

12º CONGRESSO BRASILEIRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM PETRÓLEO E GÁS



TÍTULO DO TRABALHO:

FERRAMENTA PARA ANÁLISE E VISUALIZAÇÃO DE DADOS EXPERIMENTAIS DE DENSIDADE PARA SISTEMAS DE DIÓXIDO DE CARBONO E ARGÔNIO

AUTORES:

Bernardo S. Woitas¹, Maria Fernanda M. A. C. Franzin¹, Leonardo A. Lemos¹, Giovanna Girotto¹, Joana J. Müller¹, Diego T. Volpato¹, Antonio M. Barbosa Neto¹, Gustavo G. Ribeiro¹

INSTITUIÇÃO:

ThermoPhase – FCSRG, Departamento de Engenharia de Petróleo, Universidade do Estado de Santa Catarina

FERRAMENTA PARA ANÁLISE E VISUALIZAÇÃO DE DADOS EXPERIMENTAIS DE DENSIDADE PARA SISTEMAS DE DIÓXIDO DE CARBONO E ARGÔNIO

Resumo

Desde o Acordo de Paris em 2015, que estabeleceu metas para a redução de emissões de dióxido de carbono, novas tecnologias foram desenvolvidas para processos envolvendo Captura, Utilização e Armazenamento de Carbono (CCUS). Nesse contexto, o aumento das operações envolvendo fluidos com alto teor de CO₂ tem exigido uma modelagem precisa das propriedades termofísicas, como a densidade. Assim, a obtenção e o uso de dados experimentais são essenciais para ajustar os parâmetros de modelos termodinâmicos nas condições operacionais de interesse. Nesse sentido, com o objetivo de auxiliar na análise das características termodinâmicas de misturas de CO₂ e Ar em estudos de CCUS, este trabalho apresenta o desenvolvimento de um painel com funcionalidades para explorar a visualização de dados experimentais de densidade. Uma extensa revisão bibliográfica foi realizada para compilar uma base de dados experimental que descreve as densidades das misturas em função da pressão e temperatura. Um total de 279 pontos de dados para Ar puro e 1712 pontos de dados para a mistura CO₂ – Ar foram selecionados de 23 artigos, dentro de uma faixa de pressão, temperatura e fração molar de 0 a 400 MPa, 80 a 750K e 0 a 1, respectivamente. Após a coleta, os dados passaram por um processo de tratamento e pré-processamento, que envolveu verificação e remoção de duplicatas e tratamento de valores nulos. Um formato padrão para organizar os dados e referências foi estabelecido para facilitar futuras manipulações e análises. Os dados foram ajustados de acordo com os requisitos do painel, incluindo concatenação de dados, transformação de volume molar em densidade e conversão de unidades, garantindo a compatibilidade dos dados de diferentes fontes. Um framework em Dash foi construído para visualizar dados de pressão, temperatura e densidade. As funcionalidades da biblioteca Plotly foram exploradas para criar visualizações de dados dinâmicas e interativas. Para conveniência nas consultas, foram implementados filtros para selecionar um autor específico, com a capacidade de selecionar parte dos dados ou visualizar o conjunto completo, e um controle deslizante para definir intervalos específicos de pressão e temperatura. Em resumo, o painel proposto se apresenta como uma ferramenta para explorar dados de fluidos com alto teor de CO₂ e impurezas, potencialmente auxiliando na construção de modelos termofluidodinâmicos e em várias aplicações envolvendo esses tipos de misturas, que são de grande relevância no contexto da transição energética.

Palavras-chave: Dados, CO₂ – Ar, Dashboard.

Abstract

Since the Paris agreement in 2015, in which targets were established to reduce carbon dioxide emissions, new technologies have been developed for processes involving carbon capture, use and storage (CCUS). In that regard, the increase in operations involving fluids with a high CO₂ content has required accurate modeling of thermophysical properties, such as density. To this end, knowledge of experimental data and its pressure and temperature conditions is essential. Then, this information is essential to define the adjustment of parameters and the ability to apply thermodynamic models. In this context, with the aim of assisting the analysis of thermodynamic characteristics of mixtures of CO₂ and Ar in CCUS studies, this work presents the development of a dashboard with features to explore the visualization of experimental density data. An extensive collection of literature was carried out to create

an experimental database that described the properties of mixtures as a function of pressure and temperature. 279 data were selected for pure Air and 1712 data for the CO₂ – Air mixture, within 23 articles, in a range of pressure, temperature and molar fraction from 0 to 400 MPa, 80 to 750K and 0 to 1 respectively. After collection, the data was subjected to a treatment and pre-processing process, which involved checking and removing duplicates and handling null values. A standard format for organizing data and references was established to facilitate their manipulation and future analysis. The data was adjusted according to the dashboard requirements, including data concatenation, transformation of molar volume to density and unit conversion, ensuring greater precision. To build the project, the Dash framework was used to visualize pressure, temperature and density data. The features of the Plotly library were explored to create dynamic and interactive data visualizations. For query convenience, filters have been implemented to select a specific author, with the ability to select part of the data or view the entire data set, and a slider to set specific pressure and temperature ranges. In short, the proposed dashboard presents itself as a tool for exploring data on fluids with a high CO₂ content with impurities, which can assist in the construction of thermofluid dynamic models and various applications involving these types of mixtures, which are of great relevance in the context of energy transition, for example.

Keywords: CCUS, Dashboard, CO₂.

Introdução

A nova análise divulgada pela Agência Internacional de Energia (AIE) mostrou que as emissões globais de CO₂ 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 CO₂ 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). Assim, a busca mundial por novas tecnologias para reduzir as emissões de dióxido de carbono está crescendo exponencialmente, especialmente na indústria de óleo e gás, que é uma das maiores emissoras. O CO₂ -- um gás causador de efeito estufa -- contribui para o aquecimento global, podendo afetar ecossistemas e causar mudanças climáticas. Além disso, o aumento das emissões de CO₂ está relacionado à degradação da camada de ozônio, que é crucial para proteger a Terra da radiação ultravioleta prejudicial. Neste contexto, buscando diminuir a presença desse gás no ambiente, tecnologias envolvendo Captura, Utilização e Armazenamento de Carbono (CCUS) são emergentes.

Apesar de ser uma alternativa viável, processos de CCUS (captura, utilização e armazenamento de carbono) são altamente complexos, envolvendo desafios específicos relacionados à composição do CO₂ com contaminantes, além das condições de pressão e temperatura que frequentemente excedem seu ponto crítico. Compreender o comportamento de sistemas ricos em CO₂ em uma ampla faixa de condições operacionais é crucial, já que o transporte por dutos submarinos pode ocorrer em temperaturas próximas a 0 °C, enquanto o CO₂ em reservatórios pode estar a 70 °C e alta pressão. Essas variações extremas afetam as propriedades das misturas contendo CO₂, tornando essencial o conhecimento acurado das propriedades termodinâmicas para projetar com eficiência e segurança operações de CCUS, minimizando riscos e otimizando o desempenho do processo.

Neste trabalho, com o objetivo de explorar e analisar o comportamento de fases de sistemas ricos em CO₂ com impurezas (no caso, Argônio), foi compilada uma base de dados contendo 279 registros para Ar puro e 1712 registros para a mistura CO₂-Ar, extraídos de 23 artigos. Esses dados abrangem um intervalo de pressão, temperatura e fração molar de 0 a 400 MPa, 80 a 750K, e 0 a 1, respectivamente. Um dashboard foi desenvolvido com funcionalidades para explorar a visualização das propriedades das misturas (densidade e viscosidade) em função da temperatura e pressão. A exploração detalhada dessas propriedades é fundamental, pois as condições operacionais variam amplamente, desde temperaturas muito baixas em dutos submarinos até altas temperaturas e pressões em reservatórios, conforme mencionado anteriormente.

Metodologia

Coleta e Tratamento de Dados

Para investigar as propriedades de densidade e viscosidade de Ar puro e misturas de CO₂-Ar em função da pressão e temperatura, realizamos uma coleta de dados utilizando ferramentas como Google Acadêmico e Research Rabbit, identificando 23 artigos relevantes. Os dados foram organizados em planilhas do Excel®, compondo um banco de dados interno do grupo de pesquisa. Para facilitar a organização, os dados foram identificados por ID, associando cada conjunto de dados às respectivas impurezas e aos autores dos artigos fonte.

Para os dados de CO₂ puro foram selecionados artigos como: (Klimeck et al., 2001), (Saleh et al., 2005), (Jûza et al., 1965), (Duschek et al., 1990), (Michels et al., 1935), (ELY et al., 1988), (Yang et al., 2015) e (Al-Siyabi, 2013). Para os dados de Equilíbrio Líquido-Vapor (VLE), Argônio puro e mistura de CO₂ e Ar utilizamos os seguintes artigos: (VAN ITTERBEEK et al., 1960), (Street et al., 1969), (Albuquerque, 1980), (Terry, 1969), (AHMAD, M et al., 2014), (COQUELET et al., 2017), (MANTOVANI, M et al., 2011), (WEDEMANN, S et al., 2018), (SARASHINA, E et al., 1971), (KESTIN, J et al., 1966), (WEGGE, R, 2016) e (KAMINISHI, G et al., 1968).

Durante o pré-processamento dos dados, as medições de volume foram convertidas em dados de densidade. Foram separados os dados de equilíbrio líquido e vapor, assim como os dados de densidade, em diferentes segmentos. A organização dos pontos experimentais foi disposta conforme a fração molar de Ar, a fração molar de CO₂, a temperatura (T em Kelvin) e a pressão (P em MPa). Adicionalmente, foi incluída a densidade (ρ em kg/m³) como uma coluna adicional. Isso resultou em uma tabela completa e padronizada, facilitando o acesso e a manipulação dos dados experimentais para futuros estudos e aplicações. A Tabela 1 apresenta os tipos de sistemas, suas propriedades e dados que compõem as colunas da base de dados utilizada para criar o Dashboard.

	VLE (Equilíbrio Líquido-Vapor)	Densidade
Propriedades das colunas	Pressão, Temperatura, Saturação, Fração Molar de Ar, Fração Molar de CO ₂ , e Viscosidade	Pressão, Temperatura, Saturação, Fração Molar de Ar, Fração Molar de CO ₂

Tabela 1: Dados que compõe as colunas da nossa base de dados

Ambiente de Desenvolvimento e Ferramentas

O desenvolvimento da ferramenta analítica foi realizado com o auxílio das bibliotecas *Dash*, que serviu como base para o dashboard, e *Plotly*, utilizada para criar visualizações de dados dinâmicas e interativas. O dashboard foi equipado com diversas funcionalidades convenientes: filtros para seleção de dados baseados no autor, opções de análise por densidade em função da pressão ou temperatura, controles deslizantes para definição de intervalos específicos de pressão e temperatura, e visualizações interativas que ajudam a análise dos dados de densidade em relação à pressão e temperatura.

O desenvolvimento foi realizado seguindo boas práticas da indústria de software. Foi empregado *Python* como linguagem de programação principal e ambientes isolados e reproduzíveis com *Conda*, garantindo que todas as dependências fossem gerenciadas de forma eficiente e consistente. O controle de versão foi realizado com *Git*, e o desenvolvimento colaborativo ocorreu via *GitHub*. Adotamos práticas modernas de desenvolvimento de software em equipe, como *Pull Requests* e Revisão de Código, assegurando a qualidade e a integridade do código. A Figura 1 apresenta um diagrama que representa os processos de criação e desenvolvimento descritos.

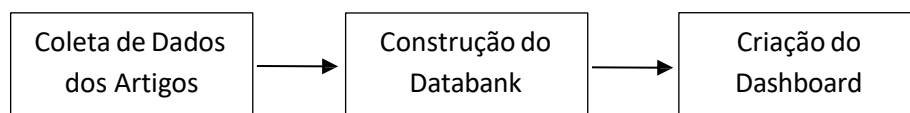


Figura 1: Fluxograma do Processo de Criação e Desenvolvimento da Ferramenta Analítica

Resultados e Discussão

Nesta seção, diversas funcionalidades do dashboard proposto são demonstradas. A Figura 2 mostra o dashboard desenvolvido para explorar os fluidos com alto teor de CO₂ e impurezas (no caso, Ar), exemplificando a consulta sobre dados de densidade em função da pressão. Para a busca de um dado específico, é possível a utilização de um filtro de seleção de autor (Figura 3). Por outro lado, caso seja necessário realizar uma análise de pressão ou temperatura, a ferramenta conta com um seletor de eixos (Figura 4) onde altera-se o gráfico de acordo com a propriedade desejada. A Figura 4 exemplifica o filtro deslizante para seleção do intervalo do valor das propriedades em análise.

Density and Pressure Dashboard

Dashboard about Density vs Pressure of PureCO₂ and Argon.

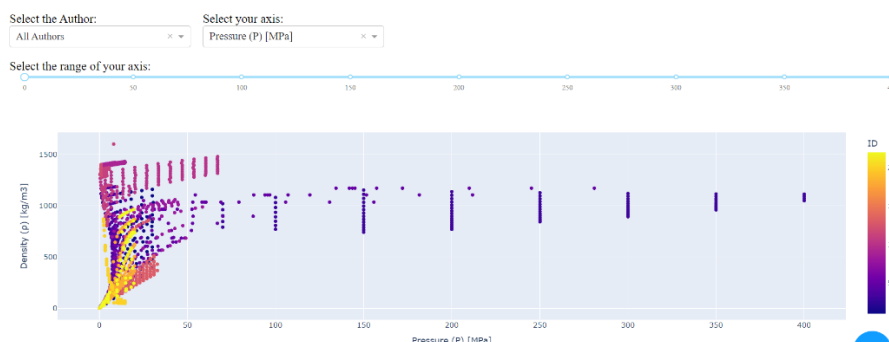


Figura 2 – Interface Inicial do Dashboard

Na Figura 3, temos a demonstração de um gráfico de pressão (MPa) por temperatura (K) mostrando os dados de VLE.

VLE Dashboard

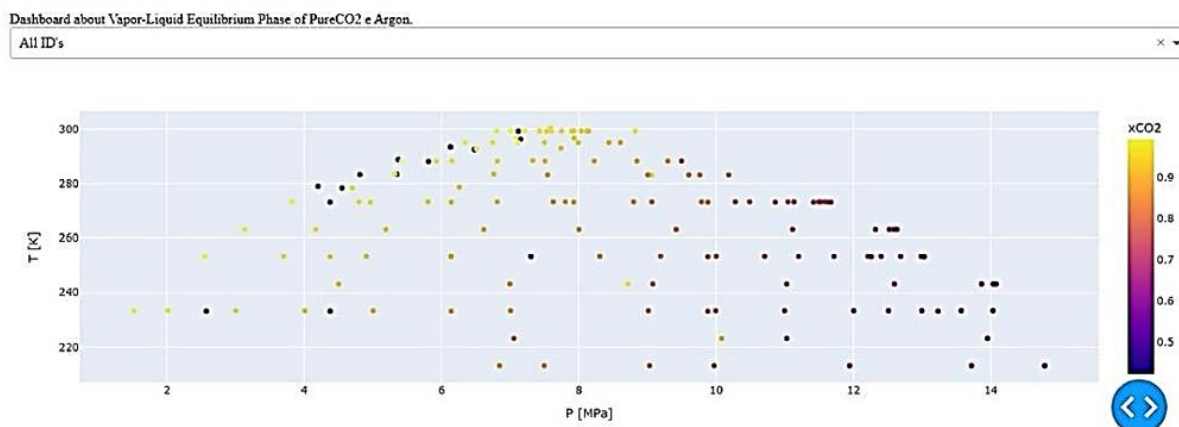


Figura 3 – Dashboard de Equilíbrio Líquido-Vapor

O dashboard possui capacidade interativa para facilitar a consulta aos dados. Ao apontar o cursor sobre um ponto em específico, os dados correspondentes são exibidos (autor, pressão, etc). Essa característica é exemplificada na Figura 4.



Figura 4 – Dashboard de VLE Analisando um Ponto Específico no Gráfico

Conclusões

A análise das propriedades de densidade das misturas de CO₂ e Ar, realizada através do dashboard desenvolvido neste estudo, demonstra como nosso trabalho pode auxiliar na exploração de dados destes tipos de sistema. A ferramenta não apenas consolida dados de diversos artigos para auxiliar a modelagem termofluidodinâmica, mas também oferece funcionalidades interativas que permitem aos pesquisadores explorarem o comportamento dessas misturas sob diferentes condições de pressão e temperatura.

Agradecimentos

Agradecimento a empresa ESS, Universidade do Estado de Santa Catarina, e ao grupo de pesquisa Thermophase.

Referências Bibliográficas

- 1) Allan RP, Hawkins E, Bellouin N, Collins B. (2021). IPCC, 2021: Summary for Policymakers. doi:10.1017/9781009157896.001.
- 2) IEA. Global Energy Review: CO2 Emissions in 2021. Paris: IEA; 2022.
- 3) Araújo, K.K.S., Barroso, C.M.R., Souza, E.J.C. (2017). “The Paradigms of Sustainability: Between Ecodevelopment and Sustainable Development”. Contexto Geográfico. Vol. 2, pp 75 – 85.
- 4) Klimeck, J., Kleinrahm, R., & Wagner, W. (2001). Measurements of the (p, ρ , T) relation of methane and carbon dioxide in the temperature range 240 K to 520 K at pressures up to 30 MPa using a new accurate single-sinker densimeter. The Journal of Chemical Thermodynamics, 33, 251–267.
- 5) Saleh, B., & Wendland, M. (2005). Measurement of Vapor Pressures and Saturated Liquid Densities of Pure Fluids with a New Apparatus. Journal of Chemical & Engineering Data.
- 6) J. Jůza, V. Kmoníček, O. Šifner. (1965). Measurements of the specific volume of carbon dioxide in the range of 700 to 4000b and 50 to 475°C. Physica, 31, 1735-1744.
- 7) Duschek, W., Kleinrahm, R., & Wagner, W. (1990). Measurement and correlation of the (pressure, density, temperature) relation of carbon dioxide I. The homogeneous gas and liquid regions in the temperature range from 217 K to 340 K at pressures up to 9 Mpa. The Journal of Chemical Thermodynamics, 22, 827–840.
- 8) Michels, A., Michels, C., & Wouters, H. (1935). Isotherms of CO₂ between 70 and 3000 atmospheres (Amagat densities between 200 and 600). Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, 152(876), 625–649.
- 9) ELY, J. F.; HAYNES, W. M.; BAIN, B. C. Isochoric (p, V, T) measurements on CO₂ and on (0.982CO₂+0.018N₂) from 250 to 330K at pressures to 35MPa. J. Chem. Thermodynamics, v. 21, p. 879-894, 1988.
- 10) Yang, X., Richter, M., Wang, Z., & Li, Z. (2015). Density measurements on binary mixtures (nitrogen + carbon dioxide and argon + carbon dioxide) at temperatures from (298.15 to 423.15) K with pressures from (11 to 31) MPa using a single-sinker densimeter. The Journal of Chemical Thermodynamics, 91, 17-29.
- 11) AL-SIYABI, I. Effect of impurities on CO₂ stream properties. 2013. Tese (Doutorado) - Heriot-Watt University.
- 12) VAN ITTERBEEK; VERBEKE. Density of liquid nitrogen and argon as a function of pressure and temperature. Physica, v. 26, n. 2, 1960.

- 13) STREET; STAVELEY. Experimental Study of the equation of state of liquid argon. The Journal of chemical physics, v. 50, n. 3, 1969.
- 14) ALBUQUERQUE. Molar volumes of orthobaric liquid argon. CRYOGENICS, p. 4, 1980.
- 15) TERRY. The densities of liquid argon, krypton xenon, oxygen, nitrogen, carbon monoxide methane, and carbon tetrafluoride along the orthobaric liquid curve. The Inorganic Chemistry Laboratory, South Parks Road, p. 12, 1969.
- 16) AHMAD, M.; GERNET, J.; WILBERS, E. Effect of impurities in captured CO₂ on liquid–vapor equilibrium. Fluid Phase Equilibria, v. 363, p. 149-155, 2014.
- 17) COQUELET, C. et al. Isothermal P, x, y data for the argon + carbon dioxide system at six temperatures from 233.32 to 299.21 K and pressures up to 14 MPa. Fluid Phase Equilibria, v. 273, p. 38-43, 2008.
- 18) MOHAMED, A. et al. Vapor-Phase (p, ρ, T, x) Behavior and Virial Coefficients for the (Argon + Carbon Dioxide) System. J. Chem. Eng. Data, v. 62, p. 326-369, 2017.
- 19) MANTOVANI, M. et al. Supercritical pressure-density-temperature measurements on CO₂-N₂, CO₂-O₂ and CO₂-Ar binary mixtures. The Journal of Supercritical Fluids, v. 61, p. 34-43, 2011.
- 20) WEDEMANN, S. et al. Thermodynamics of the carbon dioxide plus argon (CO₂ þ Ar) system: An improved reference mixture model and measurements of vaporliquid, vapor-solid, liquid-solid and vapor-liquid-solid phase equilibrium data at the temperatures 213e299 K and pressures up to 16 MPa. Fluid Phase Equilibria, v. 466, p. 47-78, 2018.
- 21) SARASHINA, E.; ARAI, Y.; SAITO, S. The PVTX relation for the Carbon Dioxide - Argon System. Journal of Chemical Engineering of Japan, v. 4, p. 479-381, 1971.
- 22) KESTIN, J.; KOBAYASHI, Y.; WOOD, R.T. The viscosity of four binary, gaseous mixtures at 20° and 30°C. Physica, v. 32, p. 1065-8914, 1966.
- 23) WEGGE, R. Thermodynamic Properties of the (Argon + Carbon Dioxide) System: Instrument Development and Measurements of Density and Speed of Sound. 2016. Tese (Doutorado) - Ruhr-Universität Bochum, p. 114-122.
- 24) KAMINISHI, G.; ARAI, Y.; SAITO, S.; MAEDA, S. VAPOR-LIQUID EQUILIBRIA FOR BINARY AND TERNARY SYSTEMS CONTAINING CARBON DIOXIDE' GEN-ICHI KAM. Journal of Chemical Engineering of Japan, v. 2, p. 109-116, 1968.
- 25) GILGEN, R.; KLEINRAHM, R.; WAGNER, W. Measurement and correlation of the (pressure, density, temperature) relation of argon I. The homogeneous gas and liquid regions in the temperature range from 90 K to 340 K at pressures up to 12MPa. J.Chem.Thermodynamics, v. 26, p. 383-398, 1994.