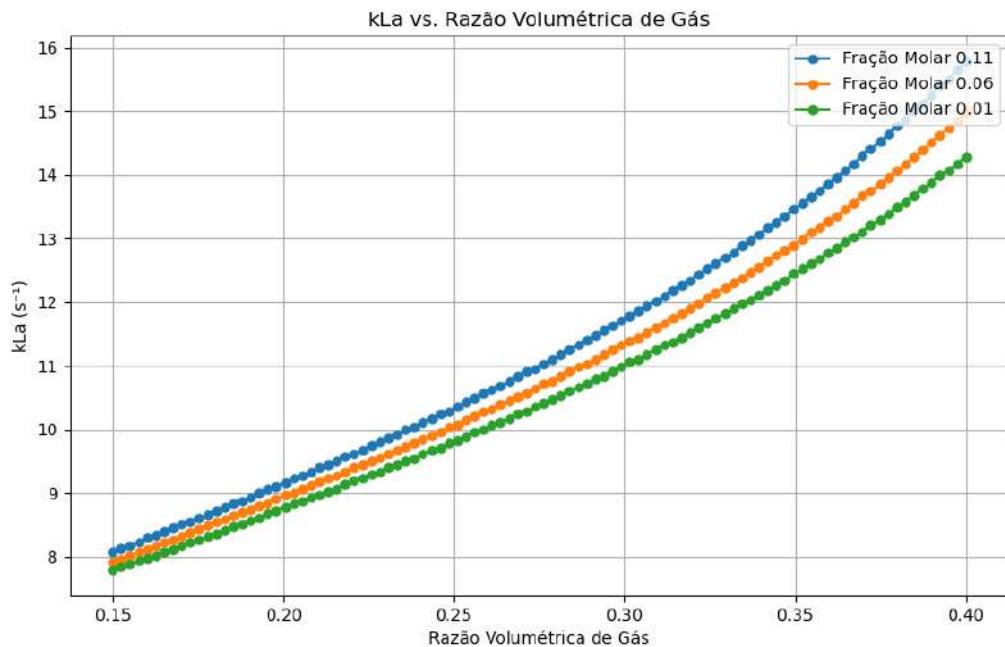
Fonte: Produção Própria

O número de microcanais calculado comporta-se como esperado, pois uma menor razão volumétrica para uma mesma vazão de gás representa uma vazão total muito mais significativa, além de que, conforme a Figura 29, tem-se que a velocidade máxima no microcanal é menor para razões baixas, provocando um número elevado de microcanais para razões volumétricas menores. Não há diferença perceptível no número de microcanais provocada pela quantidade de CO_2 absorvido no contactor, já que a diferença de vazão se torna irrelevante.

O número de microcanais, embora possa parecer de elevada ordem de grandeza, em realidade é comum para contactores em escala industrial em função da baixa área transversal ocupada por cada microcanal, o que permite um número alto de microcanais por contactor.

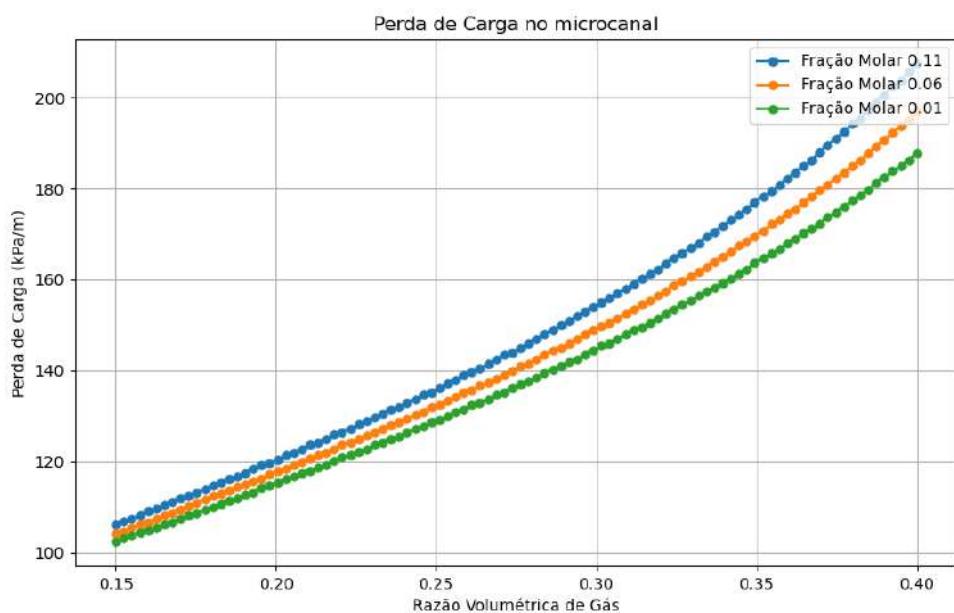
Uma vez definidas as velocidades no microcanal, calcula-se o valor de k_{fa} e da perda de carga no microcanal, conforme Figuras 31 e 32 abaixo:

Figura 31– k_{La} no Microcanal em função da Razão Volumétrica De Gás



Fonte: Produção Própria

Figura 32– Perda de Carga no Microcanal em função da Razão Volumétrica de Gás

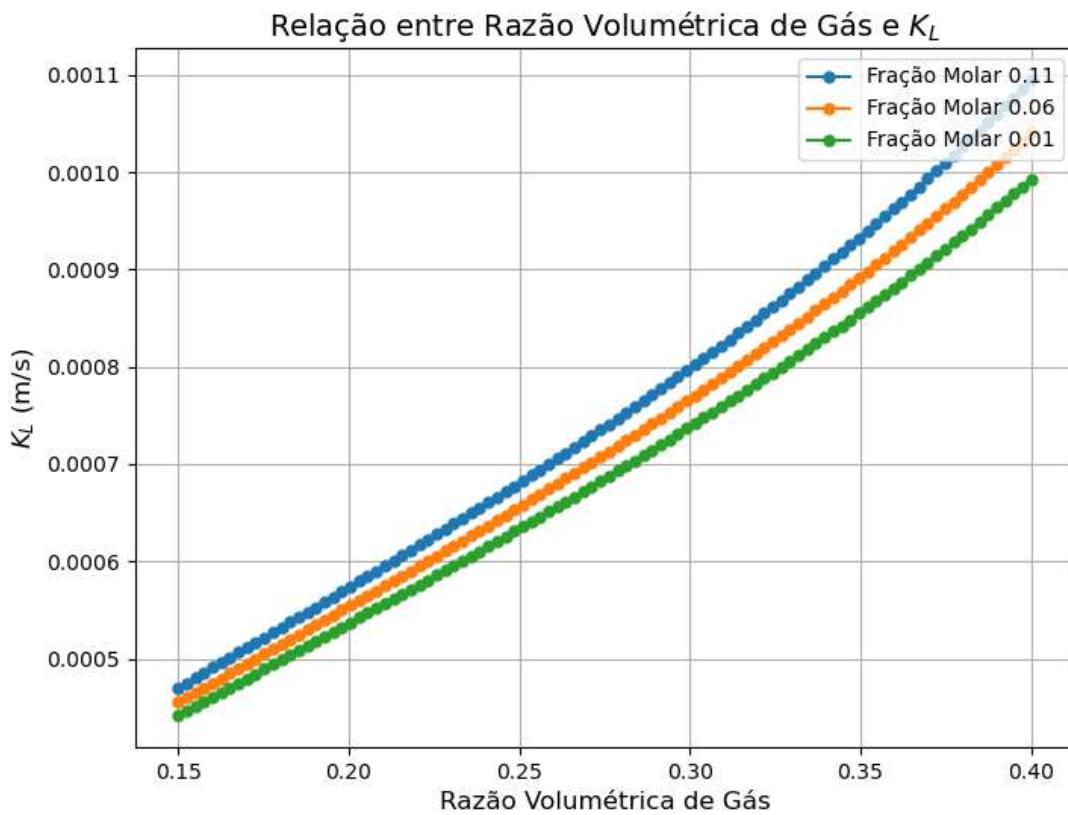


Fonte: Produção Própria

As curvas do k_{la} assemelham-se bastante às curvas de velocidades máximas no microcanal, visto que as únicas variáveis no cálculo de k_{la} são as velocidades do líquido e do gás conforme Equação (18), sendo a velocidade do gás dependente da velocidade do líquido e da razão volumétrica conforme Equação (13). De maneira análoga, as curvas da perda de carga no microcanal apresentam formato similar às curvas do k_{la} . Os valores estão dentro da faixa esperada de acordo com a literatura (YUE et al., 2007) e apresentam novamente pouca diferença conforme variação da absorção de CO₂ no contactor.

A próxima etapa, conforme a metodologia, é a determinação do K_L para o contactor, sendo está a última etapa antes do início do cálculo da absorção no contactor e microcanal. A Figura 33 demonstra o comportamento do K_L :

Figura 33 – K_L do Contactor em função da Razão Volumétrica do Gás



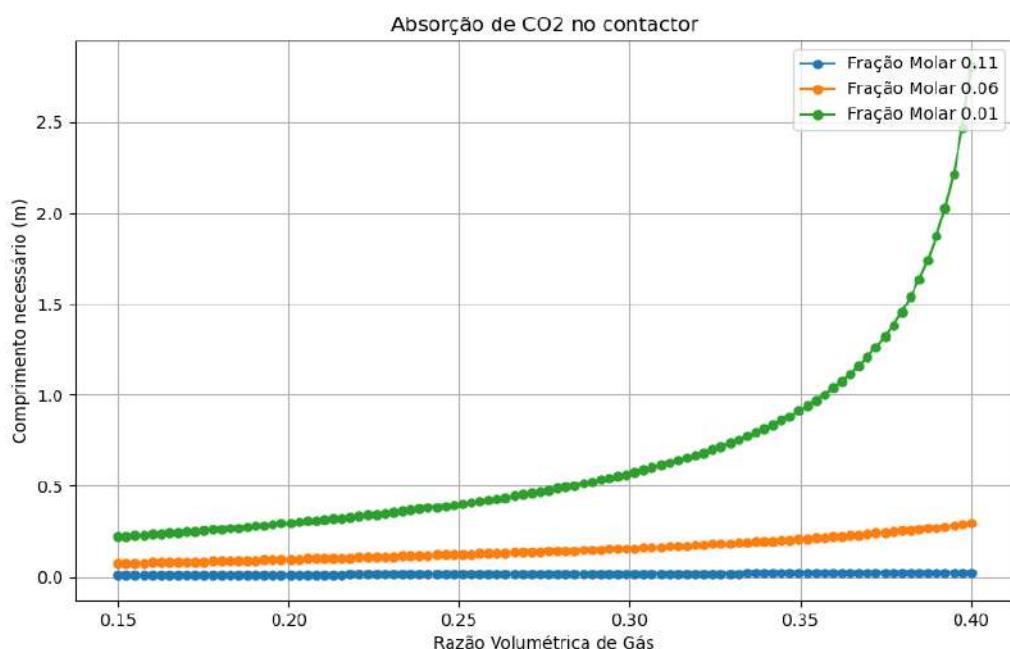
Fonte: Produção Própria

O resultado é conforme o esperado pois quanto menor a razão volumétrica inicial, mais o microcanal se aproxima de um escoamento monofásico de líquido, reduzindo o k_{la} e consequentemente o K_L do contactor. Os valores numéricos apresentam um resultado

animador, pois estão na ordem de grandeza de 10^{-4} utilizando unicamente água como fluido absorvente.

Com esta informação, podemos dar início à simulação da absorção no contactor, tendo sido fixadas apenas as frações de saída de CO₂ no contactor (0,11, 0,06 e 0,01) e permitida a livre variação do tamanho do contactor, para atender a essas especificações do gás de saída do contactor. Para o cálculo da área de membrana, foi utilizado o número mínimo de microcanais determinado anteriormente. O resultado se encontra abaixo na Figura 34:

Figura 34 - Tamanho do Contactor Necessário para cada Razão Volumétrica



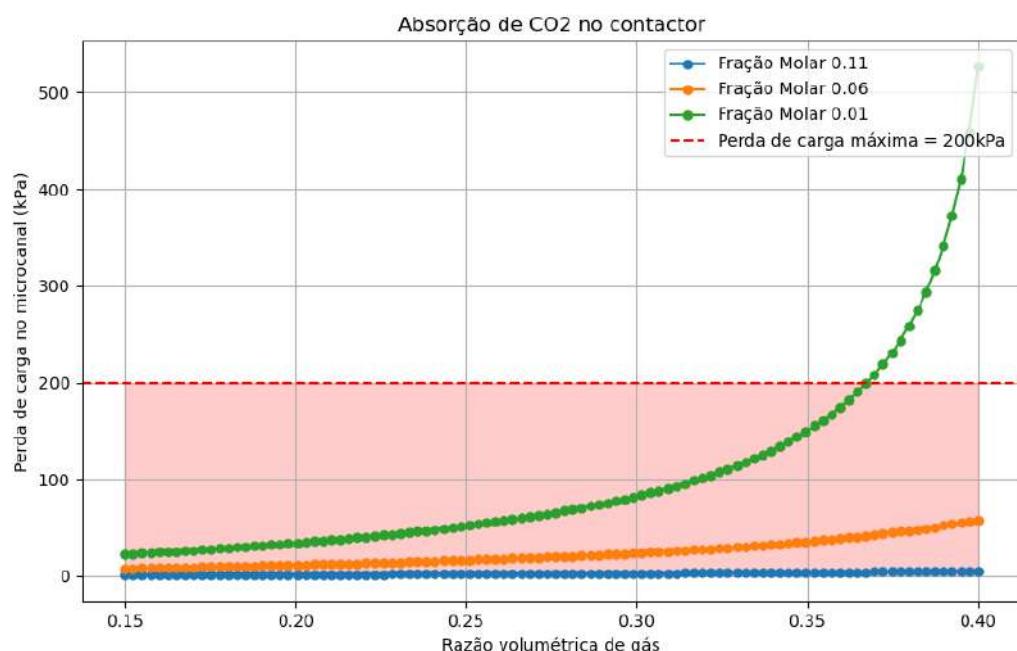
Fonte: Produção Própria

Em primeiro lugar, é perceptível que a diferença na fração molar de saída do contactor provoca discrepâncias significativas no tamanho necessário do contactor: para a fração molar de saída de 0,11, a faixa de variação de tamanho é entre 1 e 3 centímetros; para a fração molar de saída de 0,06, a faixa de variação é entre 7 e 30 centímetros; para a fração molar de saída de 0,01, a faixa de variação de tamanho é entre 22 centímetros e 2,80 metros. Analisando-se criticamente este resultado, vê-se que estabelecer uma fração molar de saída de 0,11 no contactor é irrealista, pois o diâmetro do contactor precisaria ser da ordem de grandeza de milímetros, não comportando vazões significativas, além de que provavelmente o fluido não se desenvolveria de maneira suficiente ao longo do contactor. Já para a fração molar de 0,06,

tem-se que ela apresenta resultados possíveis para razões volumétricas acima de 0,35. Por fim, a fração molar de saída de 0,01 apresenta valores realistas para toda sua faixa de valores. Nota-se que, em função da diferença significativa no número de microcanais necessário para o escoamento no regime de Taylor e a dependência quase linear do K_l em relação à razão volumétrica, o comprimento para maiores razões volumétricas de gás no caso da fração molar de 0,01 é consideravelmente maior, em função da menor a área de contato total de membrana.

Para avaliar se o valor arbitrado para a pressurização pela bomba de microbolhas foi suficiente vencer a perda de carga e garantir o escoamento nos microcanais, considera-se que a saída do contactor deve ocorrer no mínimo em pressão atmosférica, e, consequentemente, a perda de carga por escoamento no microcanal deve ser menor do que 2 atm – equivalente a 200kPa. A Figura 35 apresenta esta condição para área marcada em vermelho:

Figura 35- Perda de carga máxima no microcanal para diferentes razões volumétricas

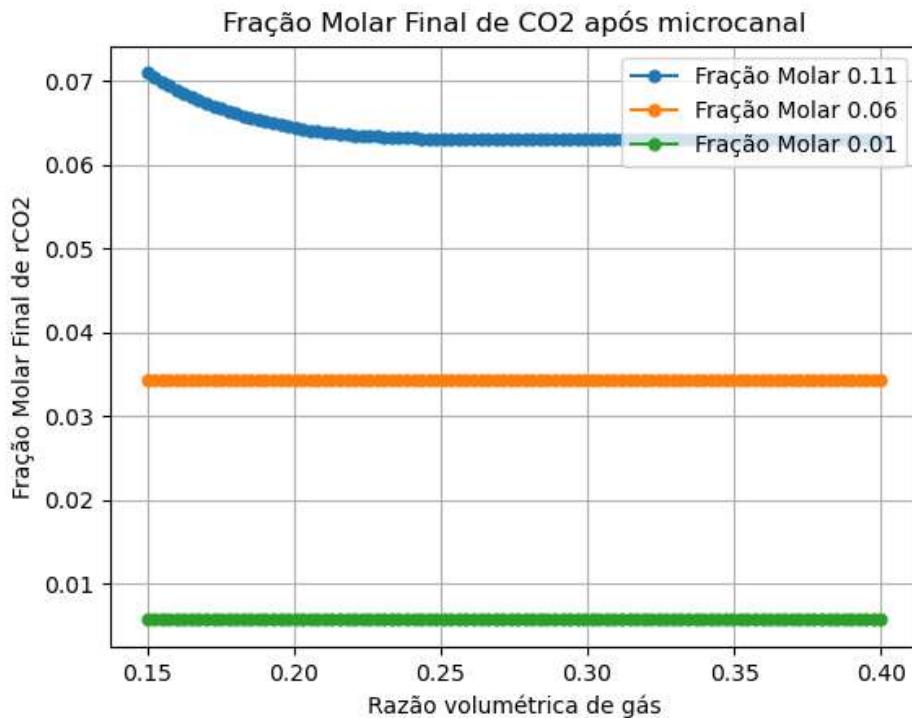


Fonte: Produção Própria

Fica evidente portanto que uma bomba que eleva a pressão de entrada no microcanal a 3 atm é suficiente para permitir a operação do processo para praticamente todas as condições, à exceção de razões volumétricas superiores a 0,37 para a fração molar de saída de 0,01 no contactor.

A última etapa da metodologia, antes das análises finais, é a simulação do microcanal para verificar a fração de saída do CO₂ no gás. O resultado é mostrado na Figura 36:

Figura 36- Fração Molar de CO₂ no gás após passagem no microcanal



Fonte: Produção própria

Observa-se, portanto, que, para as frações molar de saída do contactor de 0,06 e 0,01, ocorre o equilíbrio no microcanal para todas as razões volumétricas estudadas em função da faixa de valores de comprimento do contactor mais elevadas. Já para a fração molar de saída de 0,11, o equilíbrio é atingido somente para uma parcela da gama de valores de comprimento do equipamento, o que era esperado em função da ordem de grandeza desta gama de valores ser consideravelmente pequena – 1 a 3 centímetros. Em relação aos valores finais de fração de saída de CO₂ e eficiência global do equipamento, pode-se organizar a Tabela 1:

Tabela 1 – Frações Finais de saída do equipamento e eficiência do equipamento

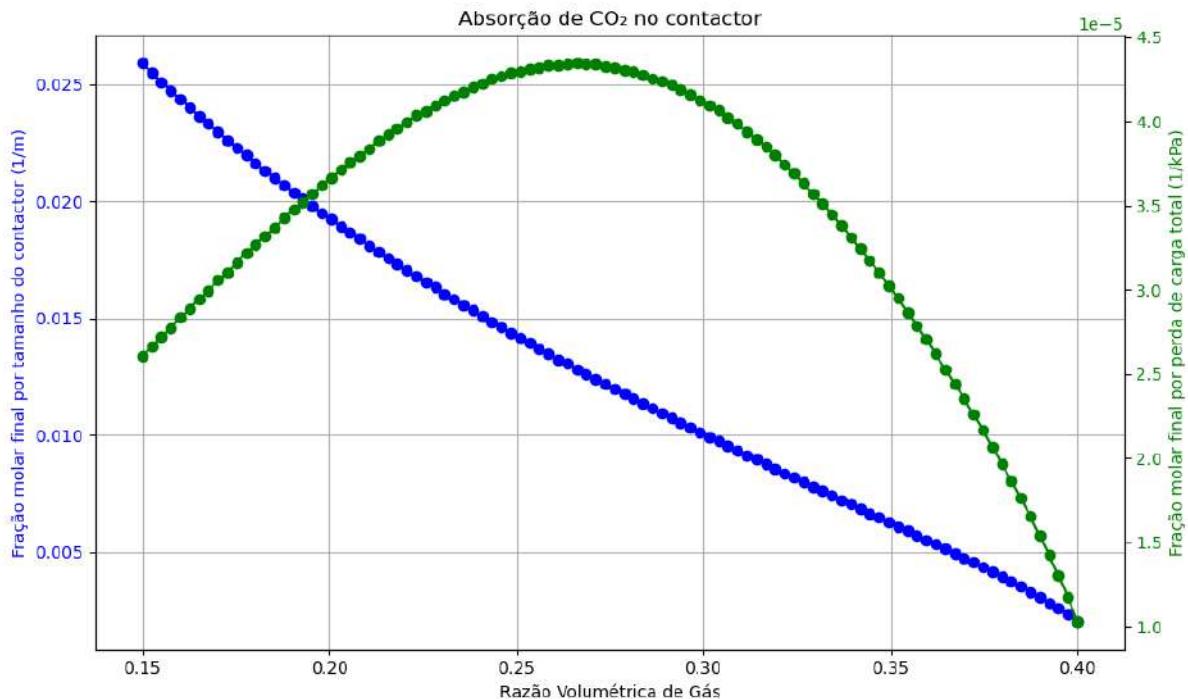
Fração Molar de saída de CO ₂ do contactor	Eficiência na saída do contactor	Fração molar mínima de saída do equipamento	Eficiência global do equipamento
0,11	8,34%	0,063	47,5%
0,06	50,0%	0,034	72,5%
0,01	91,67%	0,00/J57	95,25%

Fonte: Produção Própria

A partir da Tabela 1, nota-se com clareza que, para frações molares elevadas na saída do contactor, o microcanal funciona como uma segunda etapa de absorção, que contribui significativamente para a eficiência global final. Já para valores baixos de CO₂ na saída do contactor, o microcanal possui contribuição mais relevante na melhora da transferência de massa do contactor do que como segunda etapa de absorção, contribuindo de maneira minoritária na absorção global no equipamento.

A partir destes resultados, já podemos entender qual a razão volumétrica mais eficiente para a absorção de CO₂. Para analisar isto, basta dividir a fração molar na saída do microcanal pela perda de carga total do sistema combinado e pelo comprimento do contactor. A partir destas medidas, poderemos entender melhor qual seria a melhor gama de valores para a razão volumétrica no equipamento. Como as frações molares de saída no contactor de 0,11 e 0,06 não produziram uma eficiência global alta de remoção de CO₂ – neste trabalho considerada como maior do que 90% –, serão considerados para esta análise apenas os resultados para a fração molar de saída do contactor de 0,01. A Figura 37 demonstra o resultado:

Figura 37 – Fração molar final por Metro de Contactor e por Perda de Carga no Microcanal e no Venturi



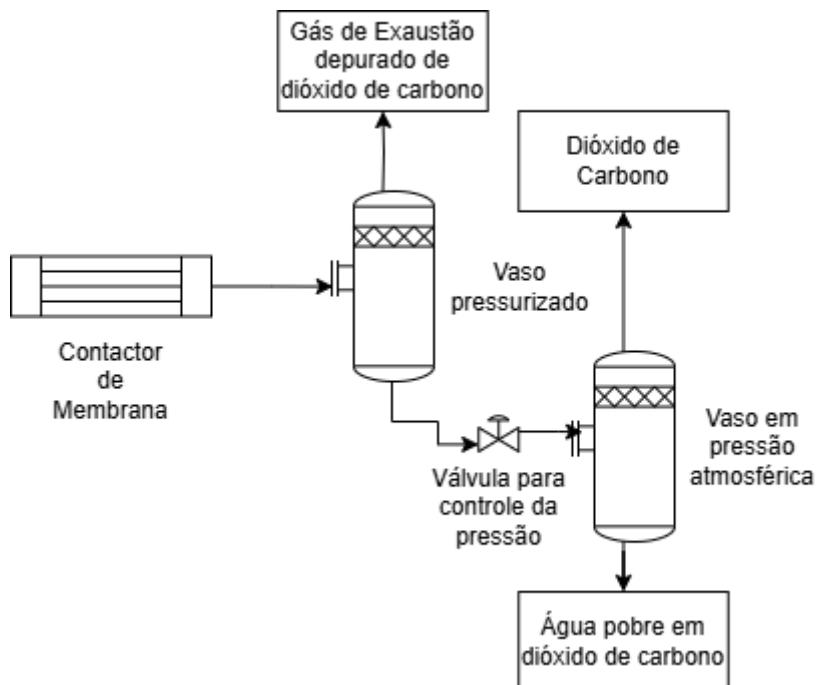
Fonte: Produção Própria

Naturalmente, como não foi encontrado ponto de mínimo na curva de comprimento do contactor, não há ponto “ótimo” para o comprimento do contactor, sendo este uma função decrescente em todo o intervalo. Já para a perda de carga, há um ponto de mínimo próximo a 0,27, que será utilizado como valor “ótimo” para a razão volumétrica.

É fundamental frisar que o valor utilizado para a razão volumétrica não necessariamente representa o valor ótimo para todos os casos possíveis, sendo esta afirmação verdadeira apenas para o caso analisado nas condições analisadas.

Outro ponto importante a ser abordado é como se dará a separação do gás de exaustão depurado da água rica em CO₂. Embora não sejam escopo deste trabalho a simulação e análise deste processo, é necessário frisar que, caso esta separação não seja feita de maneira adequada, há risco do CO₂ solubilizado na água ser liberado junto do restante do gás e haver grande perda de eficiência do equipamento. Uma solução possível seria a colocação de um primeiro vaso pressurizado após a saída do microcanal para a separação do gás depurado da água, tendo em sequência um vaso separador à pressão atmosférica, evitando assim uma possível contaminação do gás depurado com CO₂, caso seja desenhado um sistema com um único vaso separador. A Figura 38 ilustra o esquema de separação proposto:

Figura 38 – Esquema proposto de separação gás-líquido após passagem no lúmen da fibra oca



Fonte: Produção Própria

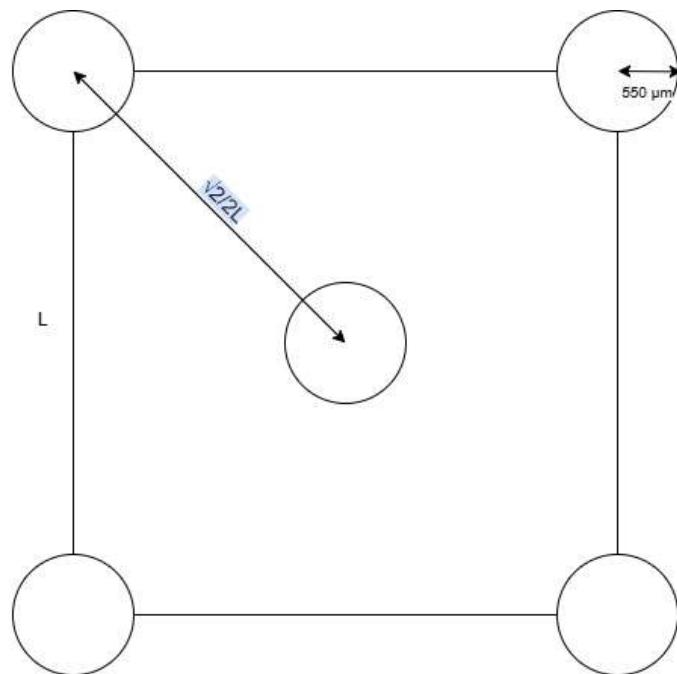
4.4.2. Dimensionamento do equipamento

Para se iniciar o dimensionamento do equipamento e verificar qual seria a vazão máxima permitida dentro de um contactor, em primeiro lugar é necessário entender os fatores que limitam a vazão dentro do contactor. O primeiro fator é a limitação de velocidade dentro do microcanal para escoamento de Taylor, visto que velocidades superficiais de gás acima do permitido podem provocar escoamento anular, diminuindo a eficiência do contactor como um todo.

Dada esta limitação, uma solução natural para permitir uma grande vazão no equipamento seria aumentar o número de microcanais percorrendo o contactor. Esbarra-se, contudo, na segunda limitação: não é possível aumentar de maneira indiscriminada o número de microcanais, visto que, para um diâmetro fixo de contactor, deve ser respeitado uma fração máxima de área transversal ocupada por microcanais.

Assim, é possível realizar o dimensionamento do contactor e determinar uma vazão máxima permitida por contactor. A primeira etapa deve ser estimar a quantidade máxima de microcanais permitidos por m^2 de área transversal. Para isso, deve-se definir o arranjo das fibras no contactor, que no caso será feito conforme Figura 39:

Figura 39– Arranjo Proposto das Fibras no Contactador de Membrana (Fora de Escala)

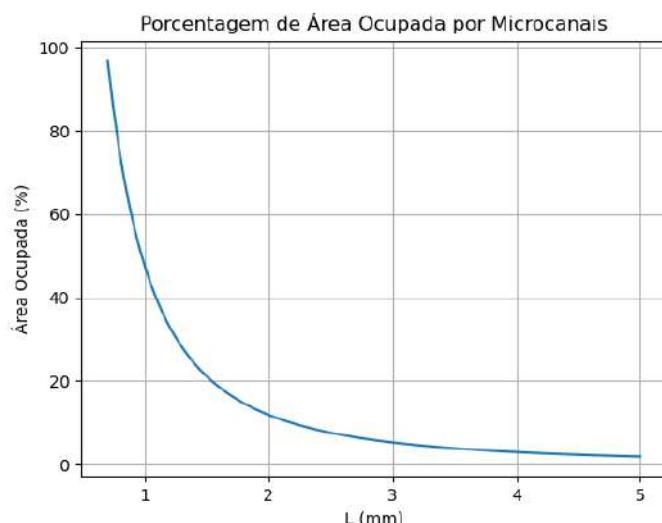


Fonte: Produção Própria

A ideia deste arranjo é maximizar o espaço ocupado pelas fibras sem que haja densidade em excesso de fibras, o que poderia provocar dificuldades no escoamento do gás e perda de carga significativa no lado gás do contactor. A partir da equação (39) abaixo, é possível definir a porcentagem de área ocupada por microcanais definindo L, representada na Figura 40:

$$\% \text{ de área ocupada por microcanais} = \frac{\frac{(550 * 10^{-6})^2 * \pi}{4} * 2}{L^2} = \frac{4,75 * 10^{-7}}{L^2} \quad (39)$$

Figura 40- % Da Área Transversal do Contactor Ocupada por Microcanais



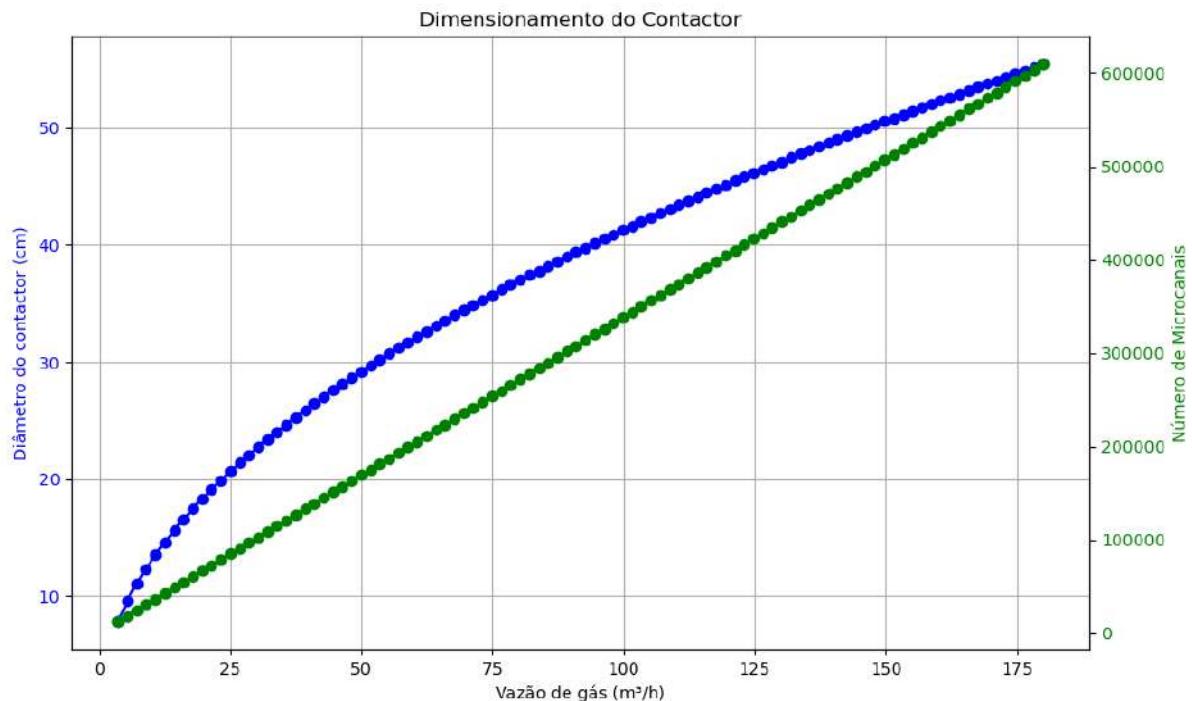
Fonte: Produção Própria

Será utilizado um valor 0,889 milímetros de lado, o que corresponde a 60,0 % de área transversal do contactor ocupado por microcanais. Admite-se que este valor não irá provocar perda de carga no lado do gás e ao mesmo tempo permitir um escoamento com boa agitação, homogêneo e sem impedimentos, o que é fundamental para também ser desconsiderada a resistência à transferência de massa do lado gás, consideração feita para todas as simulações até aqui.

Portanto, a partir da Figura 39, tem-se que uma área transversal de 0,7903 mm² comporta 2 microcanais – cada vértice conta como ¼ de microcanal, naturalmente. Utilizando este valor e os cálculos para o processo integrado na seção anterior, pode-se simular o diâmetro necessário do contactor e quantidade total de microcanais. A razão volumétrica

considerada será 0,27, conforme explicado anteriormente. Este teste está expresso na Figura 40:

Figura 41 – Dimensionamento do Contactor



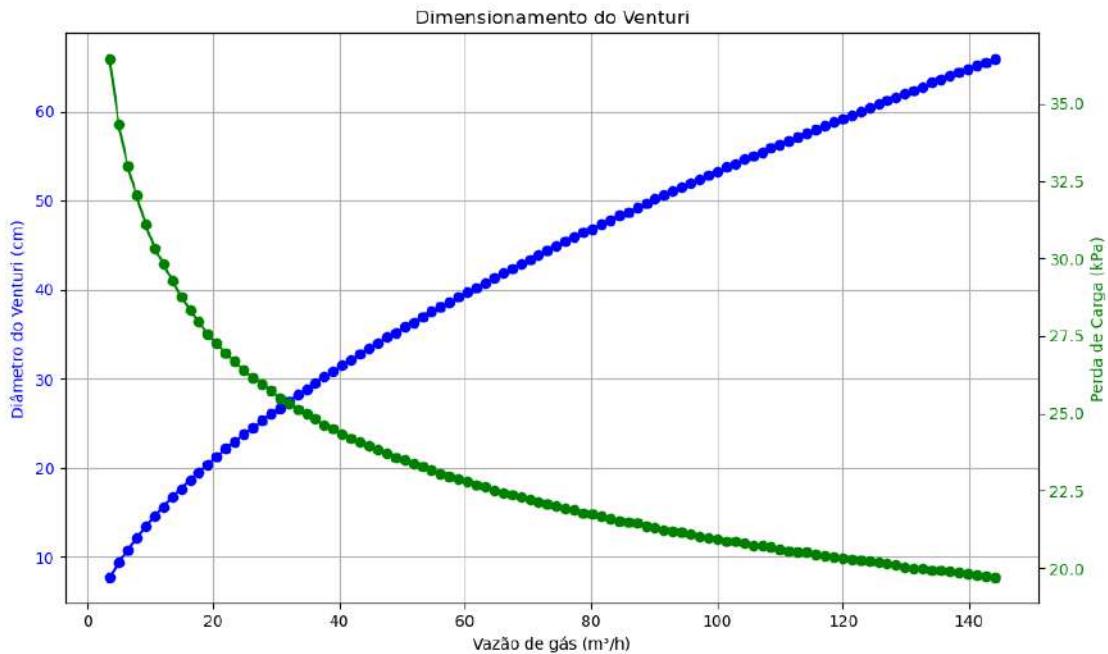
Fonte: Produção Própria

Comparando com o contactor comercialmente disponível Liqui-Cel™ EXF-14x40, vê-se que seu diâmetro útil é de 35,6 centímetros. De tal maneira, um contactor similar a esse desenhado especificamente para absorção utilizando o processo integrado poderia suportar até $74 \text{ m}^3/\text{h}$ com a densidade de empacotamento de 60,0% explicada acima, precisando de cerca de 250 mil microcanais percorrendo o interior do casco.

Sabendo-se que o comprimento útil do contactor Liqui-Cel™ EXF-14x40 é de 1,2 metros, a densidade de empacotamento da fibra no contactor seria de aproximadamente $4363 \text{ m}^2/\text{m}^3$, um valor dentro do padrão para contactores, o que mostra que as estimativas até o momento são razoáveis.

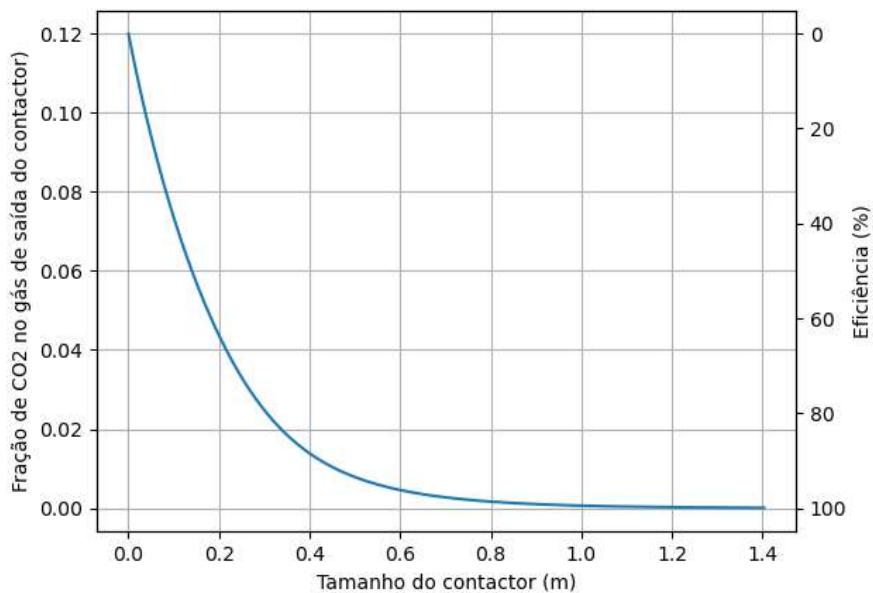
Outros dois aspectos fundamentais do dimensionamento do equipamento são o diâmetro da garganta do Venturi e o tamanho do contactor. As Figura 42 e 43 demonstram isso:

Figura 42 – Dimensionamento do Venturi e Perda de Carga



Fonte: Produção Própria

Figura 43 – Influência do comprimento do Contactor sobre a Fração de CO₂ no Gás na saída do contactor e sobre a eficiência do processo.



Fonte: Produção Própria

Em relação ao Venturi, é necessário um diâmetro maior do que o diâmetro do contactor de cerca de 45cm, o que, embora seja um diâmetro considerável, está dentro do

limite da razoabilidade para Venturi industriais. Além disso, há a possibilidade de dividir o fluxo para dois Venturi, diminuindo o diâmetro de cada, caso esta variável seja de alguma forma limitante. Em relação à perda de carga, esta é baixa e equivale apenas a cerca de 0,225 atm em função majoritariamente do diâmetro elevado.

Em relação ao comprimento do contactor, é necessário dizer que a Figura 42 representa a fração molar de saída e eficiência apenas para o contactor. Conforme mostrado na seção anterior, para uma razão volumétrica de gás de 0,27 e um tamanho de contactor de aproximadamente 47 centímetros, a fração de CO₂ na saída do microcanal será de 0,0057, representando 95,25% de eficiência do equipamento. No entanto, caso se utilize o contactor Liqui-Cel™ EXF-14x40 de cerca de 1,2 metro de comprimento, a fração de saída de CO₂ no contactor será praticamente zero e o gás pode ser considerado depurado de dióxido de carbono ao sair do equipamento. A escolha na prática vai depender das especificações relativas ao descarte de gás, porém, para este trabalho, será considerado o comprimento de 1,2 metro para garantir a depuração de CO₂ do gás.

Para se realizar um *scale-up* e ser capaz de tratar uma vazão maior de gás por hora, será necessário montar um sistema com diversos contactores em paralelo. Por exemplo, um sistema com 5 contactores Liqui-Cel™ EXF-14x40 em sua capacidade máxima pode tratar até 370 m³/h de gás de exaustão, um valor significativo e adequado para a maioria das operações industriais.

5. ANÁLISE TÉCNICO-ECONÔMICA

Embora o objetivo principal da captura de CO₂ do gás de exaustão proveniente da queima de gás natural das turbinas em plataformas *offshore* seja respeitar especificações ambientais e não a obtenção de lucro - ainda mais considerando a receita gerada pela venda do petróleo, produto principal de uma plataforma - é interessante fazer uma análise econômica para verificar se, mesmo não sendo o objetivo, não há eventual *payback* do investimento inicial e retorno positivo ao longo dos anos de operação do equipamento. A análise será baseada no contactor Liqui-Cel™ EXF-14x40 com vazão de 74 m³/h de gás de exaustão tratados, 251 mil microcanais percorrendo o casco, comprimento de 1,2 m e diâmetro útil de 0,356 m.

Em relação ao CAPEX, será utilizado um custo de 100 USD por m² de membrana para estimar o custo do contactor. A área total de membrana no contactor é aproximadamente 521,21 m², o que se traduz em um custo de 52.121 USD. Admitindo-se que o custo com o contactor representa 50% do investimento inicial, tem-se um valor de investimento inicial total de 104.243,66 USD para todo o processo, incluindo a etapa de regeneração sugerida com sistema de vasos em série.

Em relação ao OPEX, como se está utilizando água como líquido absorvente, o custo considerado será somente o de fornecimento de energia para o sistema via bombas, sendo necessária uma pressurização fornecida de 2,225 atm – 0,225atm para o Venturi e 2 atm para o microcanal. Considerando que o sistema funciona com razão volumétrica de 0,27, o volume de líquido é de 150,24 m³/h. Portanto, o custo energético é de 9,29 kPa m³/s ou 9,29 kW. De acordo com Idel (2022), o custo em USD para cada kWh gerado a partir de combustão em turbinas é de 0,028. Assim, tem-se um custo de 0,26 USD por hora que se traduz em um custo operacional de 2.277,63 USD por ano

Por fim, tem-se que estimar as receitas advindas de tal processo, que no caso possui duas fontes principais: os créditos de carbono obtidos pela não liberação do CO₂ na atmosfera e os barris de petróleo adicionais obtidos pela reinjeção do CO₂ capturado. Em relação aos créditos de carbono, considera-se que, para o contactor de 1,2m, a remoção de CO₂ foi completa. Portanto, removem-se 8,88 m³/h de CO₂, correspondendo a 155,3 toneladas por ano de CO₂ removido. Sendo o valor do crédito de carbono em 48 USD por tonelada (SENKEN, 2023), tem-se um custo evitado anual de USD 7.456,52 somente em créditos de carbono, que neste caso será considerado como receita. É importante frisar que não se está considerando o CO₂ emitido pelo próprio processo neste cálculo. Considera-se para o aumento na produção

de petróleo que cada tonelada de CO₂ injetado resulta em 1,5 a 3 barris adicionais de petróleo retirados, segundo relatório da Agência Internacional de Energia (IEA, 2015). Tomando o valor de 2,25 barris por tonelada de CO₂ reinjetada, tem-se um total de 349,5 barris retirados adicionalmente por causa da reinjeção do gás. Considerando a receita líquida – ou seja, retirando os custos da reinjeção e da extração do barril – de 40 USD por barril, tem-se uma segunda fonte de receita estimada em USD 13.980,91 por ano. Portanto, a receita total anual do processo é de USD 21.437,50. Considerando a vida útil do projeto de 10 anos, o tempo de construção como 1 ano e a taxa mínima de atratividade como 12 %, pode-se montar a Tabela 2 apresentando a análise de fluxo de caixa.

Tabela 2 – Análise de Viabilidade Econômica do Projeto

Ano	CAPEX	OPEX	Receita	Fluxo de Caixa	Fluxo de Caixa Descontado	Fluxo de Caixa Acumulado
0	104.243,66			- 104.243,66	- 104.243,66	- 104.243,66
1	-	2.277,63	21.437,50	19.159,88	17.107,03	- 87.136,63
2	-	2.277,63	21.437,50	19.159,88	15.274,14	- 71.862,49
3	-	2.277,63	21.437,50	19.159,88	13.637,62	- 58.224,87
4	-	2.277,63	21.437,50	19.159,88	12.176,45	- 46.048,42
5	-	2.277,63	21.437,50	19.159,88	10.871,83	- 35.176,59
6	-	2.277,63	21.437,50	19.159,88	9.706,99	- 25.469,60
7	-	2.277,63	21.437,50	19.159,88	8.666,96	- 16.802,64
8	-	2.277,63	21.437,50	19.159,88	7.738,35	- 9.064,29
9	-	2.277,63	21.437,50	19.159,88	6.909,24	- 2.155,04
10	-	2.277,63	21.437,50	19.159,88	6.168,97	4.013,93

Fonte: Produção Própria

Em primeiro lugar, nota-se que se trata de um projeto pouco intensivo em investimento inicial, no qual a área de membrana é a maior contribuição. Além disso, os custos operacionais são muito baixos, já que o líquido absorvente utilizado é a própria água.

A partir da Tabela 1, conclui-se que, mesmo o objetivo do projeto não sendo o lucro, mas sim o atendimento a especificações de descarte ambiental do gás de exaustão, tem-se um retorno positivo no último ano do projeto de USD 4.013,93 o que o torna também economicamente viável, mesmo com uma taxa mínima de atratividade elevada.

6. CONCLUSÃO

Neste trabalho, foi avaliado um processo inovador de captura de CO₂ de gases de exaustão de turbinas em plataformas *offshore*. O processo combina absorção do CO₂ em água através da tecnologia de contactores de membrana e microcanais., no qual o gás, além de passar no lado do casco do contactor para remoção, faz uma segunda passagem no lúmen da membrana de fibra oca, que funciona como um microcanal para uma segunda etapa de absorção e contribuindo ainda para incremento do coeficiente de transferência de massa global do contactor. O sistema ainda conta com um Venturi que recebe a corrente de gás exausto do contactor, parcialmente tratado, e se mistura com o solvente regenerado. O Venturi possui o papel de gerar bolhas de diâmetro médio adequado para absorção do CO₂ no microcanal.

Foram realizadas análises individuais de cada etapa do processo (Venturi, Contactor e microcanal), a fim de mapear as variáveis de processo e condições operacionais relevantes assim como investigar a modelagem de cada processo. Como resultado dessas análises recomendou-se a inclusão de uma bomba à montante do Venturi para compensar a perda de carga, além da proposição de diâmetros relativamente elevados para o Venturi de acordo com a vazão de líquido e gás adotadas. Além disso, verificou-se que o Venturi é plenamente capaz de produzir as bolhas com o tamanho necessário para funcionamento do processo, que são maiores do que o microcanal em função da pressurização posterior ao Venturi. Na simulação do microcanal, foi constatado que, para velocidades de líquido e diâmetros hidráulicos que permitem a formação de fluxo de Taylor, o coeficiente volumétrico de transferência de massa (k_{la}) apresenta valores expressivos, cerca de 100 vezes maiores do que outros processos tradicionais de absorção como colunas absorvedoras de leito recheado, além de compatíveis com a literatura. Os fatores limitantes para absorção são a baixa solubilidade do CO₂ na água e a ineficiência de um processo de absorção em paralelo, o que reduz a força motriz ao longo do escoamento. Em relação ao contactor, foi verificado também um valor significativo do coeficiente global de transferência de massa (K_l), provocado principalmente por essa melhora na transferência de massa dentro do microcanal, tornando-se a membrana o limitante da transferência de massa. Com os valores de K_l encontrados, é possível chegar-se a remoções de CO₂ de 80 a 90% com poucos metros de comprimento de contactor, o que seria impossível em um arranjo sem o microcanal e com a própria água como solvente.

Uma vez analisados os processos individualmente, foi feita a análise do processo integrado, sendo verificado que seria plausível a implementação de apenas um contactor de

cerca de 47 centímetros de comprimento para eficiência global de cerca de 95,25% na remoção do CO₂ com uma razão volumétrica de gás na entrada do casco de 0,27. Em relação à demanda energética do processo, seria necessário um total de 2,225 atm além da pressão atmosférica fornecidos por bombas, sendo uma bomba instalada à montante do Venturi fornecendo 0,225 atm e uma bomba de microbolhas à jusante do Venturi fornecendo 2 atm para se vencer a perda de carga no lúmen da fibra oca. Investigando-se mais a fundo o dimensionamento do contactor e a vazão máxima suportada no equipamento, foi utilizado o módulo comercialmente disponível Liqui-Cel™ EXF-14x40 da 3M™ como comparativo e determinou-se que a vazão máxima de gás tratada seria próxima a 74 m³/h por contactor, tendo o casco um diâmetro de 35,6 centímetros e um comprimento do módulo de 1,2 para uma eficiência global na remoção de cerca 100%, o que corresponde a cerca de 155,3 toneladas de CO₂ capturadas por ano.

Por fim, realizou-se uma análise técnico-econômica, levando em conta os custos por m² de membrana, os custos de instalação do sistema, o custo energético de operação do processo e a receita associada à produção incremental de óleo via *Enhanced Oil Recovery* e custos evitados com créditos de carbonos. Verificou-se que, para uma taxa mínima de atratividade de 12% e uma vida útil de 10 anos, o processo é economicamente viável.

Para trabalhos futuros, há alguns pontos de melhoria que podem ser verificados: o primeiro deles é em relação à hidrodinâmica do Venturi e do microcanal. Várias hipóteses foram admitidas em relação à formação de bolhas, sua coalescência e seu tamanho que impactam nos resultados vistos neste trabalho. Portanto, uma simulação CFD pode trazer resultados com maior precisão para uma futura implementação prática deste processo. Outro grande ponto de melhoria é o estudo do k_l do microcanal. Conforme explicado, há poucos estudos relativos ao k_l no microcanal, embora haja diversos estudos em relação ao k_{la} . Adicionalmente, a equação utilizada pode ter gerado resultados superestimados em relação ao K_L final, impactando diretamente na eficiência do contactor. Assim, faz-se necessário um estudo abrangente acerca do comportamento do k_l no microcanal para poder definir se de fato o equipamento é viável utilizando-se água como solvente ou somente com solventes tradicionais de amina. Por fim, também seria interessante o desenvolvimento de um modelo integrado que considerasse o impacto da absorção no microcanal e no contactor de maneira simultânea, avaliando se de fato pode-se admitir que há independência dos processos ou não.

7. REFERÊNCIAS

- AGHEL, Babak et al. **Optimization of monoethanolamine for CO₂ absorption in a microchannel reactor.** Journal of CO₂ Utilization, v. 28, p. 264-273, 2018.c
- AHMAD, A. L. et al. **CO₂ removal using membrane gas absorption.** International Journal of Greenhouse Gas Control, v. 4, n. 3, p. 495-498, 2010.
- AKBAR, M. K.; PLUMMER, D. A.; GHIAASIAAN, S. Mlip. **On gas-liquid two-phase flow regimes in microchannels.** International Journal of Multiphase Flow, v. 29, n. 5, p. 855-865, 2003.
- BERCIC, Gorazd; PINTAR, Albin. **The role of gas bubbles and liquid slug lengths on mass transport in the Taylor flow through capillaries.** Chemical Engineering Science, v. 52, n. 21-22, p. 3709-3719, 1997.
- BORIBUTH, Somnuk et al. **A modeling study on the effects of membrane characteristics and operating parameters on physical absorption of CO₂ by hollow fiber membrane contactor.** Journal of membrane science, v. 380, n. 1-2, p. 21-33, 2011.
- BOOT-HANDFORD, Matthew E. et al. **Carbon capture and storage update.** Energy & Environmental Science, v. 7, n. 1, p. 130-189, 2014.
- CASTRO, Gustavo et al. **Energy Efficiency and Mitigation of Greenhouse Gases in FPSOs Ships.** Proceedings of the ASME 2022 41st International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering. Volume 10: Petroleum Technology. Hamburg, Germany. June 5–10, 2022.
- CHENG, Hao et al. **Microfluidic-based chemical absorption technology for CO₂ capture: Mass transfer dynamics, operating factors and performance intensification.** Renewable and Sustainable Energy Reviews, v. 181, p. 113357, 2023.
- D'ALMEIDA, Katia et al. **OCORRÊNCIA DE CO₂ EM CAMPOS PETROLÍFEROS NA MARGEM LESTE BRASILEIRA.** In: Congresso Brasileiro de Geologia, 49, 2018, Rio de Janeiro. <https://www.epe.gov.br/sites-pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/PublicacoesArquivos/publicacao-322/OCORR%C3%8ANCIA%20DE%20CO2%20EM%20CAMPOS%20PETROL%C3%8DFEROS%20NA%20MARGEM%20LESTE%20BRASILEIRA.PDF>
- DONG, Rui et al. **Numerical simulation of the mass transfer process of CO₂ absorption by different solutions in a microchannel.** The Canadian Journal of Chemical Engineering, v. 98, n. 12, p. 2648-2664, 2020.
- ELHENAWY, Salma et al. **Key applications and potential limitations of ionic liquid membranes in the gas separation process of CO₂, CH₄, N₂, H₂ or mixtures of these gases from various gas streams.** Molecules, v. 25, n. 18, p. 4274, 2020.

MENDES, Felipe Brandão de Souza. **Remoção de CO₂ de ambientes confinados utilizando contactores com membranas e água do mar sintética como absorvente.** Dissertação de mestrado - Programa de Pós-Graduação em Engenharia da Nanotecnologia, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro 2017.

MENDES, Felipe Brandão de Souza. **INTENSIFICATION OF CO₂ REMOVAL FROM LOW PARTIAL PRESSURE STREAMS COUPLING GAS PERMEATION AND MEMBRANE CONTACTORS.** Tese de Doutorado - Programa de Pós-Graduação em Engenharia da Nanotecnologia, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro 2024.

GABBARD, C. H. **Development of a Venturi type bubble generator for use in the molten-salt reactor xenon removal system.** Oak Ridge National Lab.(ORNL), Oak Ridge, TN (United States), 1972.

HESKETH, H. E. **Atomization and cloud behavior in wet scrubbers.** In: Proceedings of the US-USSR Symposium on Control Fine Particulate Emissions, San Francisco. 1974.

HUANG, Jiang et al. **A review on bubble generation and transportation in Venturi-type bubble generators.** Experimental and Computational Multiphase Flow, v. 2, p. 123-134, 2020.

HUANG, Jiang et al. **A visualized study of bubble breakup in small rectangular Venturi channels.** Experimental and Computational Multiphase Flow, v. 1, p. 177-185, 2019.

IDEI, Robert. **Levelized full system costs of electricity.** Energy, v. 259, p. 124905, 2022.

IEA (2024), **CO₂ Emissions in 2023**, IEA, Paris <https://www.iea.org/reports/co2-emissions-in-2023>, Licence: CC BY 4.0

IMTIAZ, Aniqa et al. **A critical review in recent progress of hollow fiber membrane contactors for efficient CO₂ separations.** Chemosphere, v. 325, p. 138300, 2023.

INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. **Storing CO₂ through Enhanced Oil Recovery.** 2015 Disponível em <<https://www.iea.org/reports/storing-co2-through-enhanced-oil-recovery>>. Acesso em 16 nov 2024.

JANATI, Sara et al. **The effect of alkanolamine mixtures on CO₂ absorption efficiency in T-Shaped microchannel.** Environmental Technology & Innovation, v. 24, p. 102006, 2021.

JIANG, Xin et al. **Miniaturization of bubbles by shock waves in gas-liquid two-phase flow in the Venturi tube.** Journal of Thermal Science, v. 30, p. 1068-1076, 2021.

KHAISRI, Sakarin et al. **Comparing membrane resistance and absorption performance of three different membranes in a gas absorption membrane contactor.** Separation and Purification Technology, v. 65, n. 3, p. 290-297, 2009.

KREUTZER, Michiel T. et al. **Pressure drop of Taylor flow in capillaries: impact of slug length.** In: International Conference on Nanochannels, Microchannels, and Minichannels. 2003. p. 519-526.

- LI, Jing-Liang; CHEN, Bing-Hung. **Review of CO₂ absorption using chemical solvents in hollow fiber membrane contactors.** Separation and Purification Technology, v. 41, n. 2, p. 109-122, 2005.
- LIU, Hui; VANDU, Chippala O.; KRISHNA, Rajamani. **Hydrodynamics of Taylor flow in vertical capillaries: flow regimes, bubble rise velocity, liquid slug length, and pressure drop.** Industrial & engineering chemistry research, v. 44, n. 14, p. 4884-4897, 2005.
- LUBETKIN, Steven D.; AKHTAR, Mahmood. **The variation of surface tension and contact angle under applied pressure of dissolved gases, and the effects of these changes on the rate of bubble nucleation.** Journal of colloid and interface science, v. 180, n. 1, p. 43-60, 1996.
- MOSADEGH-SEDGHI, S., et al., **Wetting phenomenon in membrane contactors – causes and prevention.** Journal of Membrane Science v. 452, p. 332–353, 2014;
- NOMURA, Yasumichi et al. **Study on bubble breakup mechanism in a Venturi tube.** In: Fluids Engineering Division Summer Meeting. 2011. p. 2533-2540.
- NIU, Haining et al. **Effects of design and operating parameters on CO₂ absorption in microchannel contactors.** Industrial & Engineering Chemistry Research, v. 48, n. 18, p. 8629-8634, 2009.
- OTTO, Alexander et al. **Closing the loop: captured CO₂ as a feedstock in the chemical industry.** Energy & environmental science, v. 8, n. 11, p. 3283-3297, 2015.
- PEAKALL, J.; WARBURTON, J. **Surface tension in small hydraulic river models-the significance of the Weber number.** Journal of Hydrology (New Zealand), p. 199-212, 1996.
- QUARTARONE, Eliana; MUSTARELLI, Piercarlo; MAGISTRIS, Aldo. **Transport properties of porous PVDF membranes.** The Journal of Physical Chemistry B, v. 106, n. 42, p. 10828-10833, 2002
- RANGWALA, Huseni A. **Absorption of carbon dioxide into aqueous solutions using hollow fiber membrane contactors.** Journal of Membrane Science, v. 112, n. 2, p. 229-240, 1996.
- SAKAMATAPAN, Kittipong et al. **Experimental investigation of the microbubble generation using a venturi-type bubble generator.** Case Studies in Thermal Engineering, v. 27, p. 101238, 2021.
- SATTARI-NAJAFABADI, Mehdi et al. **Mass transfer between phases in microchannels: A review.** Chemical Engineering and Processing-Process Intensification, v. 127, p. 213-237, 2018.
- SCHOLES, Colin A.; KENTISH, Sandra E.; QADER, Abdul. **Membrane gas-solvent contactor pilot plant trials for post-combustion CO₂ capture.** Separation and Purification Technology, v. 237, p. 116470, 2020.
- SENKEN. **Understanding carbon credit prices.** 2023. Disponível em <https://www.senken.io/academy/pricing-of-carbon->

credits#:~:text=Carbon%20Credit%20Pricing%20forecast&text=The%20amount%20of%20lower%2Dquality,50%20per%20credit%20in%202023>. Acessi em 24 nov 2024.

SHAO, N.; GAVRIILIDIS, A.; ANGELI, P. **Flow regimes for adiabatic gas–liquid flow in microchannels.** Chemical Engineering Science, v. 64, n. 11, p. 2749-2761, 2009.

SUN, Licheng et al. **Characteristics and mechanism of bubble breakup in a bubble generator developed for a small TMSR.** Annals of Nuclear Energy, v. 109, p. 69-81, 2017.

TAY, W. H., K. K. Lau, L. S. Lai, A. M. Shariff, and T. Wang. **Current development and challenges in the intensified absorption technology for natural gas purification at offshore condition.** Journal of Natural Gas Science and Engineering, 71 (2019).

THIELS, Matt et al. **Modelling and design of carbon dioxide absorption in rotating packed bed and packed column.** IFAC-PapersOnLine, v. 49, n. 7, p. 895-900, 2016.

VAN BATEN, J. M.; KRISHNA, R. **CFD simulations of mass transfer from Taylor bubbles rising in circular capillaries.** Chemical engineering science, v. 59, n. 12, p. 2535-2545, 2004.

VAZ JR, Sílvio; DE SOUZA, Ana Paula Rodrigues; BAETA, Bruno Eduardo Lobo. **Technologies for carbon dioxide capture: A review applied to energy sectors.** Cleaner Engineering and Technology, v. 8, p. 100456, 2022.

VILAIDA, Xayalak; KYTHAVONE, Sengratry; IIJIMA, Toshio. **Effect of throat size on performance of microbubble generator and waste water treatment.** In: IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. IOP Publishing, 2019. p. 012031.

YIN, Junlian et al. **Experimental study on the bubble generation characteristics for an venturi type bubble generator.** International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 91, p. 218-224, 2015.

YIN, Yaran et al. **Effect of solvent on CO₂ absorption performance in the microchannel.** Journal of Molecular Liquids, v. 357, p. 119133, 2022.

YU, Cheng-Hsiu et al. **A review of CO₂ capture by absorption and adsorption.** Aerosol and air quality research, v. 12, n. 5, p. 745-769, 2012.

YUE, Jun et al. **An experimental investigation of gas–liquid two-phase flow in single microchannel contactors.** Chemical Engineering Science, v. 63, n. 16, p. 4189-4202, 2008.

YUE, Jun et al. **Hydrodynamics and mass transfer characteristics in gas–liquid flow through a rectangular microchannel.** Chemical Engineering Science, v. 62, n. 7, p. 2096-2108, 2007

ZHANG, Yuqi et al. **Mass transfer and capture of carbon dioxide using amino acids sodium aqueous solution in microchannel.** Chemical Engineering and Processing-Process Intensification, v. 173, p. 108831, 2022.

ZHANG, Ze et al.. **Hollow fiber membrane contactor absorption of CO₂ from the flue gas: review and perspective**. Glob. Nest J, v. 16, p. 355-374, 2014.

ZHAO, Liang et al. **Effects of the divergent angle on bubble transportation in a rectangular Venturi channel and its performance in producing fine bubbles**. International Journal of Multiphase Flow, v. 114, p. 192-206, 2019.

ZHAO, Shuaifei et al. **Status and progress of membrane contactors in post-combustion carbon capture: A state-of-the-art review of new developments**. Journal of membrane science, v. 511, p. 180-206, 2016.

APÊNDICE A - Programa em Python para cálculo do microcanal

```

import numpy as np

import matplotlib.pyplot as plt

from scipy.integrate import solve_ivp

#Fixando velocidade e variando diâmetro

# Constantes

D_CO2 = 1.9e-9    # Coeficiente de difusão do CO2 (m2/s)

rho_g = 1.244      # Densidade do gás (kg/m3)

rho_l = 997        # Densidade do líquido (kg/m3)

e_g = 0.35         # Fração volumétrica de gás (fração)

v_l = 2.0          # Velocidade do líquido (m/s)

mu_g = 1.79e-5    # Viscosidade do gás (Pa.s)

mu_l = 0.001       # Viscosidade do líquido (Pa.s)

def calc_reynolds(rho, v, d_h, mu):

    """Calcula o número de Reynolds."""

    return (rho * v * d_h) / mu

def calc_schmidt(mu, rho, D):

    """Calcula o número de Schmidt."""

    return mu / (rho * D)

def calc_kl_a(d_h, D_CO2, rho_g, mu_g, rho_l, v_l, mu_l, Sc_l):

    v_g = (e_g * v_l) / (0.8333 - e_g)

    Re_g = calc_reynolds(rho_g, v_g, d_h, mu_g) # Reynolds para o gás

```

```

Re_l = calc_reynolds(rho_l, v_l, d_h, mu_l) # Reynolds para o líquido
return (0.084 * (Re_g ** 0.213) * (Re_l ** 0.937) * (Sc_l ** 0.5) * D_CO2) / (d_h ** 2)

# Cálculo do número de Schmidt (fixo para o gráfico)
Sc_l = calc_schmidt(mu_l, rho_l, D_CO2)

# Gerar valores de d_h entre 0.0007 e 0.0002 metros (700 μm a 200 μm)
dh_values = np.linspace(0.0007, 0.0002, 10000)

# Converter d_h para micrômetros (1 m = 1e6 μm)
dh_values_micrometers = dh_values * 1e6

# Calcular k_l * a (s-1) para cada valor de d_h
kl_a_values = [
    calc_kl_a(dh, D_CO2, rho_g, mu_g, rho_l, v_l, mu_l, Sc_l)
    for dh in dh_values
]

# Plotar o gráfico
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(dh_values_micrometers, kl_a_values, marker='o', linestyle='-', color='blue',
         markersize=5)

# Títulos e rótulos em português
plt.title('Variação de kla com o Diâmetro Hidráulico $d_h$', fontsize=16)
plt.xlabel('Diâmetro Hidráulico $d_h$ (μm)', fontsize=14)
plt.ylabel('$k_l \cdot a$ (s-1)', fontsize=14)
plt.grid(True)

```

```

# Exibir o gráfico
plt.show()

#Fixando diâmetro e variando velocidade
d_h=500*10**-6

#Gerando valores para a velocidade
vl_values=np.linspace(0,3,10000)

# Calcular k_1 * a (s-1) para cada valor de v_1
kl_a_values = [
    calc_kl_a(d_h, D_CO2, rho_g, mu_g, rho_l, vl, mu_l, Sc_l)
    for vl in vl_values
]

# Plotar o gráfico
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(vl_values, kl_a_values, marker='o', linestyle='-', color='blue', markersize=5)

# Títulos e rótulos em português
plt.title('Variação de kla com a Velocidade do Líquido', fontsize=16)
plt.xlabel('Velocidade do Líquido (m/s)', fontsize=14)
plt.ylabel('$k_1 \cdot a$ (s-1)', fontsize=14)
plt.grid(True)

# Exibir o gráfico
plt.show()

```

```
plt.show()
```

```
def calcular_kla(delta_p_l):
```

```
"""
```

Calcula o coeficiente volumétrico de transferência de massa (k_la)

dado $\Delta P/L$, usando a equação:

$$k_{la} = 0.0863 * (\Delta P / L)^{0.881}$$

Parâmetros:

delta_p_l (float ou ndarray): Razão entre a queda de pressão e o comprimento.

Retorno:

float ou ndarray: Valores calculados de k_la.

```
"""
```

$$\text{return } 0.0863 * (\text{delta_p_l} ** 0.881)$$

```
# Gera um intervalo de valores de  $\Delta P / L$  entre 0.1 e 100
```

```
valores_delta_p_l = np.linspace(0.1, 1200, 10000)
```

```
valores_kla = calcular_kla(valores_delta_p_l)
```

```
# Cria o gráfico:  $\Delta P/L$  (eixo y) vs k_la (eixo x)
```

```
plt.figure(figsize=(8, 6))
```

```
plt.plot(valores_kla, valores_delta_p_l, marker='o', linestyle='-',  
color='b', markersize=5, label=' $\Delta P/L$  vs k_la')
```

```
# Adiciona título e rótulos aos eixos
```

```
plt.xlabel('k_l \cdot a (s^-1)')
```

```
plt.ylabel('ΔP / L (kPa/m)')
```

```
plt.title('ΔP / L vs Coeficiente Volumétrico de Transferência de Massa (k_la)')
```

```
plt.grid(True)
```

```
plt.legend()
```

```
# Exibe o gráfico
```

```
plt.show()
```

```
# Primeiro valor para o cálculo
```

```
d_h_fixo = 500e-6 # Diâmetro hidráulico (m)
```

```
e_g=0.014
```

```
v_l_1 = 2.0 # Velocidade do líquido (m/s)
```

```
v_g_1=(e_g * v_l_1) / (0.8333 -e_g)
```

```
# primeiro kla
```

```
kl_a_fixo1 = calc_kl_a(d_h_fixo, D_CO2, rho_g, mu_g, rho_l, v_l_1, mu_l, Sc_l)
```

```
# Segundo valor para o cálculo
```

```
e_g=0.010
```

```
v_l_2 = 1.75 # Velocidade do líquido (m/s)
```

```
v_g_2=(e_g * v_l_2) / (0.8333 -e_g)
```

```
# segundo kla
```

```
kl_a_fixo2 = calc_kl_a(d_h_fixo, D_CO2, rho_g, mu_g, rho_l, v_l_2, mu_l, Sc_l)
```

```
# Terceiro valor para o cálculo
```

```
e_g=0.005
```

```
v_l_3 = 1 # Velocidade do líquido (m/s)
```

```
v_g_3=(e_g * v_l_3) / (0.8333 -e_g)
```

```
# Terceiro kla
```

```
kl_a_fixo3 = calc_kl_a(d_h_fixo, D_CO2, rho_g, mu_g, rho_l, v_l_3, mu_l, Sc_l)
```

```
# Constantes e Parâmetros
```

```
L_values = np.linspace(0.01, 0.6, 100) # Comprimento variando de 0,1 a 1 m
```

```
kla_values = [kl_a_fixo1, kl_a_fixo2, kl_a_fixo3] # Coeficiente de transferência de massa  
(1/s)
```

```
H = 0.031 # Constante de Henry (mol/L/atm)
```

```
P_total = 3.0 # Pressão total (atm)
```

```
y_CO2_in = 0.005 # Fração molar de CO2 na entrada (5%)
```

```
C_in = 0.0 # Concentração inicial de CO2 na fase líquida (mol/L)
```

```
massa_molar_CO2 = 44.01 # Massa molar de CO2 (g/mol)
```

```
r=0.082
```

```
t=293
```

```
lb=0.005
```

```
# Pressão parcial inicial de CO2 no gás
```

```
p_CO2_in = y_CO2_in * P_total
```

```
def modelo(z, y, kla):
```

"""Sistema de EDOs: $y[0] = C(z)$ (concentração no líquido),

$y[1] = p_{CO2}(z)$ (pressão parcial no gás)."""

$C, p_{CO2} = y$

Concentração de equilíbrio usando a Lei de Henry

$C_{estrela} = H * p_{CO2}$

Ajustando a taxa de absorção para o gas hold-up

$dC_{dz} = k_{la} * (C_{estrela} - C) * (e_g / (1 - e_g)) * (1 / lb)$

$dp_{CO2_{dz}} = -k_{la} * (p_{CO2} * H - C) * (r * t) * (e_g / (1 - e_g)) * (1 / lb)$

return [dC_dz, dp_CO2_dz]

def resolver_e_plotar():

Gráfico 1: Concentração no líquido (mg/L)

plt.figure(figsize=(10, 6))

colors = ['blue', 'green', 'orange']

for i, k_{la} in enumerate(k_{la}_values):

for L in L_values:

z_eval = np.linspace(0, L, 100)

sol = solve_ivp(modelo, [0, L], [C_in, p_CO2_in], args=(k_{la},), method='RK45', t_eval=z_eval)

z = sol.t

C = sol.y[0] * massa_molar_CO2 * 1e3 # Concentração em mg/L

Plotando apenas uma vez por valor de k_{la}

```

if L == L_values[-1]:
    plt.plot(z, C, label=f'k_l a = {kla:.3f}', color=colors[i])

plt.xlabel('Comprimento do Canal (m)')
plt.ylabel('Concentração de CO2 no Líquido (mg/L)')
plt.title('Variação da Concentração de CO2 no Líquido')
plt.grid(True)
plt.legend()
plt.tight_layout()
plt.show()

# Gráfico 2: Fração Molar no Gás
plt.figure(figsize=(10, 6))

for i, kla in enumerate(kla_values):
    for L in L_values:
        z_eval = np.linspace(0, L, 100)
        sol = solve_ivp(modelo, [0, L], [C_in, p_CO2_in], args=(kla,), method='RK45',
                        t_eval=z_eval)

        z = sol.t
        y_CO2 = sol.y[1] / P_total # Fração molar de CO2 no gás

        # Plotando apenas uma vez por valor de k_l a
        if L == L_values[-1]:
            plt.plot(z, y_CO2, label=f'k_l a = {kla:.3f}', color=colors[i])

plt.xlabel('Comprimento do Canal (m)')

```

```
plt.ylabel('Fração Molar de CO2 no Gás')  
plt.title('Variação da Fração Molar de CO2 no Gás')  
plt.grid(True)  
plt.legend()  
plt.tight_layout()  
plt.show()  
  
# Executando a função para resolver e plotar os resultados  
resolver_e_plotar()
```

APÊNDICE B – Programa em python para cálculo do processo integrado para apenas uma remoção no contactor

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import solve_ivp

# 1.1 Diâmetro do Venturi
# Parâmetros iniciais
rho = 997      # Densidade do líquido (kg/m³)
mi = 0.001     # Viscosidade dinâmica do líquido (Pa.s)
c = 3.7 * 10**4 # Constante de ajuste empírico
ang_div = 30    # Ângulo de divergência do Venturi (graus)
d_microcanal = 0.0005 # Diâmetro do microcanal (m)
Q_gas = 0.01    # Vazão de gás (m³/s)
P_Microcanal=3 #pressão no microcanal (atm)
d_bolhas_desejado=d_microcanal*P_Microcanal***(1/3)

fracao_CO2_entrada=0.12
densidade_CO2=1.997
fracao_CO2_saida=0.01

Q_gas_atualizado=0.01*(1-fracao_CO2_entrada)/(1-fracao_CO2_saida)

# Valores de gas hold-up
hold_up_values = np.linspace(0.15, 0.40, 100) # Valores de gas hold-up
hold_up_atualizado=[]
# Preparando listas para armazenar os dados
venturi_para_hold_up = []
q_líquido_values = [] # Lista para armazenar Q_líquido

# Loop para encontrar o diâmetro do Venturi correspondente a cada gas hold-up
for hold_up in hold_up_values:
    # Calculando a vazão de líquido fora do loop das bolhas

```

```

Q_líquido = Q_gás * (1 - hold_up) / hold_up
hold_up_venturimicrocanal=Q_gas_atualizado/(Q_líquido+Q_gas_atualizado)
hold_up_atualizado.append(hold_up_venturimicrocanal)
q_líquido_values.append(Q_líquido) # Armazenando a vazão de líquido

```

for hold_up in hold_up_atualizado:

```
for d_th in np.linspace(0.005, 2, 10000): # Diâmetro do Venturi (m)
```

```
# Área da garganta do Venturi
```

```
A_garganta = (np.pi * d_th**2) / 4
```

```
# Calculando a velocidade do líquido
```

```
V_líquido = Q_líquido / (A_garganta * (1 - hold_up))
```

```
# Número de Reynolds
```

```
Re_l_th = (rho * V_líquido * d_th) / mi
```

```
d_bolhas = d_th * c * Re_l_th**-(1.1 + (1 - np.exp(-ang_div / 90))) # Em m
```

```
# Verificando se o diâmetro da bolha se iguala ao do microcanal
```

```
if np.isclose(d_bolhas, d_bolhas_desejado, atol=2 * 10**(-6)): # Tolerância de 3 μm
```

```
    venturi_para_hold_up.append((hold_up, d_th * 1000, Q_líquido)) # Convertendo para mm e armazenando Q_líquido
```

```
    break # Passar para o próximo hold-up
```

```
# Separando os dados para plotagem
```

```
x_vals = [item[0] for item in venturi_para_hold_up] # Gas hold-ups
```

```
y_vals = [item[1] for item in venturi_para_hold_up] # Diâmetros do Venturi (mm)
```

```
y_vals=np.array(y_vals)
```

```
# Cálculo da perda de carga para cada hold_up
```

```
rho_G = 1.244 # Densidade do gás, em kg/m³
```

```
delta_P_values = [] # Lista para armazenar a perda de carga
```

```

# Loop para calcular a perda de carga usando os diâmetros do Venturi
for (hold_up, d_th, _) in venturi_para_hold_up:
    A_garganta = (np.pi * (d_th / 1000)**2) / 4 # Área da garganta do Venturi
    vg = Q_gas / (A_garganta * hold_up) # Velocidade média do gás
    delta_P = 190 * rho_G * vg**2 * ((np.pi * (d_th / 1000)**2) / 4)**0.133 * (hold_up)**0.78
    delta_P_values.append(delta_P)

# Gráfico: Diâmetro do Venturi vs. Gas Hold-up
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(hold_up_values, y_vals/10, marker='o', markersize=8, label='D_th para 500 μm')
plt.xlabel('Razão Volumétrica de Gás')
plt.ylabel('Diâmetro do Venturi (mm)')
plt.title('Diâmetro do Venturi vs. Razão Volumétrica de Gás')
plt.grid(True)
plt.legend(loc='upper right')
plt.show()

# Plotagem do gráfico de perda de carga
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(hold_up_values, delta_P_values, label=r'$\Delta P$')
plt.xlabel(r'Razão Volumétrica de Gás')
plt.ylabel(r'$\Delta P$ (kPa)')
plt.title(r'Perda de carga no Venturi')
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()

#atualização nova do hold up pós pressurização

hold_up_microcanal=[]

for q_liquido in q_liquido_values:
    hold_up_novo=(Q_gas_atualizado/P_Microcanal)/((Q_gas/P_Microcanal)+q_liquido)

```

```

hold_up_microcanal.append(hold_up_novo)

#novas propriedade do gás e CO2 em função da pressurização a 3 atm
rho_G=4.5

# Cálculo de velocidades máximas e número mínimo de microcanais
# Gama de velocidades e gas hold-ups
v_l = np.linspace(0.01, 20, 10000) # Velocidade do líquido (m/s)
sigma = 0.072

# Lista para armazenar resultados
velocidades_max = []
num_microcanais = []
pares_hold_up_microcanais = [] # Lista para armazenar os pares

# Cálculo do lado direito da equação
right_side = (sigma / rho_G) * 0.0172 * (rho / sigma) ** 0.25

# Função para calcular d_v para uma dada velocidade e hold-up
def calcular_d_v(v_l, epsilon_g):
    return ((epsilon_g * v_l / (0.833 - epsilon_g) - v_l)**2 /
           (right_side * np.sqrt(v_l)))**(-4/3)

# Loop sobre cada hold-up
for hold_up, Q_liquido in zip(hold_up_microcanal, q_liquido_values):
    # Calcular d_v para cada velocidade
    d_v_values = calcular_d_v(v_l, hold_up)

    # Encontrar a velocidade onde d_v = d_microcanal
    indices_validos = np.isclose(d_v_values, d_microcanal, atol=1*10**(-6)) # μm
    if np.any(indices_validos):
        v_max = v_l[indices_validos][0] # Pega a primeira ocorrência
        velocidades_max.append(v_max)

```

```

# Calcula o número mínimo de microcanais
n_microcanais = Q_liquido / (v_max * (np.pi * (d_microcanal / 2)**2)) # Número de
microcanais
n_microcanais_int = int(np.ceil(n_microcanais)) # Arredonda para cima
num_microcanais.append(n_microcanais_int)

# Armazenar o par (hold-up, número de microcanais)
pares_hold_up_microcanais.append((hold_up, n_microcanais_int))

else:
    velocidades_max.append(np.nan) # Caso não haja solução
    num_microcanais.append(np.nan)

# Gráfico: Velocidade máxima (dividida por 2) vs. gas hold-up
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(hold_up_values, velocidades_max, 'o-', label='Velocidade Máxima do líquido')
plt.xlabel('Razão Volumétrica de Gás')
plt.ylabel('Velocidade Máxima do líquido (m/s)')
plt.title('Velocidade Máxima vs. Razão Volumétrica de Gás')
plt.grid(True)
plt.legend()
plt.show()

# Gráfico: Número mínimo de microcanais vs. gas hold-up
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(hold_up_values, num_microcanais, 'o-', color='green', label='Número Mínimo de
Microcanais')
plt.xlabel('Razão Volumétrica de Gás')
plt.ylabel('Número Mínimo de Microcanais')
plt.title('Número Mínimo de Microcanais vs. Razão Volumétrica de Gás')
plt.grid(True)
plt.legend()
plt.show()

```

```
#Kla Microcanal
```

```
# Constantes
```

```
D_CO2 = 1.9e-9      # Coeficiente de difusão do CO2 (m2/s)
mu_g = 1.79e-5     # Viscosidade do gás (Pa.s)
```

```
def calc_schmidt(mu, rho, D):
```

```
    """Calcula o número de Schmidt."""

```

```
    return mu / (rho * D)
```

```
def calc_reynolds(rho, v, d_h, mu):
```

```
    """Calcula o número de Reynolds."""

```

```
    return (rho * v * d_h) / mu
```

```
# Cálculo do número de Schmidt (fixo para todo cálculo)
```

```
Sc_l = calc_schmidt(mi, rho, D_CO2)
```

```
# Lista para armazenar valores de kLa para cada gas hold-up
```

```
kla_por_hold_up = []
```

```
delta_p_values= []
kla_values= []

```

```
# Loop para calcular o kLa para cada valor de gas hold-up
```

```
for i, hold_up in enumerate(hold_up_microcanal):
```

```
    # Velocidade máxima/4 para o gas hold-up atual
```

```
    v_liquido = velocidades_max[i]
```

```
# Cálculo da velocidade do gás correspondente
```

```
v_gas = (hold_up * v_liquido) / (0.8333 - hold_up)
```

```
# Cálculo dos números de Reynolds
```

```
Re_g = calc_reynolds(rho_G, v_gas, d_microcanal, mu_g)
```

```
Re_l = calc_reynolds(rho, v_liquido, d_microcanal, mi)
```

```

# Cálculo do kLa para o gas hold-up atual
kla = (
    0.084 * (Re_g ** 0.213) * (Re_l ** 0.937) * (Sc_l ** 0.5) * D_CO2
) / (d_microcanal ** 2)

# Armazenar o valor de kla
kla_por_hold_up.append((hold_up, kla))
kla_values.append(kla)
delta_p= (kla/0.0863)**1/0.881
delta_p_values.append(delta_p)

# Separando dados para plotagem
hold_up_vals = [item[0] for item in kla_por_hold_up]
kla_vals = [item[1] for item in kla_por_hold_up]

# Plotagem do gráfico kLa vs. gas hold-up
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(hold_up_values, kla_vals, marker='o', linestyle='-', color='b', label='kLa')

# Personalizando o gráfico
plt.xlabel('Razão Volumétrica de Gás')
plt.ylabel('kLa (s-1)')
plt.title('kLa vs. Razão Volumétrica de Gás')
plt.grid(True)
plt.legend(loc='best')
plt.show()

# Plotagem do gráfico de perda de carga
plt.figure(figsize=(10, 6))

```

```

plt.plot(hold_up_values, delta_p_values, marker='o', linestyle='-', color='b', label='kLa')

# Personalizando o gráfico
plt.xlabel('Razão Volumétrica de Gás')
plt.ylabel('Perda de Carga (kPa/m)')
plt.title('Perda de Carga no microcanal')
plt.grid(True)
plt.legend(loc='best')
plt.show()

```

Constantes

```

R = 8.314 # Constante dos gases (J/mol·K)
T = 293 # Temperatura (K)
H = 0.031 # Constante de Henry para CO2 na água (mol/(L·atm))
d_microcanal_ext = 550*10**(-6) # Diâmetro externo do canal (m)

```

L=5*10**(-6)

```
d_ln=(d_microcanal_ext - d_microcanal) / (np.log(d_microcanal_ext) - np.log(d_microcanal))
```

Parâmetros da membrana

```

D_CO2_poro = 6.3e-7 # Difusividade do CO2 nos poros (m2/s)
delta =(d_microcanal_ext-d_microcanal)/2 # Espessura da membrana (m)
epsilon = 0.30 # Porosidade da membrana (fração)
tau = 2.6 # Tortuosidade da membrana

```

Função para calcular o coeficiente da membrana (k_m)

```

def calculate_km(D_CO2_poro, delta, epsilon, tau):
    return (D_CO2_poro / delta) * (epsilon / tau)

```

Calcula k_m

```
k_m = calculate_km(D_CO2_poro, delta, epsilon, tau)
```

```

KL_values=[]
for i, hold_up in enumerate(hold_up_microcanal):

    v_liquido = velocidades_max[i]
    term_membrane = (H)*(d_microcanal_ext / 524*10**(-6))
    v_g = (hold_up * v_liquido) / (0.8333 -hold_up)
    kl=(2*1.41/np.pi)*np.sqrt (D_CO2*v_g/d_microcanal)
    inverse_KL = (1 /kl) + (1 / (k_m)) * term_membrane
    Kl=1/inverse_KL
    KL_values.append(Kl)

# Plotagem
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(hold_up_values, KL_values, label='$K_L$', color='b')
plt.xlabel('Razão Volumétrica de Gás', fontsize=12)
plt.ylabel('$K_L$ (m/s)', fontsize=12)
plt.title('Relação entre Razão Volumétrica de Gás e $K_L$', fontsize=14)
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()

#CÁLCULO CONTACTOR
P=1
conc_cO2_final=[]
conc_CO2_entrada_liquido=0
Tamanhos=[]
massa_molar_CO2=44.01
delta_p_total_values=[]

# Cálculo da quantidade total de CO2 disponível para absorção (na entrada)
Q_CO2_entrada = Q_gas * fracao_CO2_entrada # Vazão volumétrica de CO2 na entrada em m3/s
quantidade_CO2_disponivel = Q_CO2_entrada * densidade_CO2 * 1000 # Quantidade total disponível em g/s

```

```

for i, hold_up in enumerate(hold_up_values):
    Q_liquido=q_liquido_values[i]
    kg= KL_values[i]
    numero=num_microcanais[i]
    delta_p=delta_p_values[i]

    # Cálculo da quantidade de CO2 na saída
    Q_CO2_saida = Q_gas *(fracao_CO2_saida/fracao_CO2_entrada)* fracao_CO2_saida # Vazão volumétrica de CO2 na saída em m3/s
    quantidade_CO2_saida = Q_CO2_saida * densidade_CO2 * 1000 # Quantidade na saída em g/s

    # Cálculo da quantidade de CO2 efetivamente absorvida
    quantidade_CO2_absorvida_efetiva = quantidade_CO2_disponivel - quantidade_CO2_saida

    # Cálculo da concentração de saída no líquido
    conc_CO2_saida_liquido = quantidade_CO2_absorvida_efetiva / Q_liquido
    conc_CO2_final.append(conc_CO2_saida_liquido)
    conc_CO2_saida_liquido = (conc_CO2_saida_liquido / 1000) / massa_molar_CO2

    # Cálculo do DT0 e DTL
    DT0 = H * P * fracao_CO2_entrada - conc_CO2_saida_liquido
    DTL = H * P * fracao_CO2_saida - conc_CO2_entrada_liquido

    # Cálculo do LMTD
    LMTD = (DT0 - DTL) / np.log(DT0 / DTL)
    # Cálculo do ACM
    ACM = (conc_CO2_saida_liquido - conc_CO2_entrada_liquido) * Q_liquido / (kg * LMTD)
    tamanho= ACM/(np.pi*numero*d_microcanal_ext)
    delta_p_total=tamanho*delta_p
    delta_p_total_values.append(delta_p_total)

```

```
Tamanhos.append(tamanho)
```

```
# Plotando ACM x Fração molar de saída
```

```
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(hold_up_values, Tamanhos, marker='o')
plt.title('Absorção de CO2 no contactor')
plt.xlabel('Razão Volumétrica de Gás')
plt.ylabel('Comprimento necessário (m)')
plt.grid(True)
plt.show()
```

```
plt.figure(figsize=(10, 6))
```

```
plt.plot(hold_up_values, conc_cO2_final,marker='o')
plt.title('Absorção de CO2 no contactor')
plt.xlabel('Razão volumétrica de gás')
plt.ylabel('Concentração de CO2 no líquido (mg/L)')
plt.grid(True)
plt.show()
```

```
plt.figure(figsize=(10, 6))
```

```
plt.plot(hold_up_values, delta_p_total_values,marker='o')
y_fixo = 200
plt.axhline(y=y_fixo, color='r', linestyle='--', label=f'Perda de carga máxima = {y_fixo}kPa')
plt.legend()
plt.title('Absorção de CO2 no contactor')
plt.xlabel('Razão volumétrica de gás')
plt.ylabel('Perda de carga no microcanal (kPa)')
plt.grid(True)
plt.show()
```

```
#SIMULAÇÃO MICROCANAL
```

```

t=293
r=0.082
lb=0.005
C_in=0
p_CO2_in=fracao_CO2_saida*P_Microcanal
import numpy as np
from scipy.integrate import solve_ivp
import matplotlib.pyplot as plt

# Parâmetros constantes
H = 0.031 # constante de Henry (exemplo)
R = 0.082 # constante dos gases em J/(mol·K)
T = 293.15 # temperatura em K
L_B = 0.005 # comprimento característico

# Dados variáveis
eps_g_array = np.array(hold_up_microcanal) # exemplo de valores de epsilon_g
kla_array = np.array(kla_values) # exemplo de valores de kla associados a cada epsilon_g
comprimento_array = np.array(Tamanhos) # comprimento total correspondente a cada epsilon_g

# Função para calcular as derivadas
def derivadas(z, y, kla, eps_g):
    C, p_CO2 = y
    dC_dz = kla * (H * p_CO2 - C) * (eps_g / ((1 - eps_g) * L_B))
    dpCO2_dz = -kla * (p_CO2 * H - C) * (eps_g * R * T / ((1 - eps_g) * L_B))
    return [dC_dz, dpCO2_dz]

# Condições iniciais (ajuste conforme necessário)
C_inicial = 0.0 # concentração inicial de CO2 no líquido
p_CO2_inicial = P_Microcanal*fracao_CO2_saida # pressão parcial inicial de CO2 no gás

# Lista para armazenar os valores finais da fração molar

```

```

molar_fraction_final = []

# Loop para resolver as equações para cada epsilon_g
for i, eps_g in enumerate(eps_g_array):
    kla = kla_array[i]
    comprimento = comprimento_array[i]

    # Condições iniciais
    cond_iniciais = [C_inicial, p_CO2_inicial]

    # Intervalo de solução
    z_span = (0, comprimento)

    # Resolução do sistema usando Runge-Kutta
    sol = solve_ivp(derivadas, z_span, cond_iniciais, args=(kla, eps_g), method='RK45',
dense_output=True)

    # Armazenar o valor final da fração molar de CO2 no gás
    p_CO2_final = sol.y[1, -1] # p_CO2 final
    frac_molar_final = p_CO2_final / P_Microcanal
    molar_fraction_final.append(frac_molar_final)

molar_fraction_final=np.array(molar_fraction_final)

# Plotar o gráfico fora do loop
plt.figure()
plt.plot(hold_up_values, molar_fraction_final, marker='o', linestyle='-', color='b')
plt.title('Fração Molar Final de CO2 após microcanal')
plt.xlabel('Razão volumétrica de gás')
plt.ylim(0.004,0.006)
plt.ylabel('Fração Molar Final de rCO2')
plt.grid(True)
plt.show()

```

```

estimativafinaltamanho=molar_fraction_final/Tamanhos
estimativafinalpdc=molar_fraction_final/(np.array(delta_P_values)+np.array(delta_p_values)
*np.array(Tamanhos))

# Criar a figura e o primeiro eixo y
fig, ax1 = plt.subplots(figsize=(10, 6))

# Plotar a primeira curva no eixo y esquerdo
ax1.plot(hold_up_values, estimativafinaltamanho, marker='o', color='b', label='CO2 absorvido
por metro')
ax1.set_xlabel('Razão Volumétrica de Gás')
ax1.set_ylabel('Fração molar final por tamanho do contactor (1/m)', color='b')
ax1.tick_params(axis='y', labelcolor='b')
ax1.grid(True)

# Criar o segundo eixo y compartilhando o mesmo eixo x
ax2 = ax1.twinx()
ax2.plot(hold_up_values, estimativafinalpdc, marker='o', color='g', label='CO2 absorvido por
perda de carga')
ax2.set_ylabel('Fração molar final por perda de carga total (1/kPa)', color='g')
ax2.tick_params(axis='y', labelcolor='g')

# Título e exibição do gráfico
plt.title('Absorção de CO2 no contactor')
fig.tight_layout() # Ajusta o layout para que os eixos não se sobreponham
plt.show()

```