

## ANÁLISE DE PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS DE CO<sub>2</sub> + IMPUREZAS COM VISUAL ANALYTICS

Maria Fernanda Marmilli de Alvarenga Campos Franzin<sup>2</sup>, Antonio Marinho Barbosa Neto<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Vinculado ao projeto “Análise Integrada de Sistemas de Produção”

<sup>2</sup> Acadêmico (a) do Curso de Engenharia de Petróleo – CESFI – Bolsista - PROBIC/UDESC

<sup>3</sup> Orientador, Departamento de Engenharia de Petróleo – CESFI - [antonio.marinho@udesc.br](mailto:antonio.marinho@udesc.br)

A nova análise divulgada pela Agência Internacional de Energia (AIE) mostrou que as emissões globais de CO<sub>2</sub> relacionadas à energia aumentaram acentuadamente em 6% em 2021, chegando a 36,3 gigatoneladas (Gt) em comparação com o ano anterior (Allan, 2019). Em 2020, as emissões de CO<sub>2</sub> provenientes de combustíveis fósseis atingiram aproximadamente 34,81 Gt (IEA 2022). Em vista desse cenário, o setor global de descarbonização está crescendo rapidamente, impulsionando o ecodesenvolvimento e promovendo melhorias por meio do potencial próprio dos países (Araújo et al., 2017). Diante desse cenário, a corrida por novas tecnologias com o objetivo de diminuir a emissão de CO<sub>2</sub> é um assunto global, especialmente na área de óleo e gás, onde a emissão é maior, causando danos irreparáveis a camada de ozônio, contribuindo diretamente nas mudanças climáticas cada vez mais abruptas. Desse modo, uma das soluções encontradas foi a Captura, Utilização, e Armazenamento de Carbono (CCUS). Esta tecnologia envolve diversos processos complexos que abrangem misturas ricas em CO<sub>2</sub>, condições extremas de pressão e temperatura, a geologia das formações rochosas e a injeção desses fluidos em reservatórios de petróleo.

O CO<sub>2</sub> capturado proveniente de atividades industriais não é puro, ou seja, o gás capturado é uma mistura de CO<sub>2</sub> com outros componentes, como Ar, N<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO etc. A presença destes contaminantes alteram as propriedades termofísicas do CO<sub>2</sub>, além de influenciar no comportamento do envelope de fases, especialmente no equilíbrio líquido-vapor (ELV), afetando diretamente processos tais como compressão, transporte, e a injeção em formações rochosas.

De forma a otimizar os processos, surge a motivação de investigar as propriedades termofísicas e o comportamento de fases das misturas ricas em CO<sub>2</sub>, já que, a presença de impurezas causa impactos nas propriedades do fluido e, conseqüentemente, na segurança do projeto.

Diante deste contexto, o objetivo deste trabalho é realizar uma análise de dados de propriedades termofísicas e dados de equilíbrio de fases de CO<sub>2</sub> e argônio (Ar), em diferentes concentrações e condições de pressão e temperatura relevantes para as tecnologias de CCUS. As análises de dados através do desenvolvimento de um *dashboard* buscou investigar as interações entre o CO<sub>2</sub> e o argônio, e em como essa impureza afeta as propriedades termofísicas e o comportamento de fases (ELV) do sistema. Durante o processo de injeção em reservatórios geológicos, o CO<sub>2</sub> misturado com argônio estará sujeito a condições extremas de pressão e temperatura. Compreender como o argônio influencia essas propriedades é essencial para garantir a eficiência e segurança nas operações de captura, transporte, injeção e armazenamento de carbono.

De modo a facilitar a análise do comportamento dos sistemas CO<sub>2</sub> – Ar, foram extraídas as propriedades presentes na Tabela 1. Ao todo foram levantados 23 artigos relevantes, totalizando 1991 dados, que foram submetidos a um pré-processamento de dados a fim de padronizá-los.

| Parâmetros      | Intervalo de Dados |
|-----------------|--------------------|
| Pressão [Mpa]   | 0 - 400            |
| Temperatura [K] | 80 - 750           |
| $x_{CO_2}$      | 0 - 1              |
| $x_{Ar}$        | 0 - 1              |

**Tabela 1.** Intervalos de valores em que cada propriedade foi obtida.

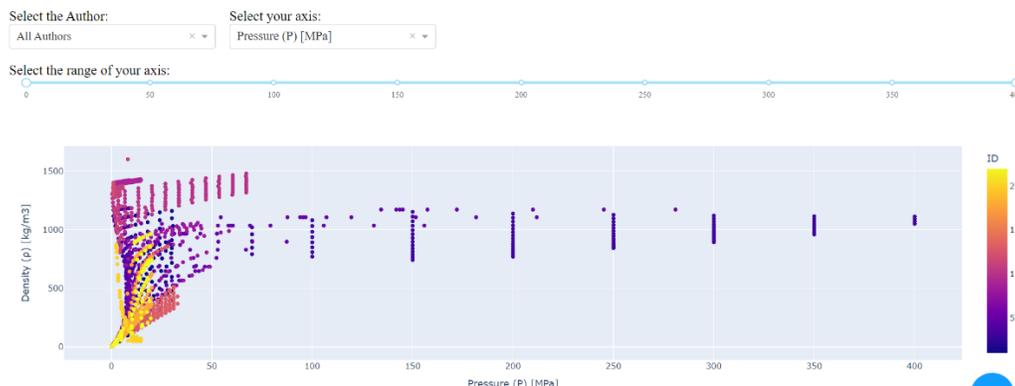
O pré-processamento consistiu em converter os dados de volume em densidade, separar os dados de equilíbrio líquido-vapor dos de densidade, e organizar os pontos em Pressão (MPa), Temperatura (K), Saturação, Fração molar de Ar e fração molar de CO<sub>2</sub> para o segmento de Equilíbrio Líquido Vapor, e Pressão (Mpa), Temperatura (K), Saturação, e Densidade (kg/m<sup>3</sup>), o que resultou em uma tabela completa, padronizada, e de fácil importação para a linguagem Python no formato de *dataframe*, pronta para a criação de uma ferramenta interativa de análise, um *dashboard*.

O desenvolvimento da ferramenta analítica foi realizado utilizando as bibliotecas Dash, como base para o *dashboard*, e Plotly, para criar visualizações de dados dinâmicas e interativas. Todo o desenvolvimento seguiu as melhores práticas da indústria de *software*, com Python como linguagem principal, utilizando ambientes isolados e reproduzíveis com Conda para o gerenciamento eficiente das dependências. O controle de versão foi realizado com *Git* e o desenvolvimento colaborativo ocorreu via *GitHub*, onde práticas modernas como *Pull Requests* e revisão de código foram adotadas para garantir a qualidade e integridade do código.

O *dashboard* foi equipado com funcionalidades práticas, como filtros para seleção de dados por autor, opções de análise de densidade em função de pressão ou temperatura, controles deslizantes para definição de intervalos específicos de pressão e temperatura, e visualizações interativas que facilitam a análise dos dados, como apresentado nas Figuras 1 e 2 para a densidade e para os dados de equilíbrio líquido-vapor, respectivamente.

### Density and Pressure Dashboard

Dashboard about Density vs Pressure of PureCO2 and Argon.

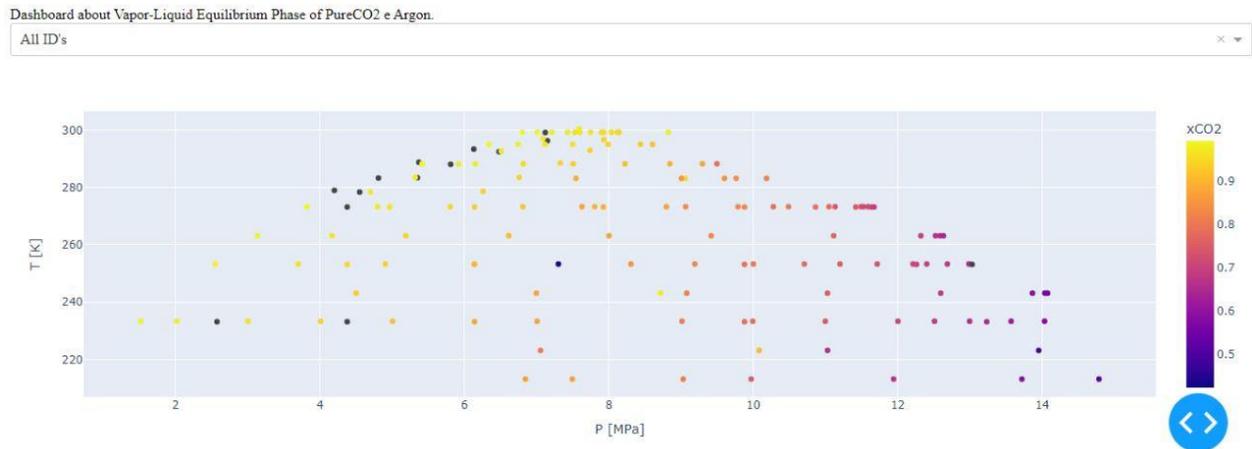


**Figura 1.** Dashboard interativo com os dados de densidade em função da Pressão

Na análise dos dados, é possível observar que no intervalo de pressão de 0 a 50 MPa, há uma variação maior na densidade, que depende fortemente da concentração de argônio. À medida que a pressão aumenta, as variações se tornam mais estabilizadas, mostrando que, em condições de pressão

muito alta, a densidade do sistema é menos afetada pela concentração de argônio. Isso é especialmente visível nas regiões de alta densidade (acima de  $1000 \text{ kg/m}^3$ ), onde a mistura tende a se comportar de forma mais homogênea, independentemente da concentração do contaminante.

### VLE Dashboard



**Figura 2.** Dashboard interativo com os dados de VLE em função da Pressão mostrando as referências do ponto.

Na análise dos dados, é possível observar que em pressões de 2 a 5 MPa há uma variação significativa na fração molar de  $\text{CO}_2$  ( $x_{\text{CO}_2}$ ), que depende fortemente da concentração de argônio. À medida que a pressão aumenta, especialmente acima de 10 MPa, as variações se tornam mais estabilizadas, mostrando que, em condições de alta pressão, a composição do sistema é menos afetada pela concentração de argônio. Isso é especialmente visível nas regiões com fração molar mais baixa de  $\text{CO}_2$  (indicadas pelas cores roxas e azuis), onde a mistura tende a se comportar de forma mais homogênea, independentemente da temperatura ou concentração de argônio.

Em conclusão, este trabalho destacou a importância de compreender o comportamento termodinâmico e físico-químico de misturas de  $\text{CO}_2$  com impurezas, como o argônio, em processos de CCUS. A análise dos dados demonstrou que a presença de argônio influencia diretamente as propriedades termodinâmicas e o comportamento de fases (ELV), especialmente em condições extremas de pressão e temperatura. A ferramenta analítica desenvolvida, através de um *dashboard* interativo, facilitou a visualização e análise dos dados, fornecendo *insights* valiosos para a otimização dos processos de CCUS. O uso de tecnologias modernas, como Python e bibliotecas como Dash e Plotly, contribuiu para uma abordagem eficiente e interativa, alinhada com as melhores práticas da indústria de software, permitindo o desenvolvimento colaborativo e de alta qualidade.

**Palavras-chave:**  $\text{CO}_2$ . Ar. Densidade. ELV. *Dashboard*.