



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA QUÍMICA



KAOANDER ANTONIO

Simulação de um processo de separação de dióxido de carbono por
membranas utilizando o software COCO integrado ao Scilab

Uberlândia

2025

KAOANDER ANTONIO

Simulação de um processo de separação de dióxido de carbono por
membranas utilizando o software COCO integrado ao Scilab

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Faculdade da Universidade Federal de
Uberlândia como requisito parcial para
obtenção do título de bacharel em Engenharia
Química.

Orientador: Prof. Dr. Sergio Mauro da Silva Neiro

Uberlândia
2025

KAOANDER ANTONIO

Simulação de um processo de separação de dióxido de carbono por
membranas utilizando o software COCO integrado ao Scilab

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Faculdade da Universidade Federal de
Uberlândia como requisito parcial para
obtenção do título de bacharel em Engenharia
Química.

Minas Gerais, Uberlândia, 07/04/2025

Banca Examinadora:

Nome – Titulação (sigla da instituição)

Nome – Titulação (sigla da instituição)

Nome – Titulação (sigla da instituição)

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho à minha família — minha
mãe, meu irmão e meus tios — pelo constante
incentivo, carinho, compreensão e apoio ao
longo de toda esta jornada.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, agradeço a Deus, por me conceder força, saúde, sabedoria e discernimento ao longo de toda essa caminhada.

Agradeço profundamente à minha mãe, pelo esforço incansável, pelo amor incondicional e por sempre acreditar no meu potencial, mesmo nos momentos mais difíceis. Estendo minha gratidão a toda a minha família, que sempre esteve ao meu lado com apoio, carinho e compreensão.

Aos meus grandes amigos Layton Carlos e Luís Gabriel, meu sincero agradecimento por compartilharem comigo não apenas os estudos e os desafios acadêmicos, mas também os momentos de descontração, risadas e festas que tornaram essa trajetória mais leve e inesquecível. A parceria de vocês foi essencial em todos os sentidos.

À minha namorada, sou grato por todo o amor, paciência e apoio constante. Sua presença foi meu porto seguro em meio às turbulências dessa jornada.

Agradeço ao professor, orientador e amigo Sérgio Neiro, pela paciência, dedicação e excelência no ensino. Seus ensinamentos foram fundamentais para minha formação e crescimento acadêmico.

Ao Rubens Gedraite, deixo meu agradecimento pelas oportunidades e pela confiança, que abriram portas importantes na minha carreira profissional.

E, por fim, ao Stéfano Paschoal, por todo o aprendizado, apoio e inspiração durante o tempo em que estive em Uberlândia. Seus conselhos e ensinamentos contribuíram imensamente para minha evolução pessoal e profissional.

A todos vocês, o meu mais sincero e emocionado obrigado.

“Se te ocorrer, de manhã, de acordares com
preguiça e indolência, lembra-te deste
pensamento: "Levanto-me para retomar a
minha obra de homem."

Marco Aurélio – Meditações

RESUMO

Este trabalho tem como objetivo simular o processo de separação de dióxido de carbono (CO₂) utilizando membranas, por meio do simulador COCO integrado ao software Scilab. A separação de CO₂ é uma técnica relevante para reduzir os impactos ambientais causados pela emissão desse gás em processos industriais. A metodologia adotada baseia-se na modelagem do processo de separação de CO₂ a partir de um estudo pré-existente, com foco na eficiência do processo em condições operacionais específicas. A simulação foi realizada através de balanços de massa e energia, e os resultados obtidos foram comparados com a literatura, mostrando que a separação do CO₂ apresentou bons resultados, com uma significativa concentração de CO₂ no permeado e uma redução substancial na corrente de retento. No entanto, a utilização do COCO e Scilab revelou-se desafiadora, devido à falta de documentação técnica e suporte limitado, o que torna essa alternativa menos atrativa em comparação com softwares comerciais como HYSYS e Aspen Plus. O estudo conclui que o uso do COCO pode ser válido em situações em que os custos de licenciamento de softwares comerciais são inviáveis, especialmente em pequenas empresas ou contextos acadêmicos, mas que, em ambientes industriais mais exigentes, soluções comerciais oferecem maior precisão e suporte.

Palavras-chave: Separação de dióxido de carbono, membranas, simulação de processos, COCO Simulator, Scilab e engenharia química

ABSTRACT

This work aims to simulate the carbon dioxide (CO₂) separation process using membranes, through the COCO simulator integrated with the Scilab software. CO₂ separation is a relevant technique to reduce the environmental impacts caused by the emission of this gas in industrial processes. The adopted methodology is based on modeling the CO₂ separation process from a pre-existing study, focusing on the efficiency of the process under specific operational conditions. The simulation was performed through mass and energy balances, and the results obtained were compared with the literature, showing that CO₂ separation presented good results, with a significant concentration of CO₂ in the permeate and a substantial reduction in the retentate stream. However, the use of COCO and Scilab proved to be challenging due to the lack of technical documentation and limited support, making this alternative less attractive compared to commercial software like HYSYS and Aspen Plus. The study concludes that the use of COCO may be valid in situations where the licensing costs of commercial software are unfeasible, especially in small companies or academic contexts, but in more demanding industrial environments, commercial solutions offer greater precision and support.

Keywords: Carbon dioxide separation, membranes, process simulation, COCO Simulator, Scilab, chemical engineering.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

| | |
|--|----|
| Figura 1: As quatro revoluções industriais | 7 |
| Figura 2: Fluxograma do processo de modelagem da simulação. | 16 |
| Figura 3: Simulação no COCO..... | 19 |
| Figura 4: Variação de fração molar versus Pressão..... | 21 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|--|----|
| Tabela 1: Comparativo entre as Tecnologias de Separação de CO ₂ | 10 |
| Tabela 2: Apresentação de resultados da simulação | 20 |
| Tabela 3: Resultado da variação da pressão do compressor na simulação..... | 22 |

SUMÁRIO

| | | |
|-------|---|----------|
| 1 | INTRODUÇÃO..... | 3 |
| 2 | OBJETIVO..... | 5 |
| 2.1 | OBJETIVOS ESPECIFICOS..... | 5 |
| 3 | FUNDAMENTAÇÃO TEORICA..... | 6 |
| 3.1 | Simulação de Processos Químicos..... | 6 |
| 3.2 | Simulação de processos químicos..... | 7 |
| 3.3 | Tecnologias de Separação de CO ₂ | 8 |
| 3.3.1 | <i>Separação de CO₂ por membranas.....</i> | <i>9</i> |
| 3.4 | Simuladores de processos..... | 10 |
| 4 | METODOLOGIA..... | 13 |
| 4.1 | Validação do modelo..... | 16 |
| 5 | RESULTADOS E DISCUSSÕES..... | 19 |
| 5.1 | Efeito da pressão de compressão..... | 21 |
| 5.2 | Efeito da Permeância da Membrana..... | 22 |
| 5.3 | Limitações e Perspectivas..... | 22 |
| 6 | CONCLUSÃO..... | 24 |

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

| | |
|-----------------|--------------------------------------|
| ESG | Environmental, Social and Governance |
| COFE | Cape-Open Flowsheet Environment |
| CORN | CAPE-OPEN Reaction Numerics |
| COUSCOUS | CAPE-OPEN Unit-operations |
| COCO | CAPE-OPEN to CAPE-OPEN |
| PRF | Reatores de fluxo pistão |
| CO ₂ | Dióxido de Carbono |

1 INTRODUÇÃO

Atualmente a civilização demanda diversos bens consumíveis como alimentos, tecnologia, vestuário e produtos químicos. Devido a essa grande e crescente demanda é necessário um aumento produtivo por parte das indústrias no geral.

Contudo, esse aumento na produção muitas vezes resulta na geração de diversos subprodutos e até mesmo resíduos, sendo um deles o dióxido de carbono.

O dióxido de carbono é um gás presente em grande quantidade na atmosfera terrestre. No entanto, diversos estudos indicam que o aumento de sua concentração pode afetar as condições climáticas do planeta, como demonstrado no estudo do Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovações (MCTI, 2025).

Nos últimos anos, políticas ESG (Environmental, Social and Governance), voltadas para a sustentabilidade ambiental, social e de governança, têm sido implantadas nas maiores empresas do Brasil e do Mundo, como por exemplo a meta NetZero do grupo JBS, tendo como objetivo de zerar o balanço de emissões de gases causadores do efeito estufa.(JBS, 2024).

A multinacional BASF também tem demonstrado empenho em atingir metas sustentáveis, como a criação de mais de 1.000 produtos com pegada de carbono neutra, já em circulação em 2024 (BASF, 2024a). Além disso, a empresa revelou seu plano de neutralidade de carbono até 2050, destacando marcos voltados para uma economia circular (BASF, 2024b).

Surge então uma necessidade industrial de melhoria dos processos que envolvem a geração do dióxido de carbono, buscando atingir melhores patamares de aspectos ambientais no tocante a esse material. Contudo, em diversos casos não é possível diminuir ou evitar a geração, sendo necessário então separar este componente para que ele seja utilizado em outros setores pertinentes.

Diversos processos podem ser utilizados para realizar a separação do dióxido de carbono de uma corrente de gás, como por exemplo a separação por membranas, sendo esse um processo mais econômico no quesito de consumo de água e energia.

A realização de um estudo sobre esse processo de separação pode ser feita por softwares de simulação de processos, como ANSYS, Aspen HYSYS e Honeywell UniSIM por exemplo. Contudo, todos os softwares citados necessitam de licença para seu uso comercial, portanto uma simulação feita em software open source como o CAPE-OPEN to CAPE-OPEN(COCO) pode trazer diversos benefícios no tocante a facilidade de replicação e uso nas indústrias.

Um desafio dessa pesquisa é que o COCO já possui um módulo de separação por membranas implementado. Portanto, será necessário utilizar um modelo do tipo *BlackBox*,

disponibilizado pelo software, para a modelagem específica do sistema (COCO SIMULATOR, 2024).

Por ser um software de comunicação aberta, o COCO possui suporte para integração com o Scilab, uma alternativa gratuita e similar ao Matlab. Essa integração é viável por meio da ferramenta Scilab CAPE-OPEN Unit Operation, que permite a criação de módulos personalizados em ambientes de simulação compatíveis com CAPE-OPEN (AMSTERCHEM, 2024). Estudos demonstram que essa abordagem já foi aplicada na simulação de processos de separação de CO₂ por membranas (Alqaheem e Alobaid, 2024).

O trabalho será estruturado em uma revisão da literatura sobre tópicos pertinentes à simulação de processos químicos, membranas de separação, tecnologias de separação de CO₂ e ferramentas de simulação. Na metodologia, serão descritos o sistema de separação de CO₂, o desenvolvimento do módulo de membrana, sua integração com o COCO e os testes de validação. Por fim, serão apresentados os resultados, a discussão e a conclusão do estudo.

O trabalho será estruturado em uma fundamentação teórica sobre tópicos pertinentes à simulação de processos químicos, membranas de separação, tecnologias de separação de CO₂ e ferramentas de simulação. Na metodologia, serão descritos o sistema de separação de CO₂, o desenvolvimento do módulo de membrana, sua integração com o COCO e os testes de validação. Por fim, serão apresentados os resultados, a discussão e a conclusão do estudo.

2 OBJETIVO

Este trabalho tem como objetivo simular o processo de separação de CO₂ utilizando o simulador COCO de forma integrada ao Scilab e comparar os resultados com a literatura. A justificativa para este estudo está na relevância de ferramentas de simulação acessíveis e de baixo custo como alternativa a softwares comerciais.

2.1 OBJETIVOS ESPECIFICOS

- Reproduzir a modelagem de um processo de separação por membranas com base no estudo base;
- Implementar o modelo matemático no Scilab para simular o comportamento da separação da membrana;
- Integrar o módulo desenvolvido ao ambiente COCO.
- Comparar os resultados obtidos com dados da literatura.
- Identificar limitações e desafios na utilização de softwares open source para simulação de processos químicos.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEORICA

3.1 Simulação de Processos Químicos

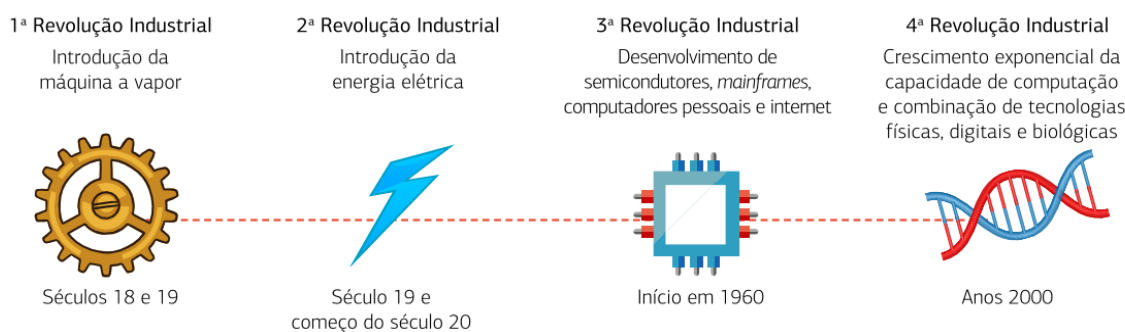
A evolução dos processos químicos está diretamente relacionada às sucessivas revoluções industriais (Silva et al. 2018). A Primeira Revolução Industrial (século XVIII) introduziu a mecanização da produção com o uso de máquinas a vapor, substituindo o trabalho artesanal. A Segunda Revolução Industrial (final do século XIX e início do século XX) foi marcada pela introdução da eletricidade, da produção em massa e do crescimento acelerado da indústria química, com a síntese de novos materiais e produtos como fertilizantes, corantes e explosivos (Magalhães; Vendramini, 2018). Nesse contexto, a engenharia química começou a assumir um papel central no desenvolvimento industrial, atuando na criação e controle de processos químicos em larga escala.

Com a Terceira Revolução Industrial, também conhecida como Revolução Técnico-Científica, houve o surgimento da automação e da informatização dos processos produtivos, impulsionando o uso de sensores, controladores lógicos programáveis (CLPs) e sistemas de controle distribuído (DCS) (Lu; Morris; Frechel, 2017). Essa fase intensificou a presença da engenharia química nos processos industriais por meio de ferramentas de controle mais precisas e sistemas automatizados.

Atualmente, a Quarta Revolução Industrial, ou Indústria 4.0, integra tecnologias físicas e digitais, como a Internet das Coisas (IoT), inteligência artificial (IA), computação em nuvem e análise de dados em tempo real. Esse movimento foca no desenvolvimento de sistemas ciberfísicos (CPS) e sistemas ciberfísicos de produção (CPPS), essenciais para a construção de fábricas inteligentes (Zhou; Liu; Zhou, 2015).

Ainda segundo os autores, esses sistemas possibilitam a integração horizontal, vertical e de ponta a ponta dos processos produtivos, o que resulta em melhorias significativas na eficiência, segurança e sustentabilidade dos processos. Além disso, viabilizam simulações preditivas, otimização em tempo real e a tomada de decisões baseada em dados. No entanto, a implementação desses sistemas envolve desafios, como a padronização e a gestão eficiente dos novos processos. A Figura 1 ilustra as quatro revoluções industriais e sua relação com os avanços tecnológicos.

Figura 1: As quatro revoluções industriais



Fonte: MAGALHÃES; VENDRAMINI (2018, p. 42).

O papel do engenheiro químico na Indústria 4.0 torna-se mais estratégico, pois envolve não apenas o domínio dos processos físicos e químicos, mas também a capacidade de integrar sistemas inteligentes de controle e modelagem digital, contribuindo para processos produtivos mais robustos, adaptáveis e energeticamente eficientes (PORTILLO, 2025).

Diante desse cenário, torna-se essencial compreender como as competências da engenharia química estão sendo redefinidas para atender às exigências da nova era industrial.

3.2 Simulação de processos químicos

A simulação de processos químicos é uma técnica essencial na engenharia química, pois permite a modelagem computacional de sistemas industriais para fins de análise, otimização e controle. Com base em modelos matemáticos, ela representa o comportamento de processos químicos complexos, possibilitando estudos que seriam inviáveis, caros ou perigosos se realizados diretamente em ambiente experimental. No contexto da Indústria 4.0, essa ferramenta torna-se ainda mais relevante ao integrar tecnologias digitais que aprimoram a eficiência, a segurança e a sustentabilidade dos processos industriais.

Segundo Briddell (1974, apud Motard; Shacham; Rosen, 1975), a simulação consiste na representação matemática de um processo químico, utilizada para prever seu desempenho, geralmente por meio de softwares especializados. Essa prática tem se consolidado tanto na academia quanto no setor industrial, especialmente em simulações em estado estacionário.

No Brasil, embora o interesse por essa tecnologia venha crescendo, ainda há uma dependência tecnológica significativa. Conforme destaca Souza (1985), o surgimento dos microcomputadores na década de 1980 foi um marco importante, pois tornou essas ferramentas mais acessíveis a pequenas e médias empresas, devido ao seu menor custo e maior flexibilidade.

Entre suas aplicações mais relevantes está a realização de testes virtuais, que permitem antecipar o comportamento do sistema em diferentes condições operacionais e comparar os resultados com dados reais ou históricos, contribuindo para decisões mais seguras e eficientes (Khalid et al., 2021, p. 34–35).

3.3 Tecnologias de Separação de CO₂

A escolha da tecnologia ideal para separação de CO₂ depende de diversos fatores operacionais e econômicos, como pressão e temperatura do processo, composição da mistura gasosa, pureza desejada e custos envolvidos. As quatro tecnologias principais — absorção química, adsorção física, processos criogênicos e separação por membranas — apresentam diferentes mecanismos, eficiências e aplicações.

A absorção química, amplamente empregada em unidades de tratamento de gás natural e usinas termelétricas, destaca-se pela sua eficácia, embora envolva elevado custo energético devido à regeneração do solvente, além de problemas como a corrosão dos equipamentos (Silva, 2018). A adsorção física surge como uma alternativa promissora, com menor consumo energético e regeneração eficiente dos adsorventes; contudo, sua performance pode ser afetada pela umidade e temperaturas elevadas (Silva, 2014; Silva, 2020).

Os processos criogênicos são recomendados para correntes com alta concentração de CO₂ e quando se requer elevada pureza, mas demandam investimentos significativos em equipamentos e infraestrutura térmica (Arruda, 2018). Já a separação por membranas tem se destacado por sua operação contínua, facilidade de escalonamento e menor consumo energético, embora ainda enfrente desafios relacionados à seletividade e durabilidade dos materiais (Tonon, 2022).

O processo de separação por membranas baseia-se no uso de barreiras artificiais que separam componentes de uma mistura segundo suas propriedades físico-químicas. Esse método pode substituir tecnologias tradicionais como absorção, adsorção e processos criogênicos (Ebner e Ritter, 2009). Nele, a alimentação ocorre de forma tangencial à superfície da membrana, sendo que a baixa pressão do lado permeado favorece a passagem seletiva de determinados componentes.

As principais modalidades incluem microfiltração, pervaporação e separação de gases. As membranas têm ampla aplicação industrial, especialmente nos setores de petróleo e gás, devido ao baixo custo e facilidade de implementação. Embora relativamente recente, sua aplicação comercial intensificou-se a partir da década de 1980, especialmente na remoção de CO₂ (Ferreira et al., 2021).

Entretanto, a modelagem de processos com membranas exige atenção, já que a extrapolação dos dados para outras condições operacionais pode comprometer os resultados. Assim, a modelagem precisa e condizente com a realidade é essencial para o projeto seguro e eficaz de sistemas de separação por membranas.

As equações fundamentais desse processo já foram amplamente descritas na literatura e validadas por diferentes pesquisadores, considerando variáveis como seletividade, geometria do módulo e regime de escoamento.

3.3.1 Separação de CO₂ por membranas

Nos últimos anos, a separação de CO₂ por membranas tem ganhado destaque diante da crescente demanda por tecnologias de captura de carbono mais eficientes. Pesquisas recentes têm se concentrado no desenvolvimento de novos materiais com alta seletividade, estabilidade e permeabilidade.

Liu et al. (2023), por exemplo, desenvolveram membranas compostas ultrafinas utilizando copolímeros anfífilicos em camadas intermediárias, resultando em melhorias significativas na captura seletiva de CO₂. Zhao et al. (2023) investigaram o uso de estruturas metal-orgânicas (MOFs) tanto na adsorção quanto na separação por membranas, ressaltando seu potencial para a captura de CO₂.

Gkotsis et al. (2023) revisaram as principais inovações em membranas híbridas e compostas aplicadas à captura pós-combustão, destacando os avanços em materiais e técnicas de fabricação. Dong et al. (2024) propuseram uma nova membrana composta de MXene/rGO, cuja estrutura apresentou elevada seletividade e permeabilidade para a separação H₂/CO₂. Por fim, Zhao et al. (2025) analisaram métodos de modificação de membranas MXene voltados à otimização da separação de CO₂, reforçando a relevância desses materiais na descarbonização industrial.

Abaixo, a Tabela 1 resume as principais características técnicas das quatro abordagens.

Tabela 1: Comparativo entre as Tecnologias de Separação de CO₂

| Tecnologia | Mecanismo | Vantagens | Desvantagens | Aplicações Típicas |
|----------------------------|------------------------------------|---|--|---|
| Absorção Química | Reação com solventes (ex. MEA) | Alta eficiência: Tecnologia consolidada | Alto consumo de energia; Corrosão | Termelétricas, plantas químicas |
| Adsorção Física | Interações físicas com superfícies | Regeneração fácil; Baixo consumo energético | Menor seletividade; Sensível à umidade | Tratamento de gás natural |
| Criogênico | Condensação por resfriamento | Alta pureza do CO ₂ | Custo elevado; Operação complexa | Indústrias de CO ₂ de grau alimentício |
| Membranas Seletivas | Difusão seletiva em membranas | Modular: Contínua; Menos energia | Seletividade limitada; Sensível a contaminação | Refino, biogás, indústrias emergentes |

fonte: Autoria própria

3.4 Simuladores de processos

Entre os principais softwares de simulação de processos químicos, destacam-se o Aspen Plus e o Aspen HYSYS, ambos desenvolvidos pela AspenTech.

O Aspen Plus é amplamente utilizado para modelar processos químicos em estado estacionário, sendo eficaz na representação de operações complexas, como reações químicas, separações e trocas térmicas, especialmente em setores como o químico e farmacêutico (Yadav et al., 2020).

Já o Aspen HYSYS é voltado principalmente para a indústria de petróleo e gás, oferecendo recursos robustos para simulações em estado estacionário e dinâmico, incluindo o processamento de gás natural e operações de refino (Motard, Shacham & Rosen, 1975).

Embora amplamente utilizados na indústria, seus altos custos de licenciamento dificultam a aquisição por pequenas e médias empresas sem comprometer sua saúde financeira.

Em contrapartida, simuladores de processos de código aberto, como o COCO, surgem como uma alternativa viável, oferecendo recursos robustos para modelagem de processos químicos em estado estacionário. De acordo com a documentação oficial do COCO (CAPE-OPEN to

CAPE-OPEN Simulator, 2025) O COCO é um simulador de estado estacionário de código aberto, composto por diversos módulos, entre eles:

- **COFE** (the Cape-Open Flowsheet Environment) – Ambiente gráfico para modelagem de fluxogramas químicos, utilizando um algoritmo sequencial baseado em fluxos de tear. Permite visualizar as informações de cada fluxo, realizar conversões de unidades e utilizar fluxogramas como operações unitárias.
- **TEA** (Thermodynamics for Engineering Applications) – Módulo baseado na biblioteca de termodinâmica do ChemSep, contendo um banco de dados com 550 compostos químicos. Permite o cálculo de mais de 100 propriedades físicas e termodinâmicas por meio de resolução analítica ou derivada numérica.
- **COUSCOUS** (CAPE-OPEN Unit-operations) – Módulo que disponibiliza operações unitárias básicas, como misturadores, trocadores de calor, compressores e reatores químicos. Inclui também o ChemSep-Lite, uma versão simplificada para cálculo de equilíbrios químicos em processos de destilação.
- **CORN** (CAPE-OPEN Reaction Numerics) – Biblioteca voltada para a especificação da cinética de reações e equilíbrio químico. Pode ser utilizada em reatores simples, como CSTRs e reatores de fluxo pistão (PFR), em conjunto com o COUSCOUS.

Outro simulador de código aberto amplamente utilizado no meio acadêmico é o DWSIM, desenvolvido em .NET e compatível com múltiplas plataformas, como Windows, Linux e Android. O DWSIM possui uma interface gráfica moderna, suporte a diversos modelos termodinâmicos (como Peng-Robinson, NRTL e UNIFAC), além de ferramentas para análise de sensibilidade, simulações dinâmicas e cálculo de propriedades termofísicas com base em bancos de dados confiáveis. Sua estrutura modular e intuitiva tem ampliado sua adoção em universidades e centros de pesquisa para ensino e projetos de pequeno porte (DWSIM, 2025).

No entanto, o COCO foi escolhido para este trabalho devido à sua integração nativa com o padrão CAPE-OPEN, que permite a modelagem de processos unitários e a criação de novos módulos de maneira personalizada. Graças à compatibilidade com o padrão CAPE-OPEN, é possível modelar novos processos unitários e integrá-los ao COCO.

Uma alternativa para essa modelagem é o uso do software Scilab, uma versão gratuita e semelhante ao MATLAB, permitindo a integração da modelagem e resolução numérica do Scilab com as funcionalidades e bibliotecas do COCO.

Um exemplo relevante é o estudo de caso do design de uma planta de produção de ciclohexano, no qual o COCO foi utilizado para otimizar as operações e modelar processos complexos da indústria química (Martínez-Díaz et al., 2022). Em projetos de processos industriais sustentáveis, a combinação do COCO e Scilab tem sido uma ferramenta poderosa, proporcionando simulações que consideram aspectos como eficiência energética e viabilidade econômica (Gonçalves, 2011). Além disso, o uso integrado desses softwares também foi explorado na proposta de uma rota de produção de etileno glicol, onde a comunicação entre o Scilab e o COCO permitiu a modelagem detalhada do processo, evidenciando a relevância desta interação para a otimização e inovação de processos químicos industriais (Menezes; Souza, 2018). Essas aplicações destacam o potencial do COCO e Scilab como ferramentas de simulação em pesquisa e desenvolvimento de processos químicos, oferecendo soluções tanto para a academia quanto para a indústria.

4 METODOLOGIA

Este trabalho tem como objetivo reproduzir um estudo já existente na literatura, intitulado *"Development of a membrane process in CAPE-OPEN to CAPE-OPEN (COCO) simulator for carbon dioxide separation"*, desenvolvido por Alqaheem e Alobaid, (2024).

As condições de operação adotadas neste estudo foram baseadas no trabalho de Merkel et al (2010). Considerou-se uma membrana de material perfluorado com permeância de 1000 GPU, Gas Permeation Unit. Seletividade entre o dióxido de carbono e o nitrogênio será de 50. O gás combustível utilizado no processo é composto por 13% de gás carbônico em base molar e nitrogênio. A vazão da corrente de alimentação foi definida como $500 \text{ m}^3/\text{s}$ em uma temperatura de 50°C , uma pressão elevada de 1 a 5 bar, se utilizando de um compressor, fornecendo força para que o gás seja transportado pela membrana, e um expensor após o processo para reduzir a pressão novamente para 1 bar.

A modelagem do sistema de separação por membrana foi desenvolvida no Scilab, e exige a realização de um balanço de massa para descrever o comportamento dos componentes ao longo da membrana.

$$x_i N_i = y_p N_p + x_r N_r \quad (1)$$

Onde x_i representa a fração molar do componente i , y_p é a fração molar do permeado (neste caso, o dióxido de carbono) e x_r é a fração molar do retento, considerando que não haverá acúmulo de massa no sistema. A equação (1) pode ser reescrita em função da permeância e da área da membrana, permitindo uma descrição mais detalhada do processo de separação.

$$y_p N_p = x_i N_i - x_r N_r = \underline{QA(xP_i - yP_p)} \quad (2)$$

Onde Q é a permeância em $(\text{kmol m}^{-2} \text{h}^{-1} \text{kPa}^{-1})$, A é a área da membrana (m^2), é o último termo sendo a diferença de pressão através da membrana (kPa). Onde P_i é a pressão na corrente de alimentação, e P_p é a pressão na corrente de permeado. No presente estudo, o permeado sai a 1 bar, enquanto o retento se mantém a 5 bar.

A diferença de pressão através da membrana pode ser estimada pela equação (3):

$$\underline{(xP_i - yP_p)} \cong [x_i x_r (\frac{x_i + x_r}{2})]^{1/3} P_i - y_p P_p \quad (3)$$

A soma das frações molares na alimentação, no permeado e no retento deve satisfazer as equações de fechamento de balanço:

$$\sum_{i=1}^n x_i = 1: \sum_{i=1}^n x_r = 1: \sum_{i=1}^n y_p = 1 \quad (4)$$

Devido à natureza não linear da equação (3), será necessário utilizar um método numérico para encontrar a solução. O método de Newton-Raphson é uma abordagem eficiente para resolver esse problema, pois permite encontrar as raízes de funções de forma iterativa. O limite de permeabilidade do dióxido de carbono θ_{g1} e nitrogênio θ_{g2} pode ser obtido pelas equações:

$$\theta_g = \frac{y_p n_p}{x_i n_i} \quad (5)$$

Além disso as vazões de permeado e retento são calculadas por:

$$n_p = x_{i1} \theta_{g1} n_{i1} + x_{i2} \theta_{g2} n_{i2} \quad (6)$$

$$n_r = n_i - n_p \quad (7)$$

Portanto as frações molares do permeado e retento podem ser calculados da seguinte forma:

$$y_p = \frac{\theta_g x_i n_i}{x_p} \quad (8)$$

$$x_r = \frac{x_i n_i - y_p n_p}{n_r} \quad (9)$$

Em seguida o limite de permeabilidade (θ_c) pode ser reescrito em função da equação (2) e (3):

$$\theta_c = \frac{QA}{x_i n_i} \{ [x_i x_r (\frac{x_i + x_r}{2})]^{1/3} P_i - y_p P_p \} \quad (10)$$

Para garantirmos a convergência do sistema o limite de permeabilidade calculado c deve ser igual ao valor inicial g da equação (5), isso significa que ele deve variar até próximo ao limite calculado c , e podemos definir o erro como:

$$\text{Função erro} = (\theta_g - \theta_c)^2 \quad (11)$$

A função erro deve tender a zero para que haja convergência em todo o sistema. Sendo que para verificar a convergência pode-se estabelecer um erro menor que 10^{-7} , isso significa que o erro absoluto $|\theta_g - \theta_c|$ menor que 0,0003. Após a o balanço de massa é necessário estimar a temperatura de saída do permeado, pois devido à queda de pressão teremos uma redução do calor na corrente, portanto temos o balanço de energia determinado por:

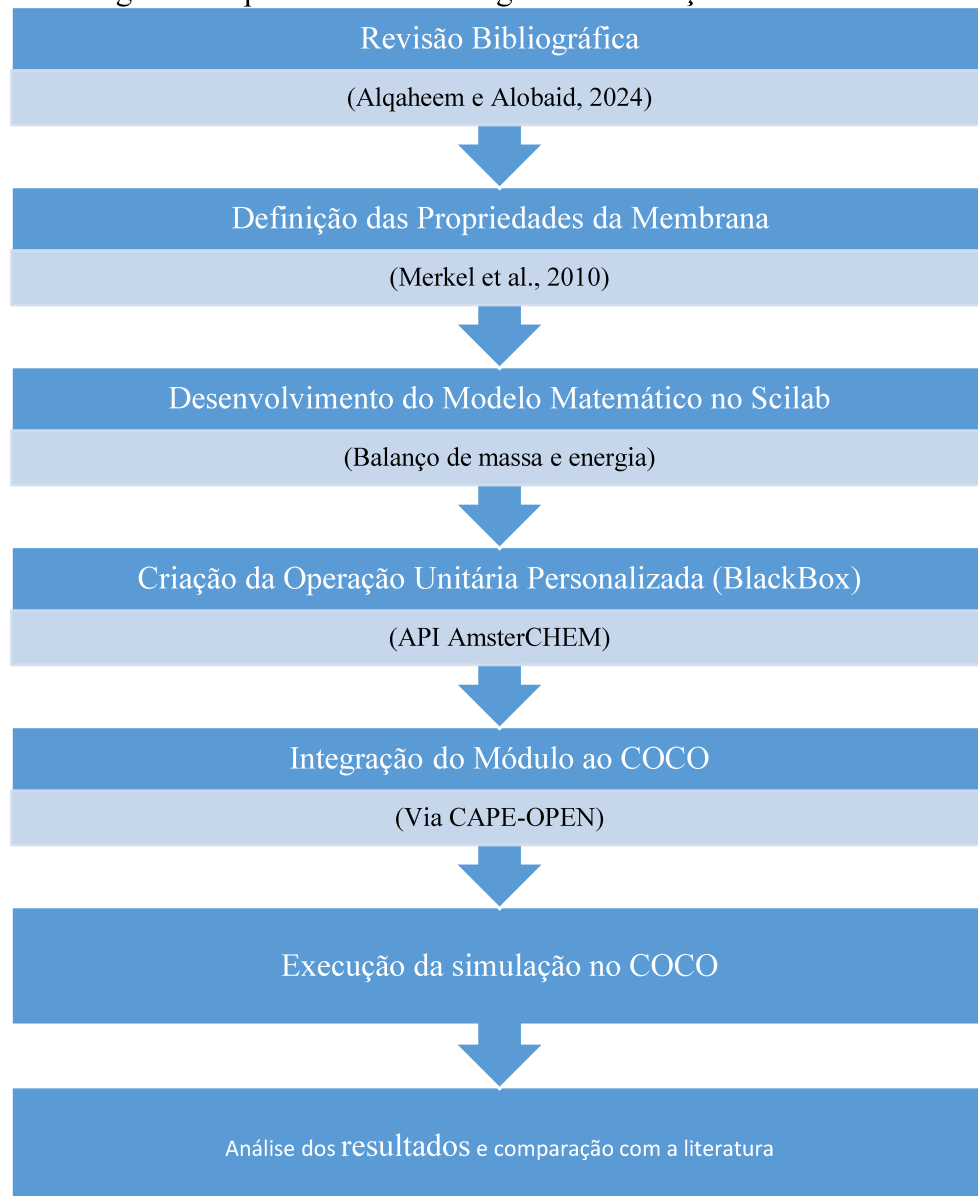
$$n_F H_F = n_P H_P + n_R H_R \quad (12)$$

O código foi escrito utilizando Scilab, e encontra-se no apêndice, através de uma API, Interface de Programação de Aplicações, tornando mais fácil a utilização do mesmo.

A API utilizada pode ser encontrada no site da amsterCHEM, <https://www.amsterchem.com/downloads.html>, a mesma conta com um instalador para sistemas Windows e também pode ser realizado o pedido de uma chave de acesso para estudantes. Após a instalação a operação unitária com integração a Scilab ficará disponível junto das demais do pacote básico do COCO.

O fluxograma a seguir representa como o trabalho foi estruturado e como foi feita a modelagem do sistema:

Figura 2: Fluxograma do processo de modelagem da simulação.



fonte: Autoria própria

4.1 Validação do modelo

Para validar o modelo desenvolvido neste trabalho, foram adotados critérios de comparação quantitativa entre os resultados obtidos na simulação e os dados presentes na literatura. O estudo base utilizado foi o artigo de Alqaheem e Alobaid (2024).

A validação foi conduzida com base nos seguintes critérios técnicos:

- Composição das correntes de permeado e retento: As frações molares de CO₂ e N₂ nas correntes simuladas foram comparadas com os valores reportados por Alqaheem e Alobaid (2024), especialmente nos pontos de operação com pressão de alimentação de 5 bar e pressão de permeado de 1 bar.
- Vazões molares totais: As vazões simuladas foram verificadas quanto à consistência com os dados do estudo original, respeitando o balanço de massa global do sistema.
- Recuperação de CO₂ no permeado: O modelo numérico foi considerado válido quando a recuperação de CO₂ convergiu para valores similares aos reportados na literatura (aproximadamente 28% a 30% de concentração de CO₂ no permeado).
- Temperatura do permeado: O balanço de energia implementado foi comparado com a tendência de queda de temperatura prevista teoricamente em processos com expansão de gases, como descrito em Merkel et al. (2010).

Além dos dados comparativos, a convergência numérica foi considerada um critério interno de validação. Para isso, foi estabelecido que o erro da função objetivo, definido no Scilab como:

```
// Função objetivo
```

```
function erro = objetivo(xy)
```

```
  x = xy(1);
```

```
  y = xy(2);
```

```
  erro = [
```

```
    ((x - ...) ^ 2);
```

```
    ((y - ...) ^ 2)
```

```
  ];
```

```
endfunction
```

```
solucao = fsolve([recuperacao_estimada_CO2; recuperacao_estimada_N2], objetivo);
```

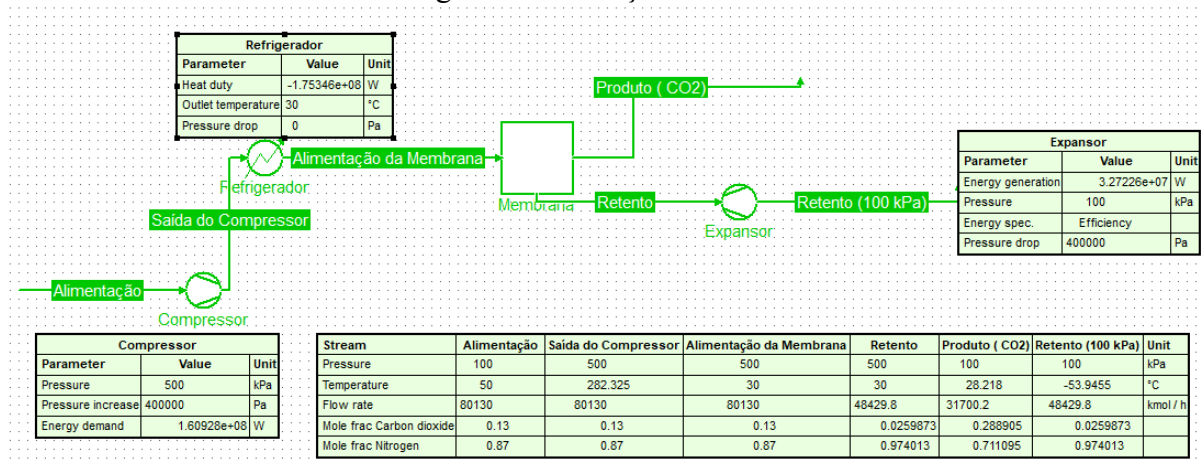
deverá atingir um erro absoluto de 0,0003. Lembrando que o método `fsolve` já é implementado no próprio Scilab, que busca minimizar a função objetivo, no nosso caso a função erro.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os dados obtidos neste estudo fornecem uma análise detalhada do comportamento do sistema ao longo do processo de separação por membranas, evidenciando variações significativas em pressão, temperatura e composição dos fluxos. O principal objetivo foi avaliar a eficiência da separação do CO₂, um aspecto fundamental para processos industriais que visam reduzir impactos ambientais e otimizar o uso de recursos.

A Figura 3 apresenta a representação esquemática do projeto desenvolvido no simulador COCO.

Figura 3: Simulação no COCO



fonte: Autoria própria

Inicialmente, a corrente de alimentação apresenta uma pressão de 100 kPa e temperatura de 50 °C, com uma vazão de 80.130 kmol/h, composta por 13% de CO₂ e 87% de nitrogênio. Após a passagem pelo compressor, a pressão é elevada para 500 kPa, e a temperatura sobe para 282,3 °C, devido à compressão adiabática, um comportamento esperado nesse tipo de processo. Essa elevação de temperatura pode impactar a escolha da membrana, uma vez que diferentes materiais possuem distintas tolerâncias térmicas.

Para a alimentação da membrana, a temperatura é reduzida para 30 °C, enquanto a pressão permanece em 500 kPa. Esse resfriamento é essencial para otimizar a seletividade da membrana e evitar danos estruturais. Observa-se que, no fluxo de retenção, a fração molar de CO₂ reduz-se significativamente para 2,60%, enquanto no fluxo permeado, a concentração de CO₂ aumenta para 28,89%, evidenciando a eficiência do processo de separação por membranas.

Um aspecto relevante é que o fluxo de retenção a 100 kPa e -53,95°C apresenta a mesma fração molar de CO₂ que a retenção a 500 kPa, sugerindo que a redução de pressão não afeta significativamente a composição da corrente residual. Isso pode indicar que a membrana utilizada apresenta boa estabilidade operacional em diferentes condições de pressão.

A eficiência da separação também pode ser analisada pelo balanço de massas. A vazão total de alimentação é de 80.130 *kmol/h*, enquanto o fluxo de retenção é de 48.429,8 *kmol/h* e o fluxo permeado (produto rico em CO₂) é de 31.700,2 *kmol/h*. Esses resultados são coerentes com sistemas de membrana projetados para separação de gases com alta seletividade, reforçando a viabilidade dessa tecnologia em processos industriais.

Os resultados mostraram boa concordância entre os dados simulados e os da literatura, com diferenças menores que 2% nas frações molares, validando a abordagem matemática implementada e a integração com o simulador. A recuperação de CO₂ no permeado permaneceu na faixa de 28% a 30%, valor compatível com os dados experimentais reportados por Merkel et al (2010), confirmando que o modelo numérico reproduz adequadamente o comportamento do sistema de separação por membranas. Os resultados são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2: Apresentação de resultados da simulação

| Propriedade | Valor calculado | Valor reportado por Merkel et al. (2010) |
|-------------------------------------|-----------------|--|
| CO ₂ no permeado (mol %) | 28,9 | 28,9 |
| CO ₂ no retento (mol %) | 87,9 | 90 |
| CO ₂ recuperado (%) | 2,6 | 2,1 |

fonte: Autoria própria

Além disso, o balanço de massa global foi satisfeito em todas as simulações, com erros absolutos inferiores a 0,0003, conforme critério de convergência estabelecido no método numérico implementado no Scilab. Esse resultado reforça a consistência do modelo matemático e a estabilidade da solução numérica no intervalo de operação avaliado.

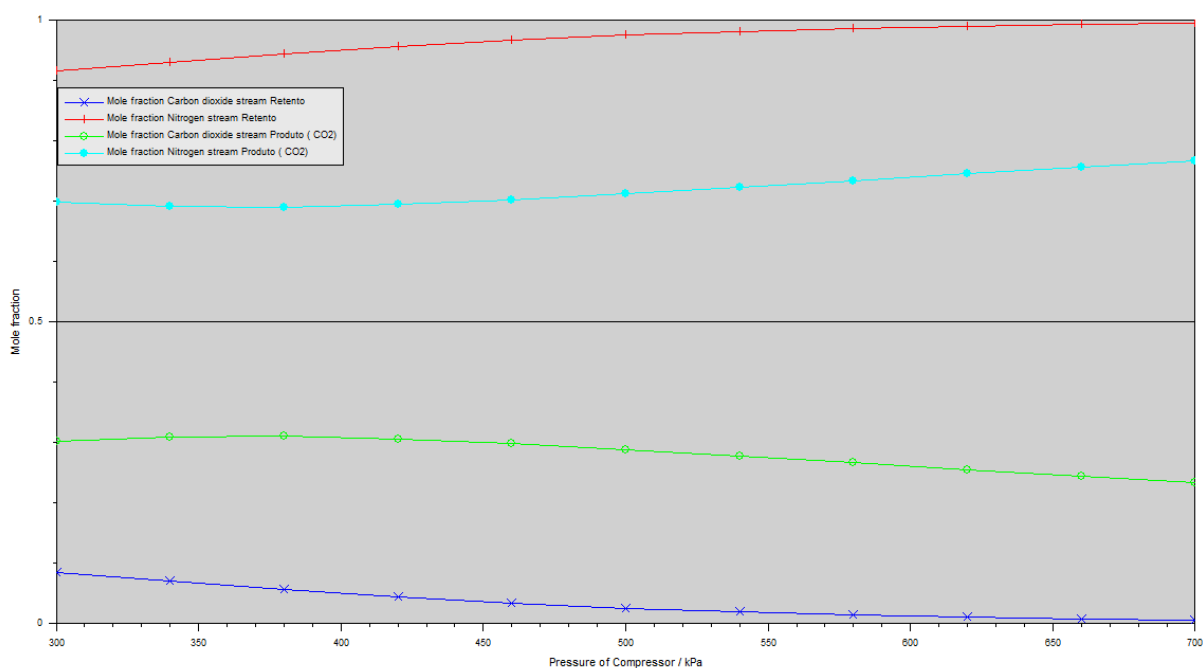
Com a validação confirmada, foi possível ampliar a análise do sistema, investigando o efeito de variáveis operacionais como pressão de compressão e permeância da membrana sobre a separação de CO₂.

5.1 Efeito da pressão de compressão

A Figura 4 apresenta a variação das frações molares de CO_2 e N_2 nas correntes de retento e permeado em função da pressão do compressor (300–700 kPa). Observa-se que o aumento da pressão de alimentação promoveu uma redução da fração molar de CO_2 no retento, de 0,0857 a 0,0064, indicando uma maior transferência de CO_2 para o permeado. No permeado, a fração molar de CO_2 diminuiu levemente de 0,3019 para 0,2343 com o aumento da pressão, o que pode ser atribuído a um efeito de diluição causado pelo aumento da vazão total permeada. Esses resultados também estão apresentados na Tabela 3.

Esse comportamento está em acordo com a literatura, uma vez que o aumento do gradiente de pressão tende a favorecer a permeação de gases mais permeáveis, como o CO_2 , porém também aumenta a permeação de gases menos seletivos, como o N_2 , reduzindo a pureza do permeado.

Figura 4: Variação de fração molar versus Pressão



fonte: Autoria própria

Tabela 3: Resultado da variação da pressão do compressor na simulação

| Pressão do compressor | Fração molar do dióxido de carbono na corrente de retento | Fração molar de nitrogênio na corrente de retento | Fração molar do dióxido de carbono na corrente de produto | Fração molar de nitrogênio na corrente de retento |
|-----------------------|---|---|---|---|
| 300 | 0,086 | 0,914 | 0,302 | 0,698 |
| 340 | 0,071 | 0,929 | 0,310 | 0,690 |
| 380 | 0,057 | 0,943 | 0,311 | 0,689 |
| 420 | 0,044 | 0,956 | 0,306 | 0,694 |
| 460 | 0,034 | 0,966 | 0,299 | 0,701 |
| 500 | 0,026 | 0,974 | 0,289 | 0,711 |
| 540 | 0,020 | 0,980 | 0,278 | 0,722 |
| 580 | 0,015 | 0,985 | 0,267 | 0,733 |
| 620 | 0,011 | 0,989 | 0,256 | 0,744 |
| 660 | 0,008 | 0,992 | 0,245 | 0,755 |
| 700 | 0,006 | 0,994 | 0,234 | 0,766 |

fonte: Autoria própria

5.2 Efeito da Permeância da Membrana

Foi realizado a simulação de diferentes valores de permeância da membrana de CO₂ (500–1500 GPU) e permeância de N₂ (10–30 GPU). Verificou-se que o aumento da permeância do CO₂ promoveu uma redução da fração molar de CO₂ no retento e um aumento correspondente no permeado. Por exemplo, com permeância de 500 GPU (N₂ = 10 GPU), a fração molar de CO₂ no retento foi de 0,0543 e no permeado de 0,3842; com permeância de 1500 GPU, os valores foram 0,0499 (retento) e 0,3924 (permeado).

Contudo, o aumento da permeância do N₂ exerceu um efeito contrário, reduzindo a pureza do CO₂ no permeado. Na condição de permeância de CO₂ = 500 GPU, a fração molar de CO₂ no permeado caiu de 0,3842 (N₂ = 10 GPU) para 0,2248 (N₂ = 30 GPU), evidenciando o impacto da seletividade da membrana no desempenho do processo.

Esses resultados reforçam a necessidade de membranas com alta seletividade CO₂/N₂ para maximizar a eficiência da separação, alinhando-se com os estudos de Ebner e Ritter (2009) e Gkotsis et al. (2023), que destacam os desafios técnicos relacionados à seletividade e estabilidade das membranas para captura de CO₂.

5.3 Limitações e Perspectivas

Apesar do bom desempenho do modelo, a integração entre Scilab e COCO apresentou dificuldades operacionais, principalmente pela escassez de documentação técnica e suporte limitado para módulos personalizados, o que pode limitar sua aplicação em ambientes industriais que demandam maior robustez e agilidade. Essa limitação já havia sido mencionada por Gonçalves (2011) em estudos anteriores com a ferramenta.

Portanto, os resultados indicam que, embora viável para fins acadêmicos e de pesquisa, o uso combinado de COCO e Scilab ainda não representa uma solução substituta ideal para softwares comerciais em ambientes industriais críticos, onde o suporte técnico e a confiabilidade operacional são fatores essenciais.

6 CONCLUSÃO

Os resultados obtidos neste estudo demonstram que o processo de separação de dióxido de carbono por membranas, modelado no simulador COCO integrado ao Scilab, apresentou um bom desempenho, corroborando as referências bibliográficas e o artigo utilizado como base para este trabalho. A eficiência da separação de CO₂ foi claramente observada, com uma alteração significativa nas frações molares entre a corrente de alimentação, do permeado e o retento, atestando a viabilidade da técnica de separação por membranas em condições operacionais específicas.

No entanto, apesar dos bons resultados, a utilização do COCO e do Scilab para simulação de processos químicos revelou-se desafiadora devido à escassez de documentação técnica e ao suporte limitado para integrações avançadas. A complexidade associada à configuração e validação do modelo torna essa alternativa menos atrativa, especialmente para indústrias ou pesquisas que buscam soluções rápidas e com menor margem de erro. Embora o COCO seja uma ferramenta útil quando o acesso a softwares comerciais como HYSYS ou Aspen Plus é inviável, sua implementação em ambientes industriais exige um esforço adicional considerável.

Portanto, recomenda-se que o uso do COCO e do Scilab seja restrito a situações em que o custo de licenciamento de softwares comerciais representa uma barreira real, como em pequenas e médias empresas ou em contextos acadêmicos, onde parcerias com universidades podem facilitar o acesso a soluções como o Aspen Plus e o HYSYS. Para ambientes industriais mais complexos, que exigem maior precisão e integração robusta, os softwares comerciais oferecem vantagens significativas, incluindo suporte técnico especializado, base de usuários ampla e maior confiabilidade operacional, tornando-os a escolha preferencial para aplicações industriais críticas.

Embora o COCO e o Scilab tenham demonstrado um bom desempenho, a limitada documentação e o suporte restrito representam desafios significativos para sua adoção ampla. Assim, recomenda-se que trabalhos futuros explorem novas ferramentas de simulação que ofereçam melhor documentação e suporte técnico, visando superar essas limitações.

REFERÊNCIAS

- AMSTERCHEM. *Scilab CAPE-OPEN Unit Operation*. Disponível em: <https://www.amsterchem.com/scilabunitop.html>. Acesso em: 07 abr. 2025.
- ARRUDA, Y. A. M. *Membranas na captura e separação de dióxido de carbono*. 2018. 126 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2018. Disponível em: <https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/23981>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- BASF. *BASF aims to achieve net zero CO₂ emissions by 2050*. 2024b. Disponível em: <https://www.basf.com/global/en/media/news-releases/2024/08/p-24-266.html>. Acesso em: 07 abr. 2025.
- BASF. *ESG Investment Story – October 2024*. 2024a. Disponível em: https://www.basf.com/dam/jcr:8bd285e3-b547-478f-beab-7e5968d67dc8/basf/www/global/documents/en/investor-relations/sustainable-investments/BASF_ESG-Investment-Story_October-2024.pdf. Acesso em: 07 abr. 2025.
- BRASIL. Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovações. *Concentração de dióxido de carbono na atmosfera é o mais alto dos últimos 800 mil anos*. 2025. Disponível em: <https://www.gov.br/mcti/pt-br/acompanhe-o-mcti/noticias/2025/03/concentracao-de-dioxido-de-carbono-na-atmosfera-e-o-mais-alto-dos-ultimos-800-mil-anos>. Acesso em: 07 abr. 2025.
- CAPE-OPEN TO CAPE-OPEN SIMULATOR. *COCO Simulator*. Disponível em: <https://www.cocosimulator.org/>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- COCO SIMULATOR. *Sample models and cases – Membrane separation with COCO*. 2024. Disponível em: https://www.cocosimulator.org/index_sample.html. Acesso em: 07 abr. 2025.
- DASGUPTA, S. et al. *Trajectory Extending Kinetic Monte Carlo Simulations to Evaluate Pure and Gas Mixture Diffusivities through a Dense Polymeric Membrane*. arXiv preprint, arXiv:2311.02878, 2023. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/2311.02878>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- DWSIM. *DWSIM: Free Process Simulation Software*. Disponível em: <http://www.dwsim.org/>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- EBNER, A. D.; RITTER, J. A. State-of-the-art adsorption and membrane separation processes for carbon dioxide production from carbon dioxide emitting industries. *Separation Science and Technology*, v. 44, n. 6, p. 1273–1421, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/01496390902733314>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- FERREIRA, E. S. B. et al. Membranas de fibra oca de diversos materiais e suas aplicações. *Research, Society and Development*, v. 10, n. 1, p. 1–16, 2021. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.33448/rsd-v10i1.11206>. Acesso em: 13 abr. 2025.
- GKOTSIS, P.; PELEKA, E.; ZOUBOULIS, A. Membrane-Based Technologies for Post-Combustion CO₂ Capture from Flue Gases: Recent Progress on Commonly Employed Membrane Materials. *Membranes*, v. 13, n. 12, p. 898, 2023. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2077-0375/13/12/898>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- GONÇALVES, R. V. Projeto auxiliado por computador de processos industriais sustentáveis usando os softwares COCO e Scilab. *Revista Brasileira de Ciência, Tecnologia e Inovação*, Uberaba - MG, v. 6,

- n. 1, p. 1–12, 2011. DOI: 10.14393/ufu.di.2011.53. Disponível em: <https://doi.org/10.14393/ufu.di.2011.53>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- JBS. *Climate: Net Zero 2040*. 2024. Disponível em: <https://jbsesg.com/our-environment/climate>. Acesso em: 07 abr. 2025.
- KHALID, K. et al. Industry 4.0. In: SHOW, P. L.; CHEW, K. W.; LING, T. C. (Ed.). *The prospect of industry 5.0 in biomanufacturing*. 1. ed. Boca Raton, FL: CRC Press, [2021]. p. 33–37.
- KIM, J. et al. Simulation of the Membrane Process of CO₂ Capture from Flue Gas Using Commercial Gas Separation Membranes. *Membranes*, v. 13, n. 8, p. 692, 2023. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2077-0375/13/8/692>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- LIU, X. et al. Introduction of an Amphiphilic Copolymer Intermediate Layer for the Fabrication of Ultrathin Pebax Composite Membranes toward Efficient CO₂ Capture. *Journal of Membrane Science*, v. 666, p. 145–157, 2023. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S1383586623029301>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- LOY, A. C. M.; CHIN, B. L. F.; SANKARAN, R. Industrial Revolution 1.0 and 2.0. In: SHOW, P. L.; CHEW, K. W.; LING, T. C. (Ed.). *The prospect of industry 5.0 in biomanufacturing*. 1. ed. Boca Raton, FL: CRC Press, [2021]. p. 1–12.
- LU, Y.; MORRIS, K. C.; FRECHEL, S. Industry 4.0: A survey on technologies, applications and open research issues. *Journal of Industrial Information Integration*, v. 6, p. 1–10, jan. 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jii.2017.04.005>. Acesso em: 29 abr. 2025.
- MAGALHÃES, Regina; VENDRAMINI, Annelise. Os impactos da quarta revolução industrial. *GV-EXECUTIVO*, v. 17, n. 1, p. 40–43, 2018.
- MARTÍNEZ-DÍAZ, J.; MARTÍNEZ-CASTRO, V.; CASTILLA-CABALLERO, D. R. Uso de simulador “COCO” para el diseño de plantas químicas. Caso de estudio: Planta de producción de Ciclohexano. *Revista Ing-Nova*, [S. l.], v. 1, n. 1, p. 66–84, 2022. DOI: 10.32997/rin-2022-3728. Disponível em: <https://revistas.unicartagena.edu.co/index.php/ing-nova/article/view/3728>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- MENEZES, C. C. L.; SOUZA, D. L. de. Proposta de uma rota de produção de Etileno glicol através da comunicação entre os softwares Scilab e COCO. *Revista Brasileira de Ciência, Tecnologia e Inovação*, Uberaba - MG, v. 2, n. 1, p. 36–52, 2018. DOI: 10.18554/rbcti.v2i1.1992. Disponível em: <https://seer.uftm.edu.br/revistaeletronica/index.php/rbcti/article/view/1992>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- MERKEL, T. et al. Power plant post-combustion carbon dioxide capture: an opportunity for membranes. *Journal of Membrane Science*, v. 359, n. 1, p. 126–139, 2010.
- MOTARD, R. L.; SHACHAM, M.; ROSEN, E. M. Steady state chemical process simulation. *AIChE Journal*, v. 21, n. 3, p. 417–436, 1975. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/aic.690210302>. Acesso em: 29 abr. 2025.
- PORTILLO, N. Digital transformation in the petrochemical industry: challenges and opportunities in the implementation of IoT technologies. *arXiv preprint*, arXiv:2503.04749, 2025. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/2503.04749>. Acesso em: 29 abr. 2025.
- RAHIM ALI MAMAGHANI, M. et al. Carbon Molecular Sieve Membranes for Selective CO₂/CH₄ and CO₂/N₂ Separation: Experimental and Techno-Economic Assessment. *Industrial & Engineering*

- Chemistry Research*, v. 62, p. 19116–19132, 2023. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.iecr.3c00719>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- SILVA, A. V. da et al. Uma breve história da engenharia química. *Revista Processos Químicos*, v. 12, n. 24, p. 19–24, 2 jul. 2018. Disponível em: https://ojs.rpqsenai.org.br/index.php/rpq_n1/article/view/459. Acesso em: 29 abr. 2025.
- SILVA, D. C. M. *Adsorção de CO₂ em peneiras moleculares mesoporosas à base de óxido de alumínio*. 2020. 119 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2020. Disponível em: <http://www.repositorio.ufal.br/handle/riufal/7291>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- SILVA, S. C. G. dos S. Adsorção de CO₂ em peneiras moleculares micro e mesoporosas. *Química Nova*, v. 37, n. 4, p. 630–636, 2014. Disponível em: <https://quimicanova.sbq.org.br/pdf/v37n4a06>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- SOUZA, Antonio Augusto Ulson de. *Desenvolvimento de um programa executivo para simulação de processos químicos*. 1985. 137 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia) – Universidade Estadual de Campinas, 1985. Disponível em: <https://hdl.handle.net/20.500.12733/1579390>. Acesso em: 29 abr. 2025.
- TONON, G. P. *Preparo de membranas de carbono de fibra oca modificadas com zinco e viniltrimetoxissilano para separação de gases*. 2022. 126 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2022. Disponível em: <http://hdl.handle.net/10183/271807>. Acesso em: 30 abr. 2025.
- YADAV, A. et al. Simulation study of distillation column using Aspen Plus. *Materials Today: Proceedings*, v. 33, p. 724–729, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.04.717>. Acesso em: 29 abr. 2025.
- ZHOU, K.; LIU, T.; ZHOU, L. Industry 4.0: Towards future industrial opportunities and challenges. In: *Proceedings of the 12th International Conference on Fuzzy Systems and Knowledge Discovery (FSKD)*, 15–17 ago. 2015, Zhangjiajie, China. IEEE, 2015. p. 2147–2152. DOI: 10.1109/FSKD.2015.7382284. Acesso em: 29 abr. 2025. Disponível em: <https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/7382284>.

APÊNDICE

Apêndice A – Código em Scilab.