Gestão:

Reunião de Acompanhamento e Avaliação - RAA 2026

Análise Numérica dos Efeitos Macroscópicos do Escoamento no Transporte de CO2 em Membranas Perovskita

Ceylão de Meneses, M. A. S. [1]; Oliveira, T. F. [2]
[1]Bolsista do PRH 57/UnB, curso de Ciências Mecânicas, Brasília – DF. E-mail: marcoceylao@gmail.com
[2]Docente do curso de Ciências Mecânicas da Universidade de Brasília, Brasília – DF. E-mail: taygoara@unb.br

INTRODUÇÃO

A captura de carbono é central para as metas de redução de emissões do Acordo de Paris. Na oxicombustão, o combustível é queimado em atmosfera rica em O_2 e o gás de exaustão é basicamente CO_2 e H_2O: basta condensar a água para obter CO_2 quase puro, pronto para captura e armazenamento.

Membranas perovskitas permitem apenas a passagem de oxigênio e operam em altas temperaturas, o que as torna ideais para a oxicombustão. Este trabalho valida, por CFD, o transporte de O_2 em um dispositivo tipo botão, com hélio como gás de lavagem e sem combustão.

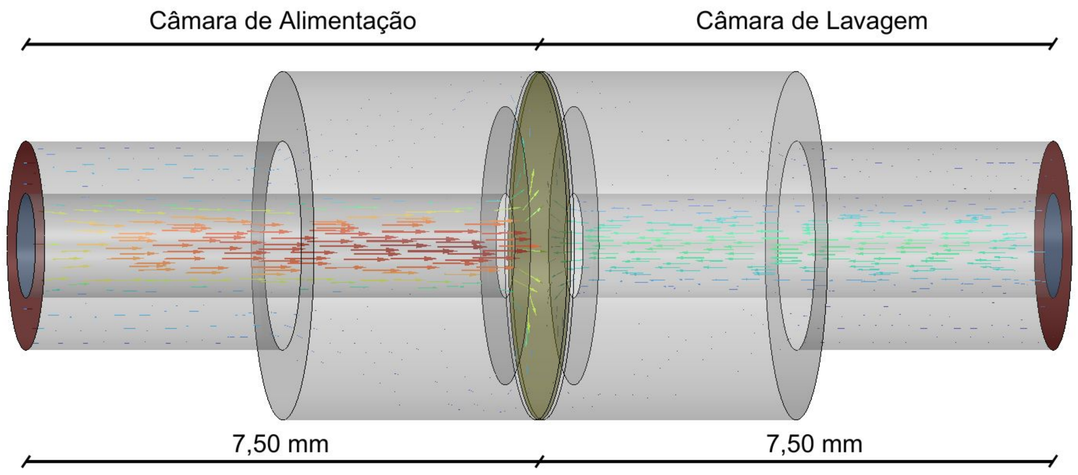


Figura 1 – Geometria do dispositivo botão.

OBJETIVOS

Geral: desenvolver e validar um modelo CFD do transporte de O_2 em membrana perovskita.

Específicos:

- Implementar a equação de fluxo da membrana via UDF no Ansys Fluent;
- Calibrar os parâmetros cinéticos através de pontos experimentais;
- Avaliar os efeitos de temperatura, pressão parcial de O_2, espessura e vazão;
- Identificar as limitações do modelo antes da otimização com CH_4.

Inovação: calibrar o fluxo com as condições locais junto à membrana, inacessíveis experimentalmente, em vez das medições de entrada e saída.

METODOLOGIA

Modelo 2D axissimétrico, em regime permanente e com escoamento laminar nas duas câmaras (Ansys Fluent), com condições de contorno de Behrouzifar et al. (2012). Resolvem-se as equações de massa, quantidade de movimento, energia e espécies; o fluxo de O_2 na membrana, Eq. (1), entra como termo fonte por meio de uma User Defined Function (UDF).

$$J_{O_2} = \frac{(k_r/k_f)\left[\left(1/p^n_{O_2,A}\right) - \left(1/p^n_{O_2,L}\right)\right]}{\left[1/(k_f p^n_{O_2,A})\right] + \left[2L/D_V\right] + \left[1/(k_f p^n_{O_2,L})\right]} \qquad (1)$$

Os quatro parâmetros cinéticos (k_r^0, k_f^0, D_V^0, n) foram ajustados por Gauss-Newton com Jacobiana analítica e amortecimento de Levenberg-Marquardt, usando 33 pontos experimentais de Behrouzifar et al. (2012): 650–950 °C, pO_2 de 0,1–0,9 atm na alimentação, espessura de 0,25–1,50 mm e vazão de 25–200 cm³/min. Cada ponto exigiu uma simulação CFD completa.

RESULTADOS

O ajuste atingiu RMSE relativo de 13,7% e R^2 = 0,914, entre o modelo base de Behrouzifar (17,5%) e o modelo com correções de Reynolds (6,2%). O viés entre temperaturas ficou em 8 pp (650 °C: −4,5%; 800 °C: −0,9%; 950 °C: +3,6%).

Tabela 1 – Comparação entre Parâmetros Cinéticos

Parâmetro	Este trabalho	Behrouzifar (2012)	Diferença Percentual
D_V^0 [m²/s]	$3{,}70 \times 10^{-5}$	$5{,}98 \times 10^{-5}$	−38%
k_f^0 [m/(atm^n · s)]	67,38	41,69	+62%
k_r^0 [mol/(m² · s)]	10591	11660	−9%
n	0,250	0,250	=

O parâmetro n convergiu para o valor reportado; D_V^0, k_f^0 e k_r^0 diferem da literatura por serem calibrados com as condições locais na membrana.

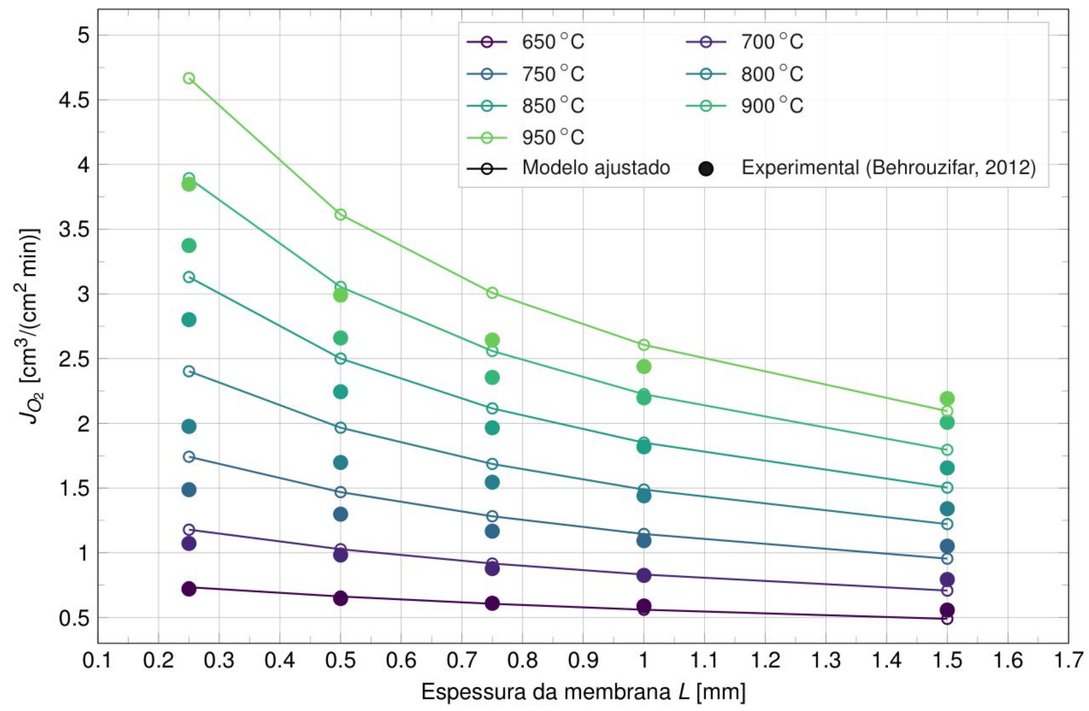


Figura 2 – Fluxo de O_2 x Espessura da membrana

O modelo reproduz a tendência $J_{O2} \propto 1/L$ do regime difusivo, com erro médio < 8% para L = 0,75–1,0 mm. Persistem vieses sistemáticos: −16,7% em pO_2 = 0,9 atm, +21% em L = 0,25 mm, −12% em L = 1,5 mm e +38% em q = 25 cm³/min (950 °C). Esses desvios são estruturais da equação de fluxo sem as correções de Reynolds propostas experimentalmente, e não numéricos.

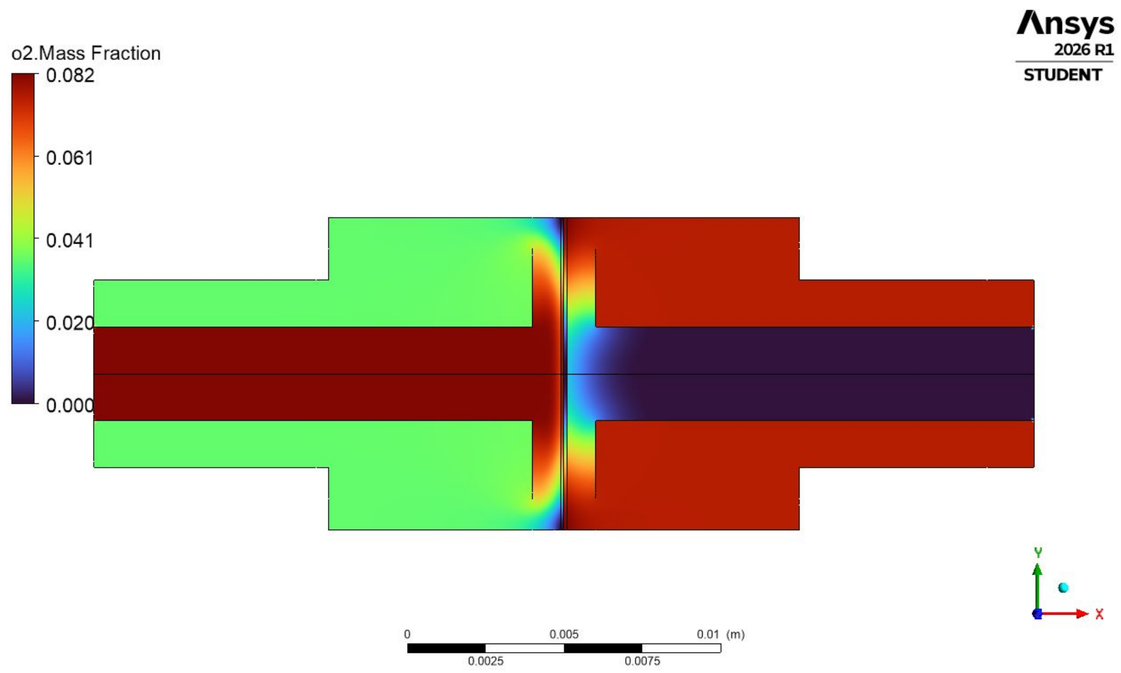


Figura 3 – Fração mássica de O_2 nas câmaras.

O campo de O_2 confirma o funcionamento da UDF: o O_2 passa da câmara de alimentação para a de lavagem, com transporte mais intenso no centro, onde a diferença de pressão parcial é maior, e decai radialmente com o acúmulo de O_2.

APLICAÇÃO NO SETOR DE ENERGIA

- Tecnológica: base para projetar reatores de membrana para oxicombustão com captura de CO_2, apoiando a transição energética;
- Operacional: O_2 produzido no próprio processo, em alta temperatura, como alternativa à separação criogênica de ar;
- Financeira: um modelo calibrado reduz ensaios experimentais na otimização de geometria e escoamento.

CONCLUSÃO

O modelo reproduz o comportamento físico esperado e, com o ajuste dos parâmetros cinéticos, atingiu RMSE de 13,7% e R^2 = 0,914 em 33 pontos experimentais, validando a abordagem.

Próximos passos: (1) usar CH_4 como gás de lavagem no dispositivo botão, otimizando escoamento e geometria; (2) aplicar a metodologia a um dispositivo *hollow-fiber*; (3) comparar as geometrias ótimas no OpenFOAM.

Mais imagens dos resultados da simulação no QR Code ao lado.