UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO ESCOLA DE QUÍMICA

PÓS-GRADUAÇÃO EM TECNOLOGIA DE PROCESSOS QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS

Modelagem e Avaliação Técnica de Separador Supersônico para Condicionamento de Gás Natural

Thiago Affonso Ferreira Trotta

Orientadores:

José Luiz de Medeiros, D.Sc Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo, Ph.D

> Rio de Janeiro Abril de 2014

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO ESCOLA DE QUÍMICA

Thiago Affonso Ferreira Trotta

MODELAGEM E AVALIAÇÃO TÉCNICA DE SEPARADOR SUPERSÔNICO PARA CONDICIONAMENTO DE GÁS NATURAL

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Ciências.

Orientadores:

José Luiz de Medeiros, D.Sc Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo, Ph.D

Rio de Janeiro

2014

FICHA CARTALOGRÁFICA

Trotta, Thiago Affonso Ferreira.

Modelagem e Avaliação Técnica de Separador Supersônico para Condicionamento de Gás Natural/Thiago Affonso Ferreira Trotta. – Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2014.

xxx, 202f.: il.

Dissertação (Mestrado em Ciências) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Rio de Janeiro, 2014.

Orientadores: José Luiz de Medeiros e Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo

1. Separador Supersônico. 2. Gás Natural. 3. Condicionamento de Gás Natural. 4. Condicionamento de Gás Natural por Separação Supersônica – Teses. I. Medeiros, José Luiz e Araújo, Ofélia de Queiroz Fernandes (Orientadores). II. Universidade Federal do Rio de Janeiro. Escola de Química. Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos. III. Título.

MODELAGEM E AVALIAÇÃO TÉCNICA DE SEPARADOR SUPERSÔNICO PARA CONDICIONAMENTO DE GÁS NATURAL

Thiago Affonso Ferreira Trotta

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Ciências.

Aprovado por:	
	José Luiz de Medeiros, DSc (Orientador)
	Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo, PhD (Orientadora)
	Carlos Eduardo Fontes da Costa e Silva, DSc
	Eduardo Mach Queiroz, DSc
	Papa Matar Ndiaye, DSc

Escola de Química
Universidade Federal do Rio de Janeiro
2014

Dedico esta dissertação à minha mãe Djanira, minha irmã Paula e à minha namorada Janaina Izabel por todo o seu incentivo e apoio.

AGRADECIMENTOS

A Deus, pois sem ele nada disto teria sido possível.

A minha mãe Djanira e a minha irmã Paula, por todo o apoio, incentivo para superação deste desafio e de todos os outros que já enfrentei.

À Janaina Izabel, por estar ao meu lado durante esta trajetória; por sempre me apoiar nesta jornada; pela confiança em minha capacidade e principalmente, por todo o seu carinho e afeto.

Aos professores José Luiz e Ofélia, pelos ensinamentos, orientação, apoio e comprometimento desprendido ao longo de toda esta trajetória.

À Chemtech, pela oportunidade de realização do mestrado In-Company.

À amiga Renata Machado, pela confiança, apoio e simplesmente por ser uma grande amiga. Ao amigo Elon Correa pelo apoio e ajuda, principalmente por seus ensinamentos em programação.

"With great power, there also must come great responsibility!"

Amazing Fantasy 15, 1962

Resumo da Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências.

MODELAGEM E AVALIAÇÃO TÉCNICA DE SEPARADOR SUPERSÔNICO PARA CONDICIONAMENTO DE GÁS NATURAL

Thiago Affonso Ferreira Trotta Abril. 2014

Orientadores: José Luiz de Mediros, D.Sc

Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo, Ph.D

O Gás natural é um importante componente da matriz energética mundial, tendo um papel crescente na geração de energia no Brasil. Com o advento dos campos de petróleo do Pré-Sal, que produzem grande quantidade de gás associado em cenário offshore, torna-se crítica a aplicação de novas tecnologias para condicionar o gás produzido antes de sua transferência de plataformas offshore. O separador supersônico (3S) é uma tecnologia inovadora que utiliza o aumento de energia cinética do gás para alcançar baixas temperaturas necessárias a efeitos de mudanças de fase capazes de condicionar o gás. O 3S está se tornando gradativamente uma opção atraente pois possui características únicas de modularidade, ausência de peças móveis e robustez que o tornam competitivo em plataformas offshore. Para alcançar a temperatura necessária para a separação liquido-gás, o 3S expande o fluido através de uma tubeira convergente-divergente acelerando-o até velocidades supersônicas reduzindo a temperatura para forçar a condensação ou congelamento de componentes mais pesados do gás. 3S impõe transformação termodinâmica associada a um processo de expansão adiabática quase isentrópica para acelerar o fluido a velocidades supersônicas. O colapso do regime supersônico pela ocorrência de choque supersônico após a garganta da tubeira, retorna o escoamento a níveis subsônicos com recuperação parcial da pressão inicial. Neste estudo foi desenvolvido aplicativo MS-EXCEL que opera integrado a simulador comercial de processos químicos de modo a reproduzir a operação 3S considerando o gás natural como um fluido real com propriedades termodinâmicas e segregação de fase calculadas rigorosamente via equações de estado como Peng-Robinson ou Soave-Redlich-Kwong.

Palavras-chave: Separação supersônica, 3S, condicionamento de gás natural, simulação

Abstract of the Master Dissertation presented to the Program on Technology of Chemical and

Biochemical Processes at Escola de Química of Federal University of Rio de Janeiro as partial

fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science.

MODEL DEVELOPMENT AND TECHNICAL EVALUATION OF SUPERSONIC

SEPARATOR FOR CONDITIONING OF NATURAL GAS

Thiago Affonso Ferreira Trotta

April, 2014

Supervisors: José Luiz de Medeiros, D.Sc

Ofélia de Queiroz Fernandes Araújo, Ph.D

Natural gas is an important component of the energy matrix of the World, playing an

ascending role in power generation of Brazil. With the advent of the Pre-Salt oil fields, which

produce huge volumes of associated gas at offshore scenarios, it becomes critical to apply

new techonologies for conditioning the gas prior to its transference to onshore facilities. The

supersonic separator (3S) is an innovative technology which uses the increase of kinetic head

of the gas to achieve low temperatures necessary to phase transition effects that allow its

conditioning. 3S is becoming gradually more attractive as it has some unique characteristics,

like modularity, no dependence on moving parts and robustness, that make it competitive for

offshore platforms. In order to achieve the necessary temperature for gas-liquid separation,

the 3S expands the fluid through a converging-diverging nozzle accelerating it to supersonic

velocities, consequently reducing the temperature to force the condensation/freezing of heavy

components from the gas. The 3S imposes a thermodynamic transformation associated to an

almost isentropic adiabatic expansion to accelerate the fluid to supersonic velocities. The

subsequent collapse of the supersonic flow at the shoch front, beyond the nozzle throat,

returns the regimen to sub-sonic flow, partially recovering the initial pressure head. In this

study it was developed a MS-EXCEL application which operates integrated with a

commercial process simulator to reproduce the 3S transformations. In this application, the

natural gas is considered a real fluid with thermodynamic properties and phase segregation

rigorously calculated via Peng-Robinson or Soave-Redlich-Kwong equations of state.

Keywords: Supersonic separator, 3S, natural gas conditioning, process simulation

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	MOTIVAÇÕES	3
1.2	OBJETIVOS	4
1.3	ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO	5
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	6
2.1	GÁS NATURAL	6
2.1.1	1 Constituintes do Gás Natural	7
2.1.2	2 Composições típicas do gás natural brasileiro	9
2.1.3	3 Especificação do gás natural	11
2.2 NAT	REMOÇÃO DE CONTAMINANTES PARA CONDICIONAMENTO DI	
2.2.1	1 Processos de desidratação	13
2.2.2	2 Processos de remoção de gases ácidos	17
2.2.3	3 Absorção com Aminas	17
2.3 CON	AJUSTE DE PONTO DE ORVALHO DE HIDROCARBONETOS (HCDP) NDICIONAMENTO DE GÁS NATURAL	
2.3.1	1 Processo Joule-Thomson (JT)	20
2.3.2	2 Processo de Turbo-Expansão (TE)	22
2.3.3	3 Processo de Absorção Refrigerada (AR)	25
2.4	ESCOAMENTO COMPRESSÍVEL 1D (EC-1D)	27
2.5	PROCESSO DE SEPARAÇÃO SUPERSÔNICA	76
2.5.1	1 Introdução	76
2.5.2	2 Características do separador	77
2.5.3	3 Caracterização do escoamento no separador supersônico	80

2.5.4	Comparação entre o processo de separação supersônica e outros processos para
tratam	ento de gás natural87
2.5.5	Exemplos de unidades operando com 3S
3 N	MODELAGEM DO SEPARADOR SUPERSÔNICO92
4 N	METODOLOGIA DE CÁLCULO DO SEPARADOR SUPERSÔNICO97
4.1	CÁLCULO DAS CONDIÇÕES DE ENTRADA 98
4.2	RESOLUÇÃO DO ESCOAMENTO ATÉ O CHOQUE NORMAL
4.3	CÁLCULO DO FRONTAL DE CHOQUE NORMAL 102
4.4	RESOLUÇÃO DO ESCOAMENTO APÓS O CHOQUE NORMAL
5 F	RESULTADOS NUMÉRICOS107
5.1.1	Análise de sensibilidade do modelo à eficiência adiabática para o Gás A
5.1.2	Análise de sensibilidade do modelo à eficiência adiabática para o Gás B140
6 (CONCLUSÕES E SUGESTÕES170

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Exemplo de extratificação de fases em reservatório de petróleo
Figura 2: Hidrato coletado durante abertura de recebedor de pig
Figura 3: Fluxograma típico de um processo de desidratação com glicol (Fonte: GPSA 2004)
Figura 4: Processo de remoção de gases ácidos por absorção com aminas
Figura 5: Processo Joule-Thomson (Fonte: VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008)
Figura 6: Processo de turbo-expansão para ajuste HCDP (Fonte: VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008)
Figura 7: Processo de absorção refrigerada (Fonte: VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008) 25
Figura 8: Separador supersônico 3S genérico
Figura 9: Escoamento EC-1D através de Volume de Controle elementar em um duto de diâmetro variável $(d(x))$ e inclinação $\alpha(x)$ também variável com a posição axial 30
Figura 10: Perfis A/A^{THROAT} vs Ma para CH_4 e CO_2 como GI para $Ma \in [0, 2.8]$
Figura 11: Perfis θ'/θ^{THROAT} vs Ma para CH_4 e CO_2 como GI para $Ma \in [0, 2.8]$
Figura 12: Perfis P'/P^{THROAT} vs Ma para CH_4 e CO_2 como GI para $Ma \in [0, 2.8]$
Figura 13: Tubeira Convergente-Divergente (TCD) para Testes com CH ₄ e CO ₂ como
Figura 14: Perfil A/A^{THROAT} vs x na TCD da Fig. 13 para CH_4 e CO_2 como GI
Figura 15: Perfis Ma vs x na TCD da Fig. 13 para CH ₄ e CO ₂ como GI
Figura 16: Perfis θ'/θ^{THROAT} vs x na TCD da Fig. 13 para CH ₄ e CO ₂ como GI
Figura 17: Perfis P'/P^{THROAT} vs x na TCD da Fig. 13 para CH ₄ e CO ₂ como GI
Figura 18: Perfis Temperatura θ ' vs x na TCD da Fig. 13 para CH ₄ e CO ₂ como GI 59
Figura 19: Perfis Pressão <i>P'</i> vs <i>x</i> na TCD da Fig. 13 para CH ₄ e CO ₂ como GI
Figura 20: Perfis Velocidade Sônica c' vs x na TCD da Fig. 13 para CH ₄ e CO ₂ como G
60

Figura 21: Perfis Velocidade v' vs x na TCD da Fig. 13 para CH ₄ e CO ₂ como GI 60
Figura 22: Razões no Choque P_{PC}/P_{AC} , T_{PC}/T_{AC} , Ma_{PC} vs Ma_{AC} [CH ₄ , CO ₂ como GI] 68
Figura 23: Salto de Entropia Molar no Choque $\frac{\Delta \overline{S}'^{Choque}}{R}$ vs Ma_{AC} [CH ₄ , CO ₂ como GI
Figura 24: Perfis <i>Ma vs x</i> na TCD da Fig. 13 – Choque em <i>Ma_{AC}</i> =2 [CH ₄ , CO ₂ sob GI] 72
Figura 25: Perfis $T(^{\circ}C)$ vs x na TCD da Fig. 13 – Choque em Ma_{AC} =2 [CH ₄ , CO ₂ sob GI
Figura 26: Perfis $P(bar)$ vs x na TCD da Fig. 13 – Choque em Ma_{AC} =2 [CH ₄ , CO ₂ sob GI
Figura 27: Perfis $v(m/s)$ vs x na TCD da Fig. 13 – Choque em Ma_{AC} =2 [CH ₄ , CO ₂ sob GI
Figura 28: Perfis $c(m/s)$ vs x na TCD da Fig. 13 – Choque em Ma_{AC} =2 [CH ₄ , CO ₂ sob GI
Figura 29: T/T^{Throat} vs x na TCD da Fig. 13 – Choque em Ma_{AC} =2 [CH ₄ , CO ₂ sob GI] 74
Figura 30: P/P^{Throat} vs x na TCD da Fig. 13 – Choque em Ma_{AC} =2 [CH ₄ , CO ₂ sob GI] 75
Figura 31: 3S Twister TM (Fonte: Twister BV, 2003)
Figura 32: Perfil de pressão ao longo do 3S para três cenários (Mahmoodzadeh Vaziri et al; 2010)
Figura 33: Perfil de temperatura ao longo do 3S para três cenários (Mahmoodzadel Vaziri et al; 2010)
Figura 34: Perfil velocidade ao longo do 3S para três cenários (Mahmoodzadeh Vaziri et al; 2010)
Figura 35: Perfil de velocidade sônica no 3S para três cenários (Mahmoodzadeh Vazir et al; 2010)
Figura 36: Perfil de Número de Mach no 38 para três cenários (Mahmoodzadeh Vazir et al; 2010)
Figura 37: Perfil de pressão comparado com software de CFD (KARIMI e ABDI; 2009)

Figura 38: Perfil de temperatura comparado com software CFD (KARIMI e ABDI; 2009)
Figura 39: Perfil de Número de Mach comparado com software de CFD (KARIMI e ABDI; 2009)
Figura 40: Perfil de velocidade comparado com software de CFD (KARIMI e ABDI;
2009)
Figura 42: Comparação entre os processos JT e 3S para separação de LGN (Fonte: SCHINKELSHOECK e EPSOM; 2008)
Figura 43: Comparação entre a queda de temperatura com a variação de pressão para diferentes tecnologias (Fonte: ALFYOROV et al., 2005)
Figura 44: Comparação entre as eficiências de remoção de hidrocarbonetos com mais de três átomos de carbono para diferentes tecnologias (Fonte: ALFYOROV et al., 2005) 88
Figura 45: Recuperação de pressão para diferentes valores de <i>Ma_{AC}</i> (MALYSHKINA; 2010)
Figura 46: Análise da influência do Ma_{AC} na recuperação de pressão $[T_E=300K]$ (MALYSHKINA; 2010)
Figura 47: Análise da influência do Ma_{AC} na recuperação de pressão $[T_E=275K]$ (MALYSHKINA; 2010)
Figura 48: Análise da influência do Ma_{AC} na recuperação de pressão $[T_E=250K]$ (MALYSHKINA; 2010)
Figura 49: Plataforma B11 (Fonte: SCHINKELSHOECK e EPSOM, 2006)
Figura 50: Perfil de N° de Mach ao longo do separador para o Gás A em escoamento isentrópico
Figura 51: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás A em escoamento isentrópico
Figura 52: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás A em escoamento

Figura 53: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás A em escoamento isentrópico
Figura 54: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o Gás A em escoamento isentrópico
Figura 55: Diâmetro ao longo do separador para o Gás A em escoamento isentrópico 112
Figura 56: Perfil de fraçãoes molares de vapor e condensado ao longo do separador supersônico parao o gás A em escoamento isentrópico
Figura 57: Perfil de fração molar de metano na fase vapor ao longo do separador
supersônico para o gás A em escoamento isentrópico
Figura 58: Perfil do número de Mach ao longo do separador para o Gás A com 90% de eficiência adiabática
Figura 59: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás A com 90% de eficiência adiabática
Figura 60: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás A com 90% de eficiência adiabática
Figura 61: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás A com 90% de eficiência adiabática
Figura 62: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para Gás A com 90% de eficiência adiabática
Figura 63: Diâmetro ao longo do separador para o Gás A com 90% de eficiência adiabática
Figura 64: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás A com 90% de eficiência adiabática
Figura 65: Perfil de fração molar de metano na fase vapor ao longo do separador supersônico para o gás A com 90% de eficiência adiabática
Figura 66: Perfil do número de Mach ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência adiabática
Figura 67: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência
adiabática

Figura 68: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás A com 80% de
eficiência adiabática
Figura 69: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência adiabática
Figura 70: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência adiabática
Figura 71: Diâmetro ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência adiabática
Figura 72: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para
o Gás A com 80% de eficiência adiabática
Figura 73: Perfil de fraçãomolar de metano na fase vapor ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência adiabática
Figura 74: Perfil de número de Mach ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática
Figura 75: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática
Figura 76: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática
Figura 77: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática
Figura 78: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática
Figura 79: Diâmetro ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática
Figura 80: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática
Figura 81: Perfil de fração de metano na fase gás ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática
Figura 82: Perfil de número de Mach ao longo do separador para o Gás A com 60% de eficiência adiabática

Figura 83: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás A com 60% de eficiência
adiabática
Figura 84: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás A com 60% de eficiência adiabática
Figura 85: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás A com 60% do
eficiência adiabática
Figura 86: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o Gás A com 60% de eficiência adiabática
Figura 87: Diâmetro ao longo do separador para o Gás A com 60% de eficiência adiabática
Figura 88: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para
o Gás A com 60% de eficiência adiabática
Figura 89: Perfil de fração de metano na fase gás ao longo do separador para o Gás A
com 60% de eficiência adiabática
Figura 90: Comparação do desempenho 3S para diferentes eficiências adiabáticas com o Gás A
Figura 91: Comparação do desempenho 3S para diferentes eficiências adiabáticas com o Gás A
Figura 92: Perfil do número de Mach ao longo do separador para o Gás B en escoamento isentrópico
Figura 93: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás B em escoamento
isentrópico
Figura 94: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás B em escoamento
isentrópico
Figura 95: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás B em escoamento isentrópico
Figura 96: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o Gás B en escoamento isentrópico
Figura 97: Diâmetro ao longo do senarador para o Gás R em escoamento isentrónico 144

o Gás B em escoamento isentrópico
Figura 99: Perfil de fração de metano na fase vapor para o Gás B em escoamento
isentrópico
Figura 100: Perfil do número de Mach ao longo do separador para o Gás B com 90% de eficiência adiabática
Figura 101: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás B com 90% de eficiência adiabática
Figura 102: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás B com 90% de
eficiência adiabática
Figura 103: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás B com 90% de eficiência adiabática
Figura 104: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o Gás B com 90% de eficiência adiabática
Figura 105: Diâmetro ao longo do separador para o Gás B com 90% de eficiência adiabática
Figura 106: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás B com 90% de eficiência adiabática
Figura 107: Perfil de fração de metano na fase vapor para o Gás B com 90% de eficiência adiabática
Figura 108: Perfil do número de Mach ao longo do separador para o gás B com 80% de eficiência adiabática
Figura 109: Perfil de pressão ao longo do separador para o gás B com 80% de eficiência adiabática
Figura 110: Perfil de temperatura ao longo do separador para o gás B com 80% de eficiência adiabática
Figura 111: Perfil de velocidade ao longo do separador para o gás B com 80% de eficiência adiabática
Figura 112: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o gás B com 80% de eficiência adiabática.

Figura 113: Diâmetro ao longo do separador para o gás B com 80% de eficiência
adiabática
Figura 114: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás B com 80% de eficiência adiabática
Figura 115: Perfil de fração de metano na fase vapor ao longo do separador para o Gás B com 80% de eficiência adiabática
Figura 116: Perfil de número de Mach ao longo do separador para o Gás B com 73% de eficiência adiabática
Figura 117: Perfil de pressão ao longo do separador para o gás B com 73% de eficiência adiabática
Figura 118: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás B com 73% de eficiência adiabática
Figura 119: Perfil de velocidade ao longo do separador para o gás B com 73% de eficiência adiabática
Figura 120: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o gás B com 73% de eficiência adiabática
Figura 121: Diâmetro ao longo do separador para o gás B com 73% de eficiência adiabática
Figura 122: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás B com 73% de eficiência adiabática
Figura 123: Perfil de fração de metano ao longo do separador para o Gás B com 73% de eficiência adiabática
Figura 124: Perfil de número de Mach ao longo do separador para o gás B com 60% de eficiência adiabática
Figura 125: Perfil de pressão ao longo do separador para o gás B com 60% de eficiência adiabática
Figura 126: Perfil de temperatura ao longo do separador para o gás B com 60% de eficiência adiabática
Figura 127: Perfil de velocidade ao longo do separador para o gás B com 60% de eficiência adiabática

Figura 128: Perfil de velocidade sônica ao longo do separa	ador para o gás B com 60% de
eficiência adiabática	
Figura 129: Diâmetro ao longo do separador para o s	gás B com 60% de eficiência
adiabática	
Figura 130: Perfil de frações de vapor e condensado ao los	ngo do separador para o Gás B
com 60% de eficiência adiabática	164
Figura 131: Perfil de composição de metano na fase vapor	r ao longo do separador para o
Gás B com 60% de eficiência adiabática	164
Figura 132: Comparação do desempenho 3S para diferen	tes eficiências adiabáticas com
o Gás B	
Figura 133: Comparação do desempenho 3S para diferen	tes eficiências adiabáticas com
o Gás B	169

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 Composição típica do gás natural brasileiro	10
Tabela 2: Especificação de gás natural (Fonte: A.N.P 2012)	11
Tabela 3: Composições dos gases analisados	. 107

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

LISTA DE ABREVI	ATURAS E SIGLAS				
Abreviatura/sigla	Descrição				
1D	Unidimensional				
3S	Separador supersônico para condicionamento de gás natural				
AR	Absorção Refrigerada				
ANP	Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis				
ASTM	American Society for Testing and Materials				
CAPEX	Capital Expenditures ou Despesas de Capital				
CH ₄ , CO ₂ , COS	Metano, Dióxido de Carbono e Sulfeto de Carbonila				
CFD	Computational Fluid Dynamics ou Fluidodinâmica Computacional				
EC	Escoamento Compressível				
EC-1D	Escoamento Compressível Unidimensional (1D) Axial				
EC-1D-E	Escoamento Compressível Unidimensional (1D) Axial em Regime Estacionário				
EC-1D-E*	EC-1D-E em Condição Sônica ao final de Seção Isentrópica				
EC-1D-EI	EC-1D-E Isentrópico com área de seção variável				
ELV, ELLV, ESLV	Equilíbrio Líquido-Vapor, Equilíbrio Líquido-Líquido-Vapor e Equilíbrio Sólido-Líquido-Vapor				
EOR	Enhanced Oil Recovery ou Recuperação Avançada de Petróleo				
EOS, EOS-GI	Equation of State ou Equação de Estado; EOS do Gás Ideal				
GI	Gás Ideal				
GLP	Gás liquefeito de petróleo				
GN	Gás natural				
GPSA	Gas Processors Suppliers Association				
H_2O , H_2S	Água e Sulfeto de Hidrogênio				
HCDP ISO	Hydrocarbons Dew Point ou Ponto de Orvalho de Hidrocarbonetos International Organization for Standardization				
JT	Processo Joule-Thomson para ajuste HCDP				
LGN	Líquidos de gás natural				
MEG, DEG, TEG	Monoetilenoglicol, Dietilenoglicol, Trietilenoglicol				
MMscfd	Milhão de pés cúbicos standard por dia (condições standard: 60°F, 1atm)				
MNR	Método Newton-Raphson				
N ₂ , RNH ₂ , RSH, SO ₂ NBR	Nitrogênio, Amina, Mercaptana e Dióxido de Enxofre Norma Brasileira Regulamentadora				
OPEX	Operational Expenditures ou Custos Operacionais				
PR-EOS, SRK-EOS	Peng-Robinson EOS e Soave-Redlich-Kwong EOS com regras clássicas				
RPM	Velocidade angular dada em rotações por minuto				
SI	Sistema Internacional de Unidades				
SS	Supersônico				
TCD	Tubeira Convergente-Divergente				
TE	Processo de Turbo-Expansão para ajuste HCDP				

NOMENCLATURA

NOMENCLATURA Símbolos	Descrição	Unidade
A	Área de seção de escoamento em duto geral	m^2
A(x)	Área de seção de escoamento variável com a posição axial	m^2
A*	Área de seção de escoamento na garganta (<i>throat</i>) de TCD	m^2
A^{THROAT}	Área de seção de escoamento na garganta (<i>throat</i>) de TCD	m^2
b	Fator de amortecimento do passo no MNR	
c	Velocidade sônica em um fluido ou material qualquer	m/s
c_E	Velocidade sônica do fluido na entrada do 3S	m/s
C_n	Velocidade sônica do fluido no trecho n do 3S	m/s
c'	Velocidade sônica de gás ideal	m/s
\overline{C}_P	Capacidade calorífica molar a pressão constante do fluido	J/K.mol
\overline{C}_V	Capacidade calorífica molar a volume constante do fluido	J/K.mol
$egin{array}{c} \overline{C}_P \ \overline{C}_V \ \overline{C}_P \ \end{array}$	Capacidade calorífica molar a pressão constante em GI	J/K.mol
$\overline{C}_V{}'$	Capacidade calorífica molar a volume constante em GI	J/K.mol
d	Diâmetro de duto geral em escoamento compressível	M
d^*	Diâmetro da garganta (throat) de TCD	M
d^{THROAT} , D^{THROAT}	Diâmetro da garganta (throat) de TCD	M
d(x)	Diâmetro variável com a posição axial em duto geral	M
D_E	Diâmetro de entrada do 3S	M
D_n	Diâmetro do trecho n do 3S	M
D_S	Diâmetro de saída do 3S	M
D_T	Diâmetro da garganta (throat) da TCD 3S	M
D_{AC}	Diâmetro no frontal de choque normal no 3S	M
\overline{E}_E	Energia total molar do fluido na entrada do 3S	J/mol
\overline{E}_{AC}	Energia total molar antes do frontal de choque normal	J/mol
\overline{E}_{CE}	Energia cinética molar na entrada do 3S	J/mol
\overline{E}_{Cn}	Energia cinética molar no trecho n do 3S	J/mol
\overline{E}_{PC}	Energia total molar após o choque supersônico	J/mol
$f(Re, \varepsilon / d)$	Fator de atrito de Darcy expresso em Reynolds e rugosidade de parede	
$\underline{F}(\underline{\eta}) = \underline{0}$	Vetor de restrições a resolver com MNR nas variáveis $\underline{\eta}$	
F_{AC}	Vazão molar antes do frontal de choque normal	mol/s
F_E	Vazão molar de entrada no 3S	mol/s

F_{PC}	Vazão molar após o frontal de choque normal	mol/s
g	Aceleração da gravidade ao nível do mar (9.81 m/s²)	m/s^2
h	Pequena variação de pressão para derivada numérica	Pa
\overline{H}	Entalpia molar	J/mol
\overline{H}_E	Entalpia molar do fluido na entrada no 3S	J/mol
\overline{H}_n	Entalpia molar do fluido no trecho n do 3S	J/mol
$\underline{\underline{J}}^{-l}$	Inversa da matriz jacobiana do sistema do choque	
L	Comprimento axial do 3S	M
L	Comprimento axial em trecho de duto geral	M
L_C	Comprimento axial da seção convergente do 3S	M
L_{Ch}	Distância da entrada do 3S ao frontal de choque normal	M
L_D	Comprimento axial da seção divergente do 3S	M
L_E	Comprimento axial equivalente de acidentes no duto	M
Ma = v / c	Número de Mach do escoamento	
Ma^*	Número de Mach na garganta (throat) de TCD	
Ma^{THROAT}	Número de Mach na garganta (throat) de TCD	
Ma_E	Número de Mach do fluido na entrada do 3S	
Ma_n	Número de Mach do fluido no trecho n do 3S	
M_M	Massa molar do fluido	kg/mol
M_{ME}	Massa molar do fluido na entrada do 3S	kg/mol
n	Índice de trecho <i>Adiabatic Expander</i> na discretização 3S	
P	Pressão para análise de escoamento compressível	Pa
P^*	Pressão na garganta (throat) de TCD	Pa ou bar
P^{THROAT}	Pressão na garganta (throat) de TCD	Pa ou bar
$P = P(\theta, \rho, \underline{Y})$	Equação de estado do fluido explícita em pressão	Bar
P_{AC}	Pressão do fluido antes do frontal de choque normal	bar ou Pa
P_E	Pressão do fluido na entrada do 3S ou entrada de TCD	bar ou Pa
P_n	Pressão do fluido no trecho n do 3S	bar ou Pa
P_{PC}	Pressão do fluido após o frontal de choque normal	bar ou Pa
q	Vazão mássica (positiva se no sentido axial x do duto)	kg/s
R	Constante dos gases ideais (8.314 J/mol.K)	J/K.mol
$Re = \frac{4q}{\pi . d . \mu}$	Número de Reynolds em escoamento	
\overline{S}	Entropia molar	J/K.mol
t	Tempo	S

T	Temperatura absoluta (= θ)	K
T^*	Temperatura na garganta (throat) de TCD (ver θ^*)	K
T^{THROAT}	Temperatura na garganta (throat) de TCD (ver θ^*)	K
T_{AC}	Temperatura do fluido antes do frontal de choque normal	K
T_E	Temperatura do fluido na entrada de 3S ou entrada de TCD	K
T_n	Temperatura do fluido no trecho n do 3S	K
T_{PC}	Temperatura do fluido após o frontal de choque normal	K
\overline{U}	Energia interna molar	J/mol
$v = \frac{q}{\rho . A}$	Velocidade em escoamento compressível (positiva se a favor da direção axial <i>x</i> do duto)	m/s
v*	Velocidade na garganta (throat) de TCD	m/s
v ^{THROAT}	Velocidade na garganta (throat) de TCD	m/s
v_E	Velocidade do fluido na entrada do 3S	m/s
V_n	Velocidade do fluido no trecho n do 3S	m/s
x	Posição axial no escoamento compressível geral 1D	M
x_n	Distância da entrada do 3S até o fim do trecho n	M
$x_{AC} = x_{PC}$	Distância da entrada do 3S até o frontal de choque	M
<u>X</u>	Vetor de frações molares de espécies em líquido em ELV	
<u>Z</u>	Vetor de frações molares de composição global do fluido	
\underline{Z}_{E}	Vetor de frações molares de composição global do fluido de entrada no 3S (idêntico a <u>Z</u> sob composição const.)	
<u>Y</u>	Vetor de frações molares de espécies em vapor em ELV	
<u>Y</u>	Vetor de frações molares de espécies de um gás geral	
Símbolos Gregos	Descrição	Unidade
α	Inclinação de um duto genérico em escoamento compressível	Rd
α	Inclinação de parede da seção convergente do 3S	Rd
β	Inclinação de parede da seção divergente do 3S	Rd
β	Fração molar vaporizada em uma corrente de fluido	
Δx	Elemento axial em duto com escoamento compressível	M
Δx_E	Elemento axial equivalente de acidentes em duto	M
$\gamma = \overline{C}_P / \overline{C}_V$	Razão de capacidades caloríficas molares do fluido geral	
$\gamma' = \overline{C}_P' / \overline{C}_V' = $ $\gamma' = \overline{C}_P' / (\overline{C}_P' - R)$	Razão de capacidades caloríficas molares de gás ideal	
$\Gamma.\Delta x$	Força de reação da parede sobre o elemento de fluido Δx na direção axial devido à expansão da seção de escoamento	N

ho	Densidade	kg/m^3		
$\rho' = P.M_M / R.\theta$	Densidade de gás ideal	kg/m^3		
$\rho = \rho(\theta, P, \underline{Y})$	Equação de estado geral explícita em densidade	kg/m ³		
${\cal E}$	Rugosidade de parede em duto	M		
ξ	Eficiência adiabática para o escoamento no 3S	M		
$\underline{\eta}_{0}$	Vetor de estimativas iniciais para MNR em $\underline{F}(\underline{\eta}) = \underline{0}$			
$\underline{\eta}_k$	Vetor de estimativas MNR na iteração k em $\underline{F}(\underline{\eta}) = \underline{0}$			
μ	Viscosidade dinâmica	Pa.s		
ζ	Tolerância ao erro para MNR			
θ	Temperatura absoluta em escoamento compressível (=T)	K		
$ heta^*$	Temperatura absoluta na garganta (throat) de TCD	K		
$ heta_{\!E}$	Temperatura absoluta externa ao duto	K		
Ω	Coeficiente global de transferência de calor em duto geral	$W/m^2.K$		
$\underline{arOmega}_k$	Vetor de busca do MNR na iteração k			
Ψ	Tensão cizalhante na parede em escoamento compressível	Pa		
$\Psi.d.\Delta x$	Força sobre o elemento de fluido Δx na direção axial devido à tensão cizalhante na parede do duto	N		
$\boldsymbol{\Xi}_{\theta} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial \theta}\right)_{P,Y}$	Derivada da densidade com temperatura absoluta sob composição e pressão constantes via $\rho = \rho(\theta, P, \underline{Y})$	kg/m ³ .K		
$\Xi_P = \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{\theta, Y}$	Derivada da densidade com pressão sob composição e temperatura constantes via $\rho = \rho(\theta, P, \underline{Y})$	kg/m³.Pa		
τ	Passo de queda de pressão para discretização no 3S	Pa		
Sobrescritos	Descrição			
*	Indica em escoamento sônico (choked) ou na garganta (thr	oat) de TCD		
THROAT	Idêntico a *, ou seja, na garganta de TCD			
$(\cdot)'$	Indica propriedade de gás ideal			
o	Condição de estagnação do fluido (Ma=0)			
RES	Indica Propriedade Residual			
IS	Isentrópico			
Subscritos	Descrição			
E	Na entrada do 3S			
R	Ponto de referência qualquer no escoamento EC-1D-EI			
AC	Imediatamente antes do frontal de choque normal em TCD			
PC	Imediatamente após o frontal de choque normal em TCD			

1 INTRODUÇÃO

O gás natural (GN) atualmente é um importante componente da matriz energética mundial, e com potencial de aumentar ainda mais sua participação nos próximos anos. De acordo com o relatório de 2013 da *World Energy Council* as reservas comprovadas de gás natural aumentaram em 3% entre 2010 e 2013 (*World Energy Resources 2013 Survey;* 2013). Além deste aumento na oferta, outro motivo para o aumento no consumo deste combustível é que o mesmo gera impacto ambiental menor quando comparado a outros combustíveis fósseis (p.ex: carvão e derivados líquidos de petróleo). Os coeficientes de emissão de gases de efeito estufa do GN são menores do que as do carvão e de derivados líquidos de petróleo por kJ produzido.

No entanto, a principal desvantagem do GN como combustível é a sua dificuldade de transporte desde as zonas de produção até os pontos de consumo. No caso do Brasil, isto é ainda agravado pelo fato de que uma parcela cada vez maior das reservas encontram-se em campos de produção offshore em águas ultra-profundas (profundidade > 2000m) a mais de 300km do litoral. Neste cenário a forma mais eficiente de transporte do GN corresponderia a utilizar gasodutos submarinos de alta pressão ligando as plataformas de produção às unidades de processamento de GN onshore (de Oliveira, 2011). Porém, como o GN bruto possui contaminantes que podem prejudicar o escoamento em gasodutos submarinos (e.g. acúmulo de sólidos relativos a hidratos de hidrocarbonetos devido à presença de água, corrosão devido à presença de gases ácidos, acúmulo de líquidos por condensação de hidrocarbonetos de maior peso molecular, etc), é necessário que o mesmo sofra processo de condicionamento na plataforma de produção. O objetivo do condicionamento do gás é justamente a redução da quantidade de contaminantes inorgânicos (H₂O, CO₂, H₂S) e de hidrocarbonetos condensáveis até valores aceitáveis para o escoamento e comercialização posterior do gás. Assim as principais operações envolvidas no condicionamento de gás natural são: (i) desidratação do gás; (ii) remoção de gases ácidos CO₂ e H₂S do gás; e (iii) ajuste de ponto de orvalho de hidrocarbonetos (HCDP) do gás.

No caso dos campos do Pré-Sal, a produção de óleo ocorre associada a altas vazões de gás natural que não pode ser simplesmente queimado em *flares* por razões ambientais associadas a compromissos acerca de limitações de emissão de CO₂ na atmosfera. Portanto, para viabilizar a exploração e produção dos poços do Pré-Sal é imprescindível que este gás seja comercializado. Para isto, são necessárias infraestruturas de transporte de GN (i.e. dutos

submarinos) e que as plataformas de produção contenham processos para realizar de forma adequada o condicionamento do GN produzido.

Uma opção tecnológica que vem sendo considerada como possível alternativa compacta para este problema é a operação unitária conhecida como o Separador Supersônico (3S).

O 3S é um equipamento compacto, modular, de estrutura simples, sem partes móveis, dispensando supervisão humana e robusto, que poderia atuar para remoção de condensáveis do GN para ajustar HCDP. O 3S, portanto, teria menor complexidade e menor necessidade de manutenção comparativamete a processos convencionais para ajustar HCDP como ciclos de refrigeração a propano e circuitos de expansão Joule-Thomson (JT), opções estas ambas clássicas que só podem ser operadas no assim chamado setor *Top-Side* dos sistemas de produção *offshore* de óleo e gás (isto é, sobre o *deck* ou convés de plataformas de produção *offshore*).

Por estas características, o 3S apresenta-se como uma interessante opção para condicionamento de gás natural em plataformas *offshore*. Opção esta que, repita-se, ainda não é amplamente utilizada no mundo para condicionamento de GN, mas que tem bom potencial para tal.

Isto é especialmente claro porque 3S tem uma importante vantagem comparativa com respeito às alternativas JT e de refrigeração a propano para ajuste HCDP mencionadas acima. A saber, 3S é a única alternativa para ajuste HCDP que pode operar fora do *Top-Side* em condição *Sub-Sea* em locações ultra-profundas. Em outras palavras, instalado em locações submarinas remotas sobre o leito oceânico próximo às instalações de cabeças de poços (*Well-Heads*).

1.1 MOTIVAÇÕES

Nossas motivações para este trabalho advêm após consideração dos seguintes fatos acerca da tecnologia 3S:

- (1) Atualmente há poucos detentores mundiais da tecnologia 3S ou afins; i.e. poucas empresas no mundo são capazes de dimensionar, fabricar, comercializar e instalar 3S, o que também é uma prova de que o conhecimento da engenharia (*Know-How*) da operação 3S é mantido sob controle de poucas entidades. Isto também explica o fato de que, apesar de sua aparente simplicidade, a operação 3S seja comercializada atualmente com custos altos sob o ponto de vista de despesas de capital (CAPEX).
- (2) São poucos os trabalhos na literatura pública envolvendo análises completas de escoamento compressível multifásico sob Número de Mach elevado, associado à segregação de fases em Equilíbrio Líquido-Vapor (ELV) ou em Equilíbrio Sólido-Líquido-Vapor (ESLV) ao longo do 3S, evidentemente considerando o material em escoamento como um fluido compressível multifásico real com propriedades termodinâmicas corretamente calculadas.
- (3) Como consequência dos fatos descritos nos itens (1) e (2), resulta que não há muitos trabalhos na literatura explorando os limites operacionais e econômicos da operação 3S, limites estes que são importantes para correta alocação do 3S de forma competitiva sob o aspecto econômico, já que de nada serve a alocação indiscriminada de unidades 3S com desempenho econômico inferior ao de outras tecnologias mais convencionais de processamento de GN para ajuste HCDP.
- (4) Os principais softwares comerciais de simulação de processos químicos como HYSYS, ASPEN-HYSYS e UNISIM-DESIGN, apesar de rigorosos nos cálculos de propriedades termodinâmicas e de equilíbrio de fases, não apresentam modelo da operação 3S em seus arsenais de operações unitárias à disposição dos usuários comuns. Isto é, apesar de 3S ser considerada uma operação unitária de separação em regime estacionário, softwares profissionais de simulação de processos estacionários simplesmente não fazem menção à mesma.

Isto posto, resulta que a principal motivação deste trabalho consiste em explorar esta "janela de oportunidade" para desenvolver recurso computacional público, de alta portabilidade, acoplável a simuladores profissionais de processos, permitindo que a operação unitária 3S possa ser analisada e projetada de forma rigorosa sem necessidade de contatar

detentores da tecnologia 3S. Além disto, outra importante motivação deste estudo é avaliar e testar novas alternativas para o condicionamento de GN, já que o processo 3S não é utilizado em larga escala no mundo para ajuste HCDP de GN.

1.2 OBJETIVOS

Motivado pelos desafios apresentados anteriormente, este estudo tem como objetivo geral o levantamento e domínio do conhecimento necessário à engenharia e à análise de separadores 3S.

Em contexto mais particular, os seguintes objetivos específicos podem ser relacionados:

- (1) Apresentar um Referencial Teórico prático acerca de Escoamento Compressível Unidimensional (EC-1D) que é o campo de conhecimento básico para engenharia e análise de separadores 3S.
- (2) Desenvolver aplicativo computacional integrado MS-EXCEL-HYSYS executando procedimento matemático e algorítmico capaz de prever, com modelos termodinâmicos rigorosos, o escoamento compressível e eventual segregação de fase líquida sob ELV, ao longo do 3S, incluindo a manifestação do frontal de choque normal supersônico após a garganta da tubeira convergente-divergente (TCD) do 3S;
- (3) Utilizar o modelo desenvolvido para testar ajuste HCDP via 3S com duas composições distintas de GN para validação de resultados e para avaliar a pertinência de uso de 3S para ajuste de HCDP de GN.

1.3 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Além do presente Capítulo 1, a organização da Dissertação compreende os Capítulos 2, 3, 4, 5 e 6.

Inicialmente a Revisão Bibliográfica apresentada no Capítulo 2 aborda quatro assuntos principais:

- A caracterização do GN, desde seus constituintes principais até a composição regulamentada no Brasil;
- A cadeia de processamento deste combustível, incluindo as principais operações unitárias para condicionamento do GN;
- Referencial teórico completo em Escoamento Compressível Unidimensional (EC-1D)
 que é uma das áreas onde Mecânica de Fluidos e Termodinâmica Clássica não podem
 prosperar uma sem a outra, e é também o campo de conhecimento básico para
 engenharia e análise do 3S;
- Por último, são apresentadas as características básicas do 3S, bem como os trabalhos prévios envolvendo modelagem e utilização de 3S na literatura.

Segue-se o Capítulo 3 que apresenta a modelagem estacionária de 3S utilizada nesta Dissertação e os pontos de conexão desta modelagem com o Simulador Profissional de Processos HYSYS que funcionará como ferramenta calculadora de propriedades termodinâmicas em contexto monofásico e multifásico.

No Capítulo 4 apresenta-se o desenvolvimento do aplicativo MS-EXCEL-HYSYS para resolução da operação 3S, compreendendo metodologia de cálculo do escoamento compressível supersônico com segregação simultânea de fase l;iquida ao longo do 3S e resolução do frontal de choque normal supersônico.

O Capítulo 5 apresenta os resultados gráficos e numéricos acerca de simulação da operação unitária 3S com a ferramenta de resolução 3S apresentada nos Capítulos 3 e 4. Os resultados foram condensados em termos de uma análise de sensibilidade do modelo 3S ao parâmetro de eficiência termodinâmica referente à expansão adiabática na tubeira convergente-divergente (TCD) do 3S para duas composições distintas de GN.

Por fim, no Capítulo 6 são apresentadas as conclusões deste estudo, bem como sugestões para outros trabalhos.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste Capítulo, estão relacionadas referências bibliográficas que fundamentam a presente Dissertação. Inicialmente são apresentados o GN e seus constituintes e a especificação deste como produto. Em seguida são apresentados os processos de condicionamento do GN envolvendo remoção de contaminantes (remoção de CO₂, remoção de H₂S e desidratação) e ajuste HCDP, visando a obter gás que atenda a especificação comercial de GN e de outros subprodutos deste processamento, tais como gás liquefeito de petróleo (GLP), e condensado de gás natural (LGN). Segue-se o Referencial Teórico em Escoamento Compresível Unidimensional (EC-1D). Por último, será apresentado o 3S, discutindo-se seu princípio de funcionamento e sua utilização atual como equipamento de processo na literatura.

2.1 GÁS NATURAL

Pela Lei brasileira 9478, o GN é todo hidrocarboneto que se encontra na fase gasosa ou em solução nas condições de reservatório e se mantém em fase gasosa nas condições atmosféricas de pressão e temperatura. Os autores Vaz, Maia e dos Santos apresentam duas definições para o GN. A primeira é idêntica à definição acima e a segunda classifica este fluido como a porção do petróleo que se encontra na fase gasosa ou em solução no óleo nas condições de reservatório e que não condensa quando da mudança para as condições atmosféricas de pressão e temperatura. (VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008). Ainda que estas definições sejam similares, a segunda apresenta uma visão mais abrangente do GN. Esta considera que o mesmo não é apenas composto por hidrocarbonetos, mas também por impurezas que estariam na fase gasosa (p.ex: CO₂, H₂S e água).

Quando o plano de explotação do poço prevê a produção de óleo como principal produto, o GN é classificado como gás natural associado. Quando o objetivo principal do poço é a produção do GN, este é classificado como gás não associado. (VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008).

Tomando-se a Figura 1 como exemplo de estratificação em um reservatório de petróleo, caso a tomada de fluido seja realizada na área do gás, seria dito que este é um reservatório de gás não associado. Alternativamente, caso seja realizada a extração de fluido na região de óleo + gás, este seria um reservatório de gás associado.

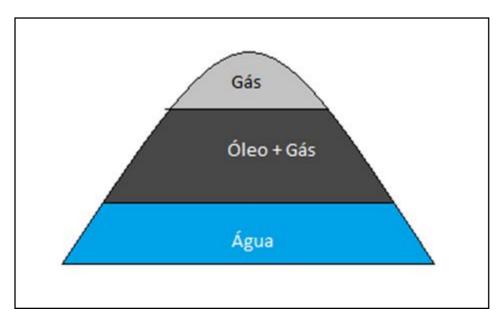


Figura 1: Exemplo de extratificação de fases em reservatório de petróleo

2.1.1 Constituintes do Gás Natural

Neste tópico serão apresentados de forma resumida os principais constituintes do GN. Não será apresentada aqui uma composição típica deste fluido, mesmo porque, esta é dependente do petróleo do qual se origina e portanto será também dependente do reservatório de onde este é extraído. Uma apresentação mais detalhada destes constituintes pode ser encontrada em *Tecnologia da Indústria do Gás Natural* (VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008).

- Hidrocarbonetos: são todos os compostos orgânicos formados exclusivamente por átomos de carbono e hidrogênio. No GN encontram-se as seguintes classes de hidrocarbonetos:
 - O Alcanos: são os compostos cujas cadeias de átomos de carbono se ligam apenas através de ligações simples. Tais ligações são mais estáveis do que as ligações duplas ou triplas e portanto estes compostos são mais estáveis do que aqueles que possuem ligações duplas ou triplas. Quando o alcano se apresenta em cadeia aberta também pode ser chamado de parafina ou composto parafínico. Quando a molécula possui uma cadeia fechada será chamada de cicloalcano ou composto naftênico.
 - Alcenos: são os compostos que possuem pelo menos uma ligação dupla entre átomos de carbono, também chamados de compostos olefínicos. Como esta ligação é menos estável do que a ligação simples (isto é, o composto é mais reativo), eles dificilmente são encontrados na natureza,

- pois, em geral, nas condições de reservatório já reagiriam formando alcanos.
- Hidrocarbonetos aromáticos: são os hidrocarbonetos que apresentam pelo menos um anel aromático, anel de ligações duplas alternadas entre carbonos. Uma característica importante desta configuração é o fato de que estas ligações não se mantém fixas, isto é, os átomos de carbono participantes destas ligações variam ao longo do tempo. Cabe ressaltar que conforme as definições apresentadas anteriormente para o GN, a maior fração do mesmo é composta por hidrocarbonetos na faixa de um a quatro átomos de carbono. Acima de 4 átomos de carbono, espera-se que o hidrocarboneto se encontre no estado líquido nas condições atmosféricas de temperatura e pressão.
- Não hidrocarbonetos: os compostos que não são hidrocarbonetos mas que podem ser encontrados no GN são também chamados de contaminantes, tendo em vista que a presença destes traz propriedades indesejáveis ao mesmo (e.g. redução do poder calorífico, corrosão em tubulações e/ou equipamentos de processo, toxicidade, aumento do impacto ambiental durante a queima, etc). Abaixo são apresentados os principais contaminantes e seus efeitos.
 - Nitrogênio (N₂): este gás reduz o poder calorífico do GN pois não participa das reações de combustão.
 - O Dióxido de carbono (CO₂): em presença de água o CO₂ pode formar hidratos, caso o gás se encontre em baixas temperaturas e altas pressões. Além disto, o CO₂ também é um gás ácido, ou seja, na presença de água livre pode formar uma solução ácida corrosiva, de acordo com a Eq. (2.1).

$$H_2O + CO_2 \leftrightarrow H^+ + HCO_3^- \tag{2.1}$$

Por fim, como o CO₂ não sofre reação de combustão, o seu excesso também reduz o poder calorífico do gás, e também aumenta o impacto ambiental do mesmo por kJ de calor gerado, devido à sua contribuição ao efeito estufa.

O Água (H₂O): como mencionado anteriormente, este componente em presença de outros gases pode gerar hidratos sólidos que podem bloquear linhas de transferencia. Além disso, também pode formar soluções ácidas e corrosivas na presença de CO₂ e H₂S.

- Ó Ácido sulfídrico (H₂S): por ser um gás ácido pode formar uma solução ácida corrosiva em presença de água. Outros efeitos adversos dizem respeito à toxicidade do H₂S e à sua capacidade de gerar óxidos poluentes na atmosfera (SO_X) nos processos de combustão.
- Mercaptanas (COS, CS₂ e R-SH): compostos de enxofre que durante o processo de combustão do GN geram SO_X, gerando alto impacto ambiental.

Tendo em vista a quantidade de constituintes esperados no GN (tanto entre os hidrocarbonetos quanto entre os contaminantes), e dado que a composição deste depende do reservatório, serão apresentadas no próximo item algumas composições típicas encontradas para o GN bruto no Brasil.

2.1.2 Composições típicas do gás natural brasileiro

Conforme mencionado anteriormente a composição química do GN pode variar bastante entre diferentes poços, ainda que sempre se concentre entre os compostos apresentados no item anterior. Vaz, Maia e dos Santos (2008) indicam as seguintes composições típicas para o mesmo mostradas na Tabela 1, composições estas que se referem às condições de cabeça de poço (*Well-Head*), isto é, justo após a admissão no sistema de tubulações de produção (*Flow-Line*), portanto antes do processamento e condicionamento do gás.

Tendo em vista que o objetivo final do GN é sua comercialização, é necessário definirse características mínimas de qualidade. Deste modo independentemente da rota de produção e o processamento adotados, o fluido finalmente obtido sempre deverá atender aos requisitos de consumo. Torna-se então necessário que o GN a ser comercializado seja especificado por uma entidade governamental, esta especificação será apresentada no próximo item. Tabela 1: Composições típicas do gás natural brasileiro nas condições de cabeça de poço

Composição (%vol.)	CE RN	SE AL	Bahia	ES	RJ	SP	AM
Metano	74,53	81,32	81,14	88,16	79,69	87,98	68,88
Etano	10,40	8,94	11,15	4,80	9,89	6,27	12,20
Propano	5,43	3,26	3,06	2,75	5,90	2,86	5,19
Butanos	2,81	1,84	1,39	1,55	2,13	1,16	1,80
Pentanos	1,30	0,74	0,72	0,44	0,77	0,27	0,43
Hidrocarbonetos com mais de 6 carbonos	1,40	0,42	0,30	0,44	0,44	0,07	0,18
Nitrogênio	1,39	1,51	1,43	1,62	0,80	1,16	11,12
Dióxido de carbono	2,74	1,97	0,81	0,24	0,50	0,23	0,20
Ácido sulfídrico (mg/m³)	1,50	7,50	7,60	7,50	6,70	Traços	

Fonte: Vaz, Maia e dos Santos, 2008

2.1.3 Especificação do gás natural

No Brasil a entidade responsável por regular a produção e a comercialização do gás natural, bem como a especificação deste fluido é a Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP). Na **Tabela 2** encontra-se a especificação do GN para comercialização no Brasil.

Tabela 2: Esp		ae gas n		a comerc	ıalızaçac		
CARACTERÍSTICA	UNIDADE LIMITE				MÉTODO		
		Norte	Nordeste	Centro- Oeste, Sudeste e Sul	NBR	ASTM D	ISO
Poder calorífico superior	kJ/ m³	34.000 a 38.400	35.000 a 43.000		15213	3588	6976
	kWh/m³	9,47 a 10,67	9,72 a 11,94				
Índice de Wobbe	kJ/m³	40.500 a 45.000	46.500 a 53.500		15213		6976
Número de metano, mín.		anotar	65				15403
Metano, min.	% mol.	68	85		14903	1945	6974
Etano, máx.	% mol.	12	12		14903	1945	6974
Propano, máx.	% mol.	3	6		14903	1945	6974
Butanos e mais pesados, máx.	% mol.	1,5	3		14903	1945	6974
Oxigênio, máx.	% mol.	0,8	0,5		14903	1945	6974
Inertes (N2+CO2) máx.	% mol.	18	8	6	14903	1945	6974
CO2, máx.	% mol.	3		14903	1945	6974	
Enxofre Total, máx.	mg/m3	70			5504	6326-3	
Gás Sulfídrico (H2S), máx.	mg/m3	10	13	10		5504	6326-3
Ponto de orvalho de água a 1atm, máx.	°C	-39	-39	-45		5454	6327
							10101-2
							10101-3
							11541
Ponto de orvalho de hidrocarbonetos a 4,5 MPa, máx.	°C	15	15	0			6570
Mercúrio, máx.	μg/m³	anotar					6978-1
							6978-2

^{*} Os limites especificados são valores referidos a 293,15K (20°C) e 101,325kPa (1atm) em base seca, exceto os pontos de orvalho de hidrocarbonetos e de água. Além disso não deve conter traços visíveis de partículas sólidas ou líquidas.

Conforme visto na **Tabela 1** e na **Tabela 2**, nenhuma das composições típicas de GN bruto atende à especficação estipulada pela ANP. Portanto, para que o GN possa ser comercializado é necessário que o mesmo seja condicionado.

O condicionamento do gás natural inclui a remoção de contaminantes inorgânicos (CO₂, H₂S, H₂O) e o ajuste de Ponto de Orvalho de Hidrocarbonetos (HCDP) através da separação de suas frações condensáveis. Os próximos itens apresentam noções básicas de condicionamento de GN que inclui os processos de remoção dos principais contaminantes e o ajuste de HCDP através da separação das frações mais pesadas do gás. Como fonte adicional sobre estes tópicos, recomenda-se o livro *Natural Gas Processing Principles and Technology* - *Part II* (YOUNGER, 2004).

2.2 REMOÇÃO DE CONTAMINANTES PARA CONDICIONAMENTO DE GÁS NATURAL

Nesta fase do condicionamento de GN procura-se reduzir as concentrações de contaminantes até os limites aceitáveis de acordo com a especificação apresentada anteriormente. Em geral, os principais contaminantes que devem ser removidos são os gases ácidos CO₂ e H₂S e a água. Embora a remoção de contaminantes de GN não seja diretamente ligada ao foco central desta Dissertação, nos próximos itens serão apresentados alguns processos para desidratação e remoção de gases ácidos, em razão de que o separador 3S teoricamente também poderia ser utilizado para remoção de contaminantes, especialmente H₂O que é facilmente separada por congelamento através do resfriamento criado no 3S.

2.2.1 Processos de desidratação

Tendo em vista que o reservatório de gás apresenta três fluidos, petróleo, GN e água, o gás assim extraído do poço encontrar-se-á saturado em água. Para evitar que esta condição gere impactos como formação de hidratos e de soluções corrosivas com gases ácidos, é necessário extrair esta água. Aos processos de remoção de água do gás natural (ou do petróleo) dá-se o nome de processos de desidratação.

De acordo com o G.P.S.A (*Gas Processors Suppliers Association*), os principais métodos para desidratação se dividem entre as seguintes categorias (*Gas Processors Suppliers Association*, 2004):

- Absorção com dessecantes líquidos;
- Adsorção com dessecantes sólidos;
- Desidratação com CaCl₂;
- Desidratação por refrigeração;
- Desidratação por permeação em membranas;
- Desidratação por destilação;
- Desidratação à gás;

Um dos principais processos utilizados atualmente é o de absorção com glicol, que se baseia na absorção de água com dessecante líquido e posterior recuperação do mesmo. O artigo *Dehydration of Natural Gas using solid desiccants* (GANDHIDASAN, P. et al; 2000) apresenta um processo de desidratação por adsorção sobre dessecante sólido usando sílica gel que de acordo com o estudo poderia alcançar baixos valores de ponto de orvalho de água. No

entanto, tendo em vista que atualmente a maior parte das plantas de desidratação opera com dessecantes líquidos a base de glicol, esta revisão abordará em detalhes apenas este processo. No item 2.2.1.1 será apresentada uma breve descrição dos problemas causados pelos hidratos e as condições de formação dos mesmos. A descrição do processo de desidratação por absorção com glicol será apresentada no item 2.2.1.2.

2.2.1.1 Hidratos

Os sólidos conhecidos como hidratos são clatratos sólidos (SLOAN e KOH, 2008) formados quando água no estado sólido aprisiona moléculas de substâncias apolares de baixo peso molecular (CO₂, CH₄, C₂H₆, C₃H₈) que estejam originalmente na fase gasosa. Estes compostos apresentam-se sob a forma de cristais, de modo que o acúmulo destes em tubulações de processo pode levar a entupimento das mesmas gerando perdas de produção e condições inseguras de processo como visto na **Figura 2** (VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008). A formação de hidratos pode ocorrer em alta pressão parcial de espécies leves (CO₂, CH₄, C₂H₆) e em temperaturas baixas próximas ao ponto triplo da água (isto é, abaixo de 0°C e de 0°C a 15°C, ou até mesmo acima disto). Abaixo do ponto triplo da água, hidratos podem surgir em equilíbrio com gelo havendo então duas fases sólidas (SLOAN e KOH, 2008).

Em geral, por envolver solidificação, a formação de hidratos é favorecida por altas pressões e baixas temperaturas. Portanto, o escoamento de gás natural em linhas de *Gas-Lift*, em gasodutos submarinos ou em linhas de produção (todos com água do mar circundante na faixa de 1°C a 5°C) apresenta condições propícias para a formação de hidratos se houver presença de água na corrente de gás pressurizado.



Figura 2: Hidrato coletado durante abertura de recebedor de *pig* (Fonte: VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008)

2.2.1.2 Desidratação por adição de glicol

Os glicóis (ou dióis) são uma família de compostos orgânicos com dois grupos hidroxila. Estes compostos apresentam características que justificam sua aplicabilidade como dessecante, dentre as quais citam-se: solubilidade em água, grande capacidade higroscópica, baixa viscosidade e baixa volatilidade. Os principais glicóis utilizados neste processo são: monoetileno glicol (MEG), dietilenoglicol (DEG), trietileno glicol (TEG) e tetraetileno glicol (*Gas Processors Suppliers Association*, 2004). A **Figura 3** apresenta um fluxograma típico de desidratação de GN com glicol e posterior recuperação do mesmo.

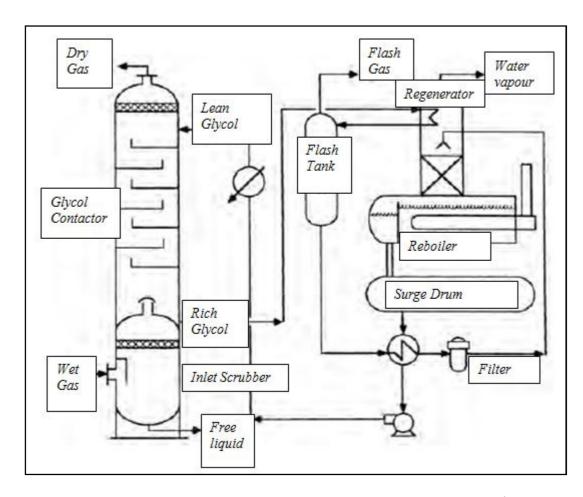


Figura 3: Fluxograma típico de um processo de desidratação com glicol (Fonte: GPSA 2004)

Neste fluxograma, o gás saturado em água (gás rico) é alimentado no vaso no fundo da coluna de absorção. Sua função é garantir que o gás alimentado à coluna esteja isento de líquido. O gás é alimentado a baixas temperaturas e altas pressões para favorecer a captura da água pelo glicol. Após o vaso, o gás rico segue para o fundo da coluna de absorção. O agente dessecante, isto é, a solução de glicol com baixo teor de água (glicol pobre) alimenta o topo da coluna em contracorrente com o gás. Os produtos da absorção são o gás seco (produto de topo) e o glicol rico (solução de glicol e água, produto de fundo). O glicol rico é então submetido à regeneração para remoção de água, operação também na **Figura 3**. A regeneração é favorecida por altas temperaturas e baixas pressões, sendo a redução de pressão necessária à regeneração realizada pela válvula de controle de nível da absorvedora. Após esta válvula, o glicol rico passa por uma serpentina no topo da regeneradora para pré-aquecimento, resfriando o vapor de saída desta regeneradora. O glicol rico é então alimentado a vaso de expansão para remoção de gás (liberado pela redução de pressão e aquecimento). O líquido de saída do vaso passa por mais um pré-aquecimento do glicol rico, neste caso para resfriar o glicol pobre que deixa a regeneração. Na regeneração, o glicol rico passa por filtração para

remoção de sólidos e contaminantes da degradação do glicol. O glicol filtrado é aspergido na torre de regeneração. Sua alimentação ocorre na seção de topo e a aspersão ocorre sobre o vapor deixando o recheio. Este contato promove a transferência de água para o vapor e de glicol para o líquido, tendo em vista a diferença de volatilidade entre estes. Esta transferência água-glicol entre fases líquida e vapor continuará por todo o recheio. No contato do vapor ascendente do recheio com a serpentina com líquido de entrada, o vapor de topo é condensado parcialmente, liberando essencialmente vapor d'água para a atmosfera. O calor necessário à regeneração é fornecido no refervedor de fundo. O produto de fundo glicol pobre segue para vaso acumulador antes de ser resfriado e bombeado à pressão da coluna absorvedora.

2.2.2 Processos de remoção de gases ácidos

Estes processos tratam da remoção de dióxido de carbono (CO₂) e ácido sulfídrico (H₂S). Citam-se abaixo alguns processos utilizados com este intuito (VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008):

- Processo de leito sólido;
- Peneiras moleculares;
- Processo Ryan Holmes;
- Permeação por membrana;
- Absorção com aminas.

Dos processos mencionados acima, o mais utilizado é o de absorção com aminas de acordo com os autores Vaz, Maia, dos Santos (VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008) e com o G.P.S.A (*Gas Processors Suppliers Association*, 2004). Este processo será apresentado no próximo item.

2.2.3 Absorção com Aminas

Consiste na absorção química das moléculas de H₂S e CO₂ por solvente fracamente alcalno que contém moléculas de amina com alta proporção molar de água (1:7 a 1:10). Posteriormente ocorre regeneração do solvente amina-água através de adição de calor e despressurização, que promovem o esgotamento do gás ácido absorvido. Este processo é governado pelas Eqs. (2.2) a (2.6) abaixo todas de natureza exotérmica (*Gas Processors Suppliers Association*, 2004; DE MEDEIROS et al., 2013):

Reações com ácido sulfídrico:

$$RNH_2 + H_2S \leftrightarrow RNH_3^+ + HS^-$$
 (Reação rápida) (2.2)

$$RNH_2 + HS^- \leftrightarrow RNH_3^+ + S^{--}$$
 (Reação rápida) (2.3)

Reações com dióxido de carbono:

$$2RNH_2 + CO_2 \leftrightarrow RNH_3^+ + RNHCOO^- (Reação rápida)$$
 (2.4)

$$RNH_2 + CO_2 + H_2O \leftrightarrow RNH_3^+ + HCO_3^- (Reação rápida)$$
 (2.5)

$$RNH_2 + HCO_3^- \leftrightarrow RNH_3^+ + CO_3^{--} (Reação rápida)$$
 (2.6)

A **Figura 4** apresenta um fluxograma típico deste processo. A carga rica em gases ácidos é alimentada em alta pressão a um vaso separador para garantir que o gás alimentado à coluna contactora esteja isento de líquido. Nesta coluna o gás é contactado com solução aquosa de aminas (amina pobre), alimentada no topo da coluna de absorção. Este processo baseia-se nas reações entre a amina e os gases ácidos nas Eqs. (2.2) a (2.6). A amina ao reagir com estes compostos produz íons que ficam solvatados por água na fase líquida estabilizando a absorção (DE MEDEIROS et al., 2013). Os dois produtos da etapa de absorção são: gás pobre em gases ácidos (gás doce) no topo da coluna e uma solução aquosa rica em gases ácidos (amina rica) no fundo da mesma.

Para regenerar a amina pobre é necessário fornecer calor, já que tendo em vista que a absorção ocorre com reações exotérmicas, a reversão destas reações ocorre na regeneração pela absorção de calor. Como esta reversão também é favorecida a baixas pressões, é necessário reduzir a pressão da amina rica e aumentar a temperatura da mesma. A pressão é reduzida por uma válvula de expansão logo após a saída da absorção sendo o solvente despressurizado enviado a um tanque de expansão para remoção de gases. Após o vaso de expansão, a amina rica é pré-aquecida antes de ser alimentada à regeneradora. Para recuperar calor, e aumentar a eficiência energética do sistema, a amina pobre da regeneradora aquece a amina rica em uma bateria de trocadores de calor. Após este pré-aquecimento a amina rica é enviada à coluna regeneradora.

Na coluna regeneradora estabelece-se um perfil de temperatura que promova uma separação gradual dos gases ácidos (produto de topo) da solução aquosa de amina (amina pobre, produto de fundo), para realizar a reversão da reação de absorção; isto é, o esgotamento dos gases ácidos. O perfil de temperatura é mantido pela utilização de um refervedor de fundo e de um condensador à água no topo. A solução de amina pobre e quente exportada pela regeneradora troca calor com a amina rica e é então pressurizada até a pressão de trabalho da coluna contactora (absorvedora).

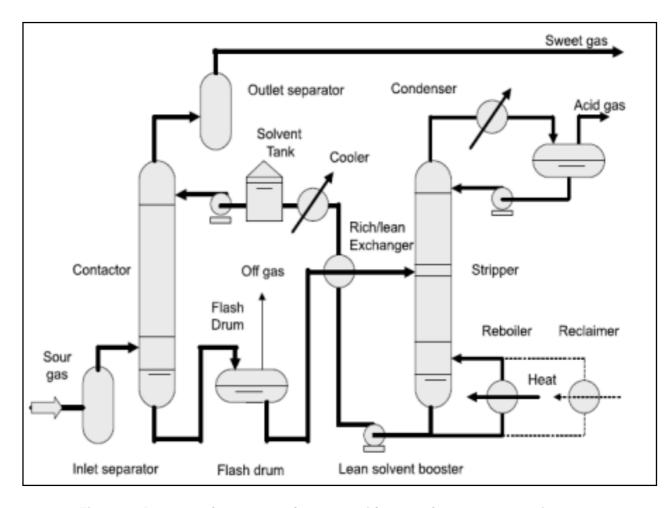


Figura 4: Processo de remoção de gases ácidos por absorção com aminas (Fonte: GPSA 2004)

2.3 AJUSTE DE PONTO DE ORVALHO DE HIDROCARBONETOS (HCDP) PARA CONDICIONAMENTO DE GÁS NATURAL

Após a remoção de contaminantes inorgânicos, o condicionamento do GN exige agora o enquadramento do ponto de orvalho de hidrocarbonetos (HCDP) o que significa adequá-lo aos teores limites de hidrocarbonetos condensáveis. Tendo em vista que o objetivo desta etapa é a remoção da fração mais pesada do GN, é necessário que esta seja convertida em produtos de interesse econômico. Seguem abaixo os principais produtos que podem ser obtidos no ajuste de HCDP para condicionamento do GN.

- GN, conforme especificado pela ANP. (basicamente composto por metano e um baixo teor de etano, utilizado como combustível);
- Etano (utilizado como matéria-prima na indústria petroquímica);
- Propano (também utilizado como matéria-prima petroquímica);
- GLP (basicamente composto por butanos, utilizado como combustível);
- Gasolina natural (composta por hidrocarbonetos com mais de cinco carbonos, utilizada como matéria prima para a produção de gasolina veicular).

Foram encontrados estudos que abordam inovações no condicionamento HCDP e processamento de gás natural, bem como otimizações nas versões tradicionais destes processos (GHORBANI et al; 2012a; MEHRPOOYA, VATANI, Ali MOUSAVIAN; 2010; GHORBANI et al; 2012b; CHEBBI et al; 2010; MEHRPOOYA, GHARAGHEIZI, VATANI; 2006; FOGLIETTA; 2012) Serão abordados agora os principais processos utilizados para promover o ajuste HCDP do gás natural gerando seus principais subprodutos líquidos.

2.3.1 Processo Joule-Thomson (JT)

A **Figura 5** apresenta o processo Joule-Thomson (JT), conforme exemplificado no livro Tecnologia da Indústria do Gás Natural (VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008). Conforme visto na **Figura 5** trata-se de um processo simples, que necessita de poucos equipamentos. Este processo baseia-se no efeito Joule-Thomson, ou seja, o efeito de variação de temperatura de um fluido por redução de pressão sob entalpia constante. O projeto do processo JT inclui descobrir através do ELV isentálpico do gás de carga, em qual pressão final (P_F) e correspondente temperatura isentálpica (T_F) a fase gás resultante atenderia à especificação da ANP, no que se refere à quantidade de hidrocarbonetos pesados, havendo a consequente retirada destas espécies no condensado depositado no fundo do separador JT. A partir destas

informações é necessário verificar de qual condição inicial de pressão e temperatura (P_1 e T_1) ocorreria a expansão em válvula isentálpica do gás até a condição desejada (P_F e T_F). O processo JT utiliza o mesmo princípio da Tecnologia Linde para liquefação de gases.

A primeira etapa JT consiste em comprimir o GN isento de líquido e de água até P₁ em um compressor adiabático. Em seguida a temperatura do gás é reduzida até T₁ em uma bateria de trocadoes de calor utilizando água de resfriamento e os produtos frios obtidos no separador JT. Estando o gás em P₁ e T₁ o mesmo é expandido em uma válvula isentálpica para fornecer a redução de pressão necessária para alcançar P_F e T_F. Em seguida, realiza-se a separação de fases para obter GN especificado pelo ajuste HCDP e uma corrente líquida de alto valor comercial, contendo as frações pesadas, conhecida como líquido de gás natural (LGN).

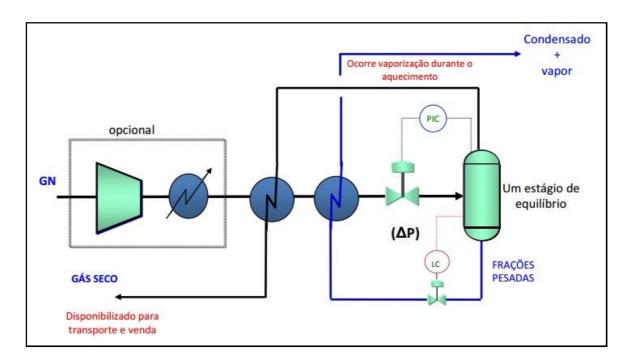


Figura 5: Processo Joule-Thomson (Fonte: VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008)

Seguem as principais características do processo JT (VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008).

- Expansão aproximadamente isentálpica, mas muito irreversível, desperdiçando possível aproveitamento de energia mecânica do gás pressurizado;
- Baixa eficiência de separação, pois o processo envolve apenas um estágio de equilíbrio no separador JT;

- Baixo investimento, por utilizar uma quantidade pequena de equipamentos, o
 investimento inicial e os gastos com operação e manutenção do mesmo são
 relativamente baixos. Além disso, caso não seja necessária uma etapa de
 compressão inicial este processo não utilizará nenhum equipamento rotativo,
 reduzindo ainda mais os custos de investimento, operação e manutenção.
- Tratamento ineficiente da fase líquida: Excetuando-se o próprio GN, os outros
 derivados (etano e propano petroquímicos, GLP e gasolina natural) que se
 encontram na fase condensada no vaso separador, são exportados misturados. O
 processo JT somente, não é capaz de fracionar este líquido.

2.3.2 Processo de Turbo-Expansão (TE)

A **Figura 6** apresenta o processo de Turbo-Expansão (TE) integrado a um trem de fracionamento de LGN e a uma coluna desmetanizadora (*demethanizer*) para maior eficiência de retenção de líquidos. Conforme pode ser visto, trata-se de um processo com grau de complexidade muito superior ao anterior.

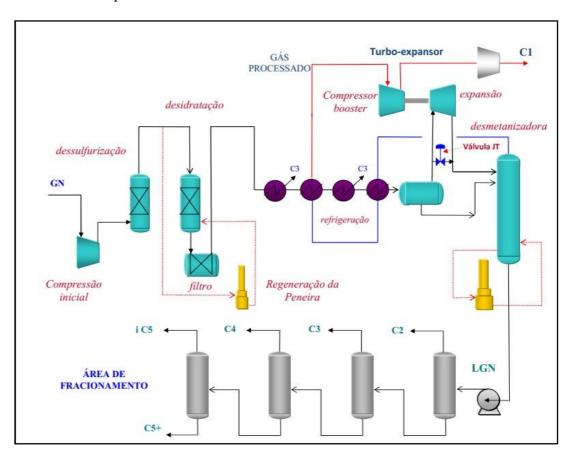


Figura 6: Processo de turbo-expansão para ajuste HCDP (Fonte: VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008)

O ponto crucial do processo TE é que o resfriamento do gás é alcançado pela expansão em uma turbina adiabática integrada no turbo-compressor para recomprimir o GN condicionado de volta aos níveis de alta pressão de origem. A expansão na turbina ao produzir potência mecânica também produz maior nível de resfriamento que a tecnologia JT. Como o dispositivo de turbo-expansão é extremamente caro e de alto desempenho, a tecnologia TE opta por incluir um completo sistema de separação sob a forma de várias colunas de destilação de modo a fracionar os vários produtos de interesse. A principal coluna envolvida é a desmetanizadora que opera a alta pressão (20 a 23 bar) e que apresenta temperaturas criogênicas no topo rico em CH₄ (≈ -100°C). As demais colunas operam em temperaturas gradativamente mais altas e pressões gradativamente mais baixas, estando as últimas colunas pouco acima da condição atmosférica. Os autores Vaz, Maia e dos Santos (2008) citam a etapa TE como sendo isentrópica, porém, o GPSA a considera apenas próximo à condição isentrópica (*Gas Processors Suppliers Association*, 2004), tendo em vista que a expansão em turbina envolveria atrito do gás com os internos da mesma (além de atrito entre as partes móveis da própria turbina), a abordagem próxima ao caso isentrópico é mais realista.

Na Figura 6, o GN já separado de sua fase líquida e da água livre passa por uma compressão inicial. O objetivo desta compressão é garantir a pressão de entrada alta suficiente para que a expansão na turbina atinja a relativamente alta pressão da coluna desmetanizadora (20 a 23 bar), criando temperaturas criogênicas (≈ -100°C) capazes de especificar o GN de topo da desmetanizadora com praticamente CH₄ acima de 96%. Após a compressão inicial, o gás passa por uma etapa de dessulfurização, para remover compostos que possam ocasionar corrosão. O gás segue então para uma nova etapa de desidratação, pois o processo TE lida com temperaturas extremamente baixas e portanto há risco de formação de hidratos nas baixíssimas temperaturas da coluna desmetanizadora.

Em seguida, o gás passa por uma bateria de trocadores de calor para resfriá-lo com o GN frio do topo da desmetanizadora e com propano refrigerante proveniente de ciclo de refrigeração a propano não mostrado. Esta etapa aumentará o resfriamento na turbina, favorecendo liquefação dos condensáveis e do próprio CH₄, pois reduzirá a temperatura do gás de entrada. Após passar pelos trocadores o gás é enviado a um vaso para separação das fases líquida e gás. A fase gás é expandida na citada turbina para alcançar temperatura suficientemente baixa para criar refluxo de topo da desmetanizadora. Esta expansão também fornece trabalho para acionar o compressor integrado cujo papel é reconduzir o GN

especificado à parte da pressão de transporte. A fase líquida do vaso separador é alimentada à desmetanizadora assim como a mistura bifásica proveniente da expansão na turbina.

Com a baixa temperatura obtida, a desmetanizadora produz GN altamente especificado (saída de topo) e LGN (saída de fundo) com praticamente todos os condensáveis, incluindo boa parte do C₂H₆ original. O GN é comprimido inicialmente pelo trabalho obtido na etapa de expansão e em seguida é comprimido no compressor de exportação até a pressão necessária para o transporte. O LGN é fracionado em outros derivados (etano, GLP e gasolina natural). Seguem abaixo as principais características deste processo (VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008).

- Expansão quase isentrópica na turbina;
- Alta eficiência: como este processo envolve múltiplos estágios de separação (torre desmetanizadora), o teor de hidrocarbonetos pesados é muito menor do que no processo anterior, seguindo o gás produzido com teor de CH₄ acima de 96%;
- Alto investimento: por utilizar uma grande quantidade de equipamentos, o investimento inicial e os gastos com manutenção do mesmo são relativamente altos, principalmente por utilizar vários equipamentos rotativos;
- Fracionamento dos produtos líquidos: o LGN produzido é fracionado no trem de destilação mostrado, com pressões gradualmente mais baixas, para obter os demais derivados do GN tais como etano petroquímico, C3 petroquímico, GLP (C4) e gasolina natural (C5⁺).

2.3.3 Processo de Absorção Refrigerada (AR)

Α

Figura 7 apresenta o processo de Absorção Refrigerada (AR) para ajuste HCDP via remoção de C2⁺ por absorção refrigerada.

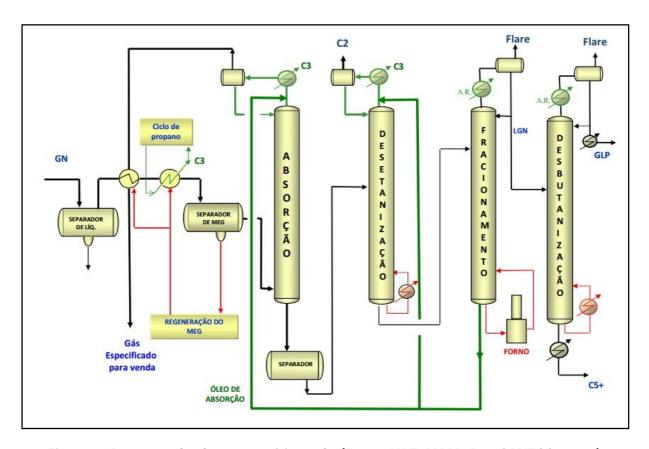


Figura 7: Processo de absorção refrigerada (Fonte: VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008)

O ponto crucial do processo AR é a utilização de um óleo constituído por hidrocarbonetos pesados (obtido durante o próprio processo) para absorção dos compostos C2⁺ do GN. Tendo em vista que a absorção é um processo exotérmico, este processo é projetado de forma que a coluna de absorção opere a uma temperatura tal que apenas o metano e uma fração pequena de etano não sejam absorvidos pelo óleo. O GN é alimentado a um separador trifásico para separação de condensado e de água livre. Em seguida o gás obtido é resfriado em trocadores de calor que utilizam o gás especificado saído da absorvedora (integração energética) e propano (ciclo de refrigeração a propano). Para evitar a formação de hidratos devido às baixas temperaturas alcançadas neste processo, o GN deve ser desidratado. Esta desidratação é realizada pela adição de MEG ao gás nos trocadores de calor. A solução de MEG e água é removida em um separador trifásico, e então encaminhada para uma etapa

de regeneração para reaproveitamento do MEG. Após a desidratação o gás é alimentado à coluna de absorção pelo fundo da mesma, onde escoa em contra-corrente com o óleo de absorção que é alimentado pelo topo. Através do contato entre estes dois fluidos, os componentes menos voláteis do gás são absorvidos no óleo. São obtidos dois produtos nesta etapa: GN especificado e o produto de fundo. O GN especificado é então utilizado para préresfriar o gás que sai do separador trifásico. O objetivo desta integração energética é diminuir a quantidade de propano necessária para resfriar o gás e com isso diminuir a capacidade necessária no ciclo de refrigeração.

No produto de fundo estão presentes os outros derivados do gás, etano, GLP (C3+C4) e condensado de gás natural (C5+). Para obtenção destes produtos é necessário que este fluido passe por sucessivas etapas de destilação (desetanização, fracionamento e desbutanização). Para melhorar a eficiência destas etapas e reduzir a carga térmica envolvida, é necessário que cada coluna opere com pressão inferior à coluna anterior.

Para melhorar a eficiência da coluna desetanizadora, a mesma é também alimentada com óleo de absorção pobre com o objetivo de manter componentes C3⁺ retidos na fase líquida, enquanto C2 é destilado no topo. Esta coluna produz os seguintes fluidos: etano petroquímico (topo) e um produto de fundo rico em óleo de absorção que será enviado à próxima coluna para regenerar o óleo de absorção. O produto de fundo da desetanizadora é alimentado em uma coluna fracionadora para obter LGN e regenerar o óleo de absorção no fundo. O LGN é enviado para a próxima etapa de fracionamento enquanto o óleo de absorção pobre regressa à absorvedora. O LGN é fracionado em uma desbutanizadora, onde se obtém GLP e C5⁺. Seguem abaixo as principais características do processo AR (VAZ, MAIA, Dos SANTOS, 2008).

- Processo físico e exotérmico: não há absorção química (como na remoção de gases ácidos com aminas), i.e. não há reação química entre o solvente e solutos;
- Utilização de óleo absorvente (fluido este obtido durante o próprio processo);
- Alto investimento: por utilizar uma grande quantidade de equipamentos, o investimento inicial e os custos de operação e de manutenção são altos;
- Tratamento eficiente da fase líquida: o processo já fraciona o condensado nos derivados do GN.

2.4 ESCOAMENTO COMPRESSÍVEL 1D (EC-1D)

Esta Dissertação aborda a modelagem e análise de separador supersônico (3S) para condicionamento de gás natural. Tal equipamento evidentemente deve suas características operacionais a efeitos termodinâmicos expressivos que ocorrem sob escoamento compressível supersônico (*Ma* > *I*) em uma tubeira convergente-divergente (TCD). Desta forma seria impróprio não haver nesta Revisão Bibliográfica material clássico em Escoamento Compressível 1D ou EC-1D. As fontes habituais para esta revisão são em grande maioria os livros textos clássicos sobre escoamento compressível em tubeiras e bocais (ANDERSON, 1990; FOX, MCDONALD e PRITCHARD, 2006; OOSTHUIZEN e CARSCALLEN, 1997). O cenário EC-1D é dominante nestas fontes quando o assunto é EC e deve ser o foco no presente trabalho devido à característica geométrica de diâmetro delgado e comprimento alongado do 3S genérico na **Figura 8** (ALFYOROV et al., 2005). Em suma, tanto a bibliografia clássica quanto as necessidades da Dissertação trazem a noção de que o escoamento em análise deva ser abordado como Escoamento Compressível Unidimensional Axial (EC-1D).

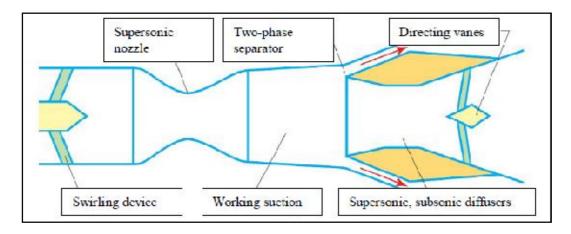


Figura 8: Separador supersônico 3S genérico

Certamente é possível apontar-se que no 3S o escoamento não é 1D posto que há um conjunto de aletas (*vanes*) posicionadas na parte dianteira do 3S cujo papel é impor forte rotação ao fluido (*swirling*) com valor de RPM na casa de 4 ou 5 dígitos de modo a criar um intenso campo centrífugo atuante em toda a extensão do 3S. Este campo centrífugo é essencial à operação, pois é ele que viabiliza que quaisquer materiais de densidade superior à do gás – como condensados e sólidos – que venham a ser formados após a tubeira supersônica (*supersonic nozzle*) sejam coletados pelas fendas nas saídas laterais traseiras do 3S deixando o gás seco e especificado na região central do escoamento. Todavia, como já mencionado

acima, a abordagem 1D é geral na bibliografia clássica de escoamento em tubeiras e afins e, além do mais, o efeito termodinâmico principal responsável pelo resfriamento, criador da mudança de fase, ocorre pela aceleração axial do escoamento, ficando o efeito rotativo (*swirling*) apenas como um coadjuvante para permitir a coleta centrifugada de condensado e sólidos.

Por conseguinte, esta Dissertação aborda a teoria básica do escoamento 3S somente como Escoamento Compressível Unidimensional Axial (EC-1D). A abordagem EC-1D também será usada na implementação do algoritmo de resolução 3S no Cap. 4.

EC-1D é coberto em livros textos clássicos normalmente direcionados a engenheiros mecânicos e aeronáuticos (ANDERSON, 1990; FOX, MCDONALD e PRITCHARD, 2006; OOSTHUIZEN e CARSCALLEN, 1997). Todavia estes textos "pecam" em certo grau ao centralizarem suas análises no Gás Ideal (GI) somente. O GI pode ser adequado para aviões, mísseis e motores a jato, mas é francamente insuficiente para sistemas EC-1D com alta pressão, alta densidade e mudança de fase vapor-líquido.

Ora, como o presente estudo é sediado em análise de separador 3S para condicionamento de GN, uma operação unitária muito específica no contexto de alta pressão, alta densidade e baixa temperatura, na qual ocorre condensação e/ou congelamento parcial de espécies sob ELV e ESLV, é justo esperar que o material de EC-1D dos livros clássicos acima seja algo insuficiente. Por esta razão, embora a apresentação a seguir sobre EC-1D inexoravelmente tenha se originado em tais fontes (ANDERSON, 1990; FOX, MCDONALD e PRITCHARD, 2006; OOSTHUIZEN e CARSCALLEN, 1997), ela será aqui mais abrangente e terá resultados especificamente desenvolvidos nesta Dissertação.

Em primeiro lugar a apresentação desta revisão procurará impor um viés mais apropriado ao EC-1D em altas pressão e densidade, situação esta que pressupõe a disponibilidade de uma Equação de Estado (EOS) para alta pressão, com ou sem ELV, sob uma das duas formas EOS nas Eqs. (2.7a) e (2.7b).

$$P = P(\theta, \rho, \underline{Y}) \tag{2.7a}$$

$$\rho = \rho(\theta, P, Y) \tag{2.7b}$$

Em segundo lugar, esta revisão em EC-1D também completará o enfoque com GI que, apesar de central nas fontes clássicas citadas, também é deixado com incompletudes nas mesmas fontes. A abordagem completa com GI aqui conduzida é importante porque introduz fenomenologia de fácil manipulação que é útil, pelo menos qualitativamente, na engenharia

do 3S. O Leitor é avisado que o contexto GI somente será abordado em pontos específicos desta revisão e sempre com as propriedades assinaladas com marcadores usuais como "acentos".

Voltando ao contexto do EC-1D para fluidos reais, na prática o formato na Eq. (2.7a) é mais comum (e.g., PR-EOS, SRK-EOS) para gás natural. Este formato será, de fato, utilizado no algoritmo de resolução 3S do Cap. 4. Mas o formato na Eq. (2.7b) é mais intuitivo para descrever analiticamente propriedades termodinâmicas dependentes do estado $(\theta, P, \underline{Y})$. Além disto, Eq. (2.7b) é equivalente à Eq. (2.7a) e é, de fato, numericamente gerada a partir da forma (2.7a), em simuladores profissionais de processos também usados na Dissertação.

Portanto, será usada a Eq. (2.7b) no desenvolvimento do referencial teórico a seguir por facilitar a apresentação do texto. Mas o Leitor deve ter claro que todos os cálculos rigorosos executados no Cap. 4 fizeram uso da forma (2.7a) com PR-EOS. Há propriedades termodinâmicas derivadas da EOS na Eq. (2.7b) que serão usadas extensivamente: são elas as derivadas parciais da densidade com temperatura e pressão nas Eqs. (2.8a) e (2.8b):

$$\Xi_{\theta} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial \theta}\right)_{P,Y} \tag{2.8a}$$

$$\Xi_{P} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{\theta, Y} \tag{2.8b}$$

Quando a abordagem dirigir-se ao Gás Ideal (GI), a Eq. (2.7b) deverá ser substituída pela EOS-GI na Eq. (2.9a). Na EOS-GI é visto que a massa molar é o único termo dependente da composição do gás ($M_M(\underline{Y})$). Os análogos das Eqs. (2.8a) e (2.8b) para GI estão nas Eqs. (2.9b) e (2.9c). Para clareza, propriedades de GI são sempre assinaladas com o "acento" mostrado. Na ausência destes "acentos" deve ser entendido que o contexto trata de um fluido real.

$$\rho' = \frac{P.M_M(\underline{Y})}{R.\theta} \tag{2.9a}$$

$$\Xi_{\theta}' = \left(\frac{\partial \rho'}{\partial \theta}\right)_{P,Y} = -\frac{\rho'}{\theta} \tag{2.9b}$$

$$\Xi_P' = \left(\frac{\partial \rho'}{\partial P}\right)_{\theta,Y} = \frac{\rho'}{P}$$
 (2.9c)

2.4.1 Balanços de Massa, Momentum e Energia para EC-1D Transiente

Considera-se inicialmente o escoamento EC-1D em regime transiente esquematizado na **Figura 9** onde os vários símbolos são definidos na Nomenclatura apresentada nas páginas iniciais. A **Figura 9** identifica como variáveis independentes do escoamento o tempo e a posição axial no duto (t,x). A **Figura 9** também mostra um volume de controle elementar Δx no duto cuja área de seção (A(x)) e diâmetro (d(x)) poderão variar com a posição axial x. O duto tem seu eixo com inclinação α que também poderá variar com x. O fluido em escoamento tem composição constante (\underline{Y}) em equilíbrio. Em contexto EC-1D a velocidade é uniforme na seção de escoamento, mas poderá variar localmente no tempo e axialmente devido à compressibilidade do fluido e às variações de pressão, temperatura e da seção de escoamento com a posição axial x.

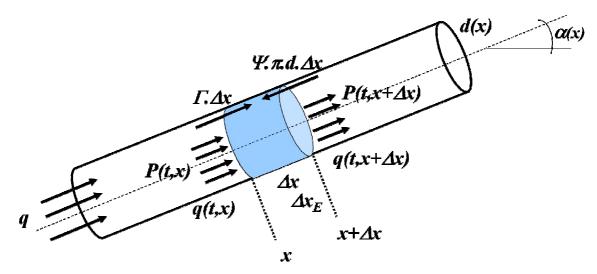


Figura 9: Escoamento EC-1D através de Volume de Controle elementar em um duto de diâmetro variável (d(x)) e inclinação $\alpha(x)$ também variável com a posição axial

Os balanços de massa, momentum e de energia no elemento Δx da **Figura 9** seguem nas Eqs. (2.10a), (2.10b) e (2.10c) no instante t a partir de propriedades do fluido e propriedades do escoamento como densidade (ρ) , velocidade $(q/(\rho.A(x)))$, energia interna molar (\overline{U}) , entalpia molar (\overline{H}) e tensão cizalhante na parede (Ψ) . Todos os termos e variáveis são expressos no SI. As propriedades termodinâmicas do fluido dependem da composição constante \underline{Y} e das variáveis dependentes (θ, P) do escoamento que, por sua vez, respondem às variáveis independentes (t,x). A terceira variável dependente do escoamento é a vazão mássica q (em kg/s). Esta é também mais uma diferença para as fontes bibliográficas clássicas em Mecânica de Fluidos que preferem a velocidade do escoamento v como variável

dependente. Na presente abordagem a velocidade será extraída da solução através da propriedade densidade via fórmulas como $v = q / (\rho . A(x))$.

$$A(x).\Delta x.\frac{\partial \rho}{\partial t} = q(t,x) - q(t,x + \Delta x)$$
(2.10a)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{q}{\rho . A} . \rho . A . \Delta x \right) = P(t, x) . A(x) - P(t, x + \Delta x) . A(x + \Delta x) + \Gamma . \Delta x
+ \left(\frac{q^2}{\rho . A} \right)_x - \left(\frac{q^2}{\rho . A} \right)_{x + \Delta x} - A(x) . \Delta x . \rho . g . sen(\alpha) - \Psi . \pi . d(x) . \Delta x$$
(2.10b)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho.A.\Delta x.\overline{U}}{M_M} \right) = \left(\frac{q}{M_M} \left(\overline{H} + \frac{M_M}{2} \left(\frac{q}{\rho.A} \right)^2 + M_M.g.h \right) \right)_x$$

$$- \left(\frac{q}{M_M} \left(\overline{H} + \frac{M_M}{2} \left(\frac{q}{\rho.A} \right)^2 + M_M.g.h \right) \right)_{x+\Delta x}$$

$$+ \Omega(x).\pi.d(x).\Delta x.(\theta_E - \theta)$$
(2.10c)

Um termo que não deve ser esquecido no balanço de momentum Eq. (2.10b) diz respeito à força de reação da parede $\Gamma.\Delta x$ sobre o elemento de fluido Δx na **Figura 9** devido à expansão (ou contração) da seção de escoamento do duto. Esta força de reação, dada na Eq. (2.10d), é proporcional à pressão média na parede do elemento Δx e à variação da área (dA) de seção de escoamento no elemento Δx (FOX, MCDONALD e PRITCHARD, 2006). No limite $\Delta x \to 0$ a razão $\Gamma.\Delta x/\Delta x$ é dada pela Eq. (2.10e) onde derivada ordinária é usada nos termos que não dependem do tempo. O termo de reação $\Gamma.\Delta x$ é tal que:

- Se o elemento Δx tem área de seção de escoamento constante, $\Gamma \cdot \Delta x = 0$;
- Se o elemento Δx contrai a seção de escoamento, $\Gamma \Delta x < 0$; i.e. a força $\Gamma \Delta x$ opõe-se ao escoamento;
- Se o elemento Δx expande a seção de escoamento, $\Gamma \Delta x > 0$; i.e. a força $\Gamma \Delta x$ favorece o escoamento.

$$\Gamma \cdot \Delta x = \frac{P(t, x) + P(t, x + \Delta x)}{2} \cdot \frac{dA}{dx} \cdot \Delta x \tag{2.10d}$$

$$\lim \frac{\Gamma \cdot \Delta x}{\Delta x} = \lim \frac{P(t, x) + P(t, x + \Delta x)}{2} \cdot \frac{dA}{dx} = P(t, x) \cdot \frac{dA}{dx}$$

$$\Delta x \to 0 \qquad \Delta x \to 0$$
(2.10e)

Dividindo-se Eqs. (2.10a), (2.10b) e (2.10c) por Δx , e tomando-se $\Delta x \rightarrow 0$, têm-se as equações de balanços contínuos de massa, momentum e energia do escoamento EC-1D apresentadas nas Eqs. (2.11a), (2.11b) e (2.11c) onde derivada ordinária é usada nos termos distribuídos que são independentes do tempo.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{A(x)} \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right) \tag{2.11a}$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -\left(\frac{\partial P.A(x)}{\partial x}\right) + P\frac{dA}{dx} - \left(\frac{\partial (q^2/\rho.A(x))}{\partial x}\right) - A(x).\rho.g.sen(\alpha) - \Psi.\pi.d(x)$$
 (2.11b)

$$\frac{\partial(\rho.\overline{U})}{\partial t} = -\frac{1}{A(x)} \frac{\partial}{\partial x} \left(q \left(\overline{H} + \frac{M_M}{2} \left(\frac{q}{\rho.A} \right)^2 + M_M.g.h \right) \right) + \frac{\Omega(x).\pi.d(x).M_M(\theta_E - \theta)}{A(x)}$$
(2.11c)

As Eqs. (2.11a), (2.11b) e (2.11c) estão corretas no contexto EC-1D, mas devem ser expressas em termos das variáveis dependentes do escoamento que são (*q*, *P*, *T*), sendo a composição suposta constante. Para isto, primeiramente as Eqs. (2.11a), (2.11b) e (2.11c) são colocadas sob a forma das Eqs. (2.12a), (2.12b) e (2.12c).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{A(x)} \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right) \tag{2.12a}$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -A(x)\frac{\partial P}{\partial x} - \frac{2q}{\rho A}\frac{\partial q}{\partial x} + \frac{q^2}{\rho^2 A}\frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{q^2}{\rho A^2}\frac{dA}{dx} - A(x).\rho.g.sen(\alpha) - \Psi.\pi.d(x)$$
 (2.12b)

$$\rho \frac{\partial \overline{U}}{\partial t} = -\frac{M_{M}}{A(x)} \left(\frac{P}{\rho} + \frac{1}{2} \left(\frac{q}{\rho . A} \right)^{2} + g . h \right) \frac{\partial q}{\partial x}$$

$$-\frac{q}{A(x)} \left(\frac{\partial \overline{H}}{\partial x} + M_{M} \left(\frac{q}{\rho A} \right)^{2} \left(\frac{1}{q} \frac{\partial q}{\partial x} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{1}{A} \frac{dA}{dx} \right) + M_{M} . g . sen(\alpha) \right)$$

$$+ \frac{\Omega(x) . \pi . d(x) . M_{M}(\theta_{E} - \theta)}{A(x)}$$
(2.12c)

Em seguida os gradientes das propriedades termodinâmicas $(\rho, \overline{H}, \overline{U})$ devem ser expressos sob composição \underline{Y} constante em termos de (θ, P) através de várias identidades termodinâmicas mostradas nas Eqs. (2.13a), (2.13b) e (2.13c) seguintes que também usam a Eq. (2.12a).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \Xi_{\theta} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right) + \Xi_{P} \left(\frac{\partial P}{\partial t} \right)
\frac{\partial \rho}{\partial x} = \Xi_{\theta} \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + \Xi_{P} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right)
\frac{\partial \overline{H}}{\partial t} = \overline{C}_{P} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial \overline{H}}{\partial P} \right)_{\theta, Y} \left(\frac{\partial P}{\partial t} \right) \Rightarrow \frac{\partial \overline{H}}{\partial t} = \overline{C}_{P} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right) + \frac{M_{M}}{\rho} \left(1 + \frac{\theta \cdot \Xi_{\theta}}{\rho} \right) \frac{\partial P}{\partial t}
\frac{\partial \overline{H}}{\partial x} = \overline{C}_{P} \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial \overline{H}}{\partial P} \right)_{\theta, Y} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right) \Rightarrow \frac{\partial \overline{H}}{\partial x} = \overline{C}_{P} \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + \frac{M_{M}}{\rho} \left(1 + \frac{\theta \cdot \Xi_{\theta}}{\rho} \right) \frac{\partial P}{\partial x}$$
(2.13a)

$$\overline{U} = \overline{H} - P\overline{V} = \overline{H} - PM_{M} / \rho$$

$$\frac{\partial \overline{U}}{\partial t} = \left(\frac{\partial \overline{H}}{\partial t}\right) - \frac{M_{M}}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial t}\right) + \frac{P.M_{M}}{\rho^{2}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)$$

$$\rho \frac{\partial \overline{U}}{\partial t} = \rho \left(\frac{\partial \overline{H}}{\partial t}\right) - M_{M} \left(\frac{\partial P}{\partial t}\right) + \frac{P.M_{M}}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)$$
(2.13b)

$$\rho \frac{\partial \overline{U}}{\partial t} = \rho . \overline{C}_P \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right) + M_M \left(\frac{\theta \Xi_{\theta}}{\rho} \right) \frac{\partial P}{\partial t} - \frac{P.M_M}{\rho . A} \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right)$$
(2.13c)

Isto dará origem às Eqs. (2.14a), (2.14b) e (2.14c) para os balanços de massa, momentum e energia do problema EC-1D transiente:

$$\Xi_{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \Xi_{P} \frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{1}{A(x)} \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right) \tag{2.14a}$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = A(x) \left(\left(\frac{q}{\rho A} \right)^{2} \Xi_{P} - I \right) \frac{\partial P}{\partial x} + A(x) \left(\left(\frac{q}{\rho A} \right)^{2} \Xi_{\theta} \right) \frac{\partial \theta}{\partial x} - \left(\frac{2q}{\rho A} \right) \frac{\partial q}{\partial x} + \left(\frac{q^{2}}{\rho A^{2}} \right) \frac{dA}{dx} - A(x) \cdot \rho \cdot g \cdot sen(\alpha) - \Psi \cdot \pi \cdot d(x)$$
(2.14b)

$$\frac{\rho \overline{C}_{P}}{M_{M}} \frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\theta \Xi_{\theta}}{\rho} \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{q}{\rho A} \left(\Xi_{P} \left(\frac{q}{\rho A} \right)^{2} - I - \frac{\theta \Xi_{\theta}}{\rho} \right) \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{q}{\rho A} \left(\Xi_{\theta} \left(\frac{q}{\rho A} \right)^{2} - \frac{\rho \overline{C}_{P}}{M_{M}} \right) \frac{\partial \theta}{\partial x} - \frac{1}{A(x)} \left(\frac{3}{2} \left(\frac{q}{\rho A} \right)^{2} + g.h \right) \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{q}{A(x)} \left(\frac{q}{\rho A} \right)^{2} \frac{1}{A} \frac{dA}{dx} - \frac{q}{A(x)} g.sen(\alpha) + \frac{\Omega(x) \pi.d(x).(\theta_{E} - \theta)}{A(x)}$$
(2.14c)

Nas Eqs. (2.14a), (2.14b) e (2.14c) o termo de tensão de cizalhamento na parede do duto é primeiramente descrito no contexto do elemento de volume Δx através do Fator de Atrito de Darcy (ou Fator de Atrito de Moody) escrito, por sua vez, em termos do Número de Reynolds

e da rugosidade relativa de parede (FOX, MCDONALD e PRITCHARD, 2006) como mostrado na Eq. (2.15a). Em seguida, este termo é colocado na forma da Eq. (2.15b) para uso nas Eqs. (2.14b) e (2.14c).

$$\frac{\Psi.\pi.d.\Delta x}{\rho.A} = \frac{f(Re,\varepsilon/d)}{2} \left(\frac{\Delta x + \Delta x_E}{d}\right) \cdot \frac{q}{\rho.A} \cdot \frac{q}{\rho.A}$$
(2.15a)

$$\Psi.\pi.d = \frac{f(Re,\varepsilon/d)}{2} \cdot \left(1 + \frac{L_E}{L}\right) \frac{q|q|}{\rho.d.A}$$
 (2.15b)

O termo de cizalhamento aqui apresentado nas Eqs. (2.15) leva em conta as contribuições de atrito na parede de duto e aqueles associados a possíveis acidentes (válvulas, manômetros, curvas, uniões, tês, etc) existentes na linha. Para isto L_E/L na Eq. (2.15b) expressa a razão de comprimento equivalente de tubo gerado por acidentes existentes *por unidade de comprimento do duto*. O coeficiente L_E/L na Eq. (2.15b) expressa a ideia de que tais acidentes estejam aproximadamente uniformemente distribuídos na linha. Por exemplo, um valor $L_E/L=0.1$ informa haver, em média, 10m de comprimento equivalente devido a acidentes a cada 100m de duto.

Ainda com respeito à Eq. (2.15b), embora também não habitual nas fontes bibliográficas clássicas, o produto q/q traduz o fato de que a força de atrito devido ao cizalhamento na parede deve mudar de sentido se o escoamento também assim o fizer com q<0, já que o eixo da variável independente x está alinhado com o sentido considerado "positivo", em termos vetoriais.

2.4.2 Equações de Escoamento EC-1D em Regime Estacionário: EC-1D-E

As Eqs. (2.14a), (2.14b) e (2.14c) podem ser colocadas nas suas versões estacionárias o que define o Escoamento Compressível 1-D em Regime Estacionário (EC-1D-E). Para isto aplica-se invariância no tempo das variáveis dependentes, a saber $\frac{\partial \theta}{\partial t} = 0$, $\frac{\partial P}{\partial t} = 0$, $\frac{\partial q}{\partial t} = 0$. Isto trará imediatamente pela Eq. (2.14a) que $\frac{\partial q}{\partial x} = \frac{dq}{dx} = 0$, ou seja q é constante no tempo e ao longo do duto em EC-1D-E. Esta é a principal vantagem de se usar q como variável dependente do escoamento (ao invés de v), a saber, sob regime estacionário q é um invariante do escoamento. Portanto, têm-se os balanços de massa, momentum e energia do problema EC-1D-E dados pelas Eqs. (2.15a), (2.15b) e (2.15c) diretamente derivadas das Eqs. (2.14a), (2.14b) e (2.14c) pela aplicação das condições $\frac{\partial \theta}{\partial t} = 0$, $\frac{\partial P}{\partial t} = 0$, $\frac{\partial q}{\partial t} = 0$.

$$\frac{dq}{dx} = 0 \Rightarrow q \ constante \tag{2.15a}$$

$$\left(1 - \left(\frac{q}{\rho A}\right)^{2} \Xi_{P}\right) \frac{dP}{dx} + \left(-\left(\frac{q}{\rho A}\right)^{2} \Xi_{\theta}\right) \frac{d\theta}{dx} - \frac{q^{2}}{\rho A^{3}} \frac{dA}{dx} = -\rho \cdot g \cdot sen(\alpha) - \frac{\Psi \cdot \pi \cdot d(x)}{A(x)} \tag{2.15b}$$

$$\left(1 - \Xi_{P} \left(\frac{q}{\rho A}\right)^{2} + \frac{\theta \Xi_{\theta}}{\rho}\right) \frac{dP}{dx} + \left(\frac{\rho \overline{C}_{P}}{M_{M}} - \Xi_{\theta} \left(\frac{q}{\rho A}\right)^{2}\right) \frac{d\theta}{dx} - \frac{q^{2}}{\rho A^{3}} \frac{dA}{dx} = -\rho g.sen(\alpha) + \frac{\rho.\Omega(x).\pi.d(x).(\theta_{E} - \theta)}{q} \tag{2.15c}$$

Onde o termo de cizalhamento é dado pela Eq. (2.15d):

$$\Psi.\pi.d = \frac{f(Re,\varepsilon/d)}{2} \cdot \left(1 + \frac{L_E}{L}\right) \frac{q|q|}{\rho.d.A}$$
 (2.15d)

2.4.3 Escoamento EC-1D-E Sônico em Seção Isentrópica de Área Constante: EC-1D-E*

O escoamento EC-1D-E se tornará sônico (*choked*) em uma seção isentrópica de duto com diâmetro (ou área de seção de escoamento) invariante; i.e. com dA/dx = 0. A condição isentrópica, por sua vez, exigirá escoamento adiabático e desprovido de termos dissipativos de atrito. Por fim, será adicionada a condição de escoamento horizontal como tradicionalmente feito em problemas de tubeiras e bocais de escoamento compressível. Em síntese, as Eqs. (2.15a), (2.15b) e (2.15c) de EC-1D-E podem ser colocadas na versão sônica EC-1D-E* impondo-se:

- Área de seção de escoamento constante (pelo menos em trecho infinitesimal): $\frac{dA}{dx} = 0$
- Escoamento Adiabático: $\Omega = 0$
- Escoamento Reversível (atrito desprezível): $f(Re, \varepsilon/d) = 0 \Rightarrow \Psi = 0$
- Escoamento Horizontal: $sen(\alpha) = 0$

Estas condições, aplicadas sobre EC-1D-E das Eqs. (2.15a), (2.15b) e (2.15c), criarão os balanços de massa, momentum e energia de EC-1D-E* associado a escoamento sônico como mostrado nas seguintes Eqs. (2.16a), (2.16b) e (2.16c). A condição sônica (*choked*) é assinalada com "*" e a velocidade sônica é representada na Eq. (2.16d). Esta velocidade poderá ser calculada com as Eqs. (2.16a), (2.16b) e (2.16c) conforme veremos. Consequentemente, na condição sônica o Número de Mach, dado pela razão entre a velocidade de escoamento e a velocidade sônica, valerá 1 como mostrado na Eq. (2.16e).

$$q = q * constante (2.16a)$$

$$\left(1 - \left(\frac{q^*}{\rho \cdot A}\right)^2 \Xi_P \right) \left(\frac{dP}{dx}\right)^* - \left(\frac{q^*}{\rho \cdot A}\right)^2 \Xi_\theta \left(\frac{d\theta}{dx}\right)^* = 0$$
(2.16b)

$$\left(I - \left(\frac{q^*}{\rho \cdot A}\right)^2 \Xi_P + \frac{\theta \cdot \Xi_\theta}{\rho}\right) \left(\frac{dP}{dx}\right)^* + \left(\frac{\rho \cdot \overline{C}_P}{M_M} - \left(\frac{q^*}{\rho \cdot A}\right)^2 \Xi_\theta\right) \left(\frac{d\theta}{dx}\right)^* = 0$$
(2.16c)

$$c = \frac{q^*}{\rho \cdot A} \tag{2.16d}$$

$$Ma^* = \left(\frac{q^*}{\rho \cdot A}\right)/c = 1 \tag{2.16e}$$

Mantendo-se a Eq. (2.16b) e subtraindo-se (2.16b) de (2.16c), têm-se as Eqs. (2.17a) e (2.17b) para EC-1D-E*:

$$\left(I - \left(\frac{q^*}{\rho \cdot A}\right)^2 \Xi_P \right) \left(\frac{dP}{dx}\right)^* - \left(\frac{q^*}{\rho \cdot A}\right)^2 \Xi_\theta \left(\frac{d\theta}{dx}\right)^* = 0$$
(2.17a)

$$\frac{\theta . \Xi_{\theta}}{\rho} \left(\frac{dP}{dx} \right)^{*} + \frac{\rho . \overline{C}_{P}}{M_{M}} \left(\frac{d\theta}{dx} \right)^{*} = 0 \tag{2.17b}$$

As Eqs. (2.17a) e (2.17b) são duas equações lineares homogêneas para os gradientes de temperatura e pressão sônicos no EC-1D-E*. Elas evidentemente implicam que no escoamento compressível isentrópico com seção constante, os perfis de temperatura e pressão atingem valores limites constantes com gradientes nulos:

$$\left(\frac{dP}{dx}\right)^* = \left(\frac{d\theta}{dx}\right)^* = 0 \tag{2.17c}$$

Apesar de ambos nulos pela Eq. (2.17c), estes gadientes limites admitem razão limite finita mediante divisão na condição "*":

$$\left(\frac{dP}{dx}\right)^* / \left(\frac{d\theta}{dx}\right)^* = \left(\frac{dP}{d\theta}\right)^* \tag{2.18a}$$

Dadas as premissas do EC-1D-E* de condição isentrópica e composição constante, a razão à direita na Eq. (2.18a) é evidentemente a propriedade termodinâmica mostrada na Eq. (2.18b).

$$\left(\frac{dP}{d\theta}\right)^* = \left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\bar{S},Y} \tag{2.18b}$$

A divisão das Eqs. (2.17a) e (2.17b) pelo gradiente $(d\theta/dx)^*$ dará, portanto,

$$\left(I - \left(\frac{q^*}{\rho \cdot A}\right)^2 \Xi_P \left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\bar{S}, Y} = \left(\frac{q^*}{\rho \cdot A}\right)^2 \Xi_\theta \tag{2.19a}$$

$$\left(\frac{\theta.\Xi_{\theta}}{\rho}\right)\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y} + \left(\frac{\rho.\overline{C}_{P}}{M_{M}}\right) = 0$$
(2.19b)

É possível mostrar que a Eq. (2.19b) é uma identidade termodinâmica bem conhecida que pode ser usada para calcular \overline{C}_P , mas que não traz fatos novos. Já a Eq. (2.19a) é interessante pois permite resolução para a velocidade sônica do EC-1D-E* na Eq. (2.20a):

$$c = \frac{q^*}{\rho \cdot A} = \sqrt{\frac{\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S}, Y}}{\Xi_{\theta} + \Xi_{P} \left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S}, Y}}} = \frac{1}{\sqrt{\Xi_{\theta} \left(\frac{\partial \theta}{\partial P}\right)_{\overline{S}, Y} + \Xi_{P}}}$$
(2.20a)

A Eq. (2.20a) exige ainda mais um estágio algébrico para ser posta na forma clássica como é mais conhecida. Usa-se a identidade na Eq. (2.20b) obtida a partir do diferencial de densidade sob \underline{Y} constante após divisão por dP mantendo-se entropia molar constante:

$$d\rho = \Xi_{\theta}.d\theta + \Xi_{P}.dP \ \{\underline{Y}cte \ \xrightarrow{\div dP \ sob \ \overline{S} \ constante} \ \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{\overline{S},Y} = \Xi_{\theta} \left(\frac{\partial \theta}{\partial P}\right)_{\overline{S},Y} + \Xi_{P} \quad (2.20b)$$

Com a Eq. (2.20b), a Eq. (2.20a) pode ser finalmente posta na forma clássica da velocidade sônica mostrada na Eq. (2.21a).

$$c = \frac{q^*}{\rho \cdot A} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{\overline{S}, Y}}}$$
 (2.21a)

Por razões de estabilidade mecânica dos materiais, a derivada na raiz quadrada da Eq. (2.21a) é sempre positiva, de modo que c é uma propriedade termodinâmica sempre definida para qualquer material que cumpra as leis da física (incluindo plasmas, etc). A Eq. (2.21a) também é aplicável a sistemas multifásicos e/ou multireativos sendo a maneira correta de definir c para sistemas convencionais ou não convencionais desde que possam ser admitidos em equilíbrio termodinâmico de fases e químico. A Eq. (2.21a) é usada no Cap. 4 para obter a velocidade sônica (como propriedade termodinâmica) em qualquer ponto do separador 3S.

Todavia, apesar de clássica, a Eq. (2.21a) não é muito prática para sistemas simples. Por este motivo usa-se a versão à esquerda na Eq. (2.20a) com a identidade Eq. (2.19b). Obtém-se assim a versão da velocidade sônica dada na Eq. (2.21b).

$$c = \frac{q^*}{\rho . A} = \sqrt{\frac{\overline{C}_P}{\Xi_P . \overline{C}_P - \frac{\theta . \Xi_\theta^2 . M_M}{\rho^2}}}$$
(2.21b)

Esta Eq. (2.21b) é uma fórmula rigorosa para a velocidade sônica de um material monofásico ou multifásico qualquer (desde que em equilíbrio termodinâmico) exatamente equivalente à versão compacta na Eq. (2.21a). Por exemplo, para um Gás Ideal a Eq. (2.21b) reduz-se a uma expressão extremamente simples para a velocidade sônica. Com as Eqs.

(2.9a), (2.9b) e (2.9c) aplicadas na Eq. (2.21b), tem-se para GI com capacidade calorífica a pressão constante \overline{C}_P , a seguinte expressão bem conhecida para a velocidade sônica:

$$c' = \frac{q^*}{\rho'.A} = \sqrt{\frac{\overline{C_P}'\theta}{\overline{C_P}'.M_M - M_M}} \Rightarrow c' = \frac{q^*}{\rho'.A} = \sqrt{\frac{\overline{C_P}'.R.\theta}{(\overline{C_P}' - R)M_M}}$$
(2.21c)

Após simplificações usando-se a razão de capacidades caloríficas do GI, $\gamma' = \overline{C}_P' / \overline{C}_V'$, tem-se a ainda mais popular Eq. (2.21d) para a velocidade sônica de GI. Esta fórmula expõe o fato de que para GI com composição constante a velocidade sônica depende apenas da temperatura sendo a pressão irrelevante. Isto ocorre porque capacidades caloríficas de GI com composição constante dependem apenas da temperatura, de modo que $\gamma' = \gamma'(\theta)$.

$$c' = \frac{q^*}{\rho'.A} = \sqrt{\frac{\gamma'.R.\theta}{M_M}}$$
 (2.21d)

A Eq. (2.21d) permite um teste rápido do desenvolvimento apresentado aqui através de comparação com valores disponíveis da velocidade sônica em fontes clássicas como FOX, MCDONALD e PRITCHARD (2006). Ar a 288 K e 1 atm de pressão pode ser considerado

um GI aproximadamente diatômico ($\gamma' = \frac{\overline{C_P}'}{\overline{C_V}'} \cong \frac{7}{5} = 1.4$) com massa molar $M_M = 0.02896$

kg/mol. Com R=8.314 J/mol.K e $\theta=288K$, tem-se:

$$c' = \sqrt{\frac{1.4 * 8.314 * 288}{0.02896}} = 340.2 \text{m/s} \qquad \text{{Ar @ 288 K,1 atm}}$$

Este valor concorda razoavelmente com o valor de *340m/s* encontrado no capítulo de escoamento compressível unidimensional de FOX, MCDONALD e PRITCHARD (2006) para ar a 288 K e 1 atm.

2.4.4 Escoamento EC-1D-E Isentrópico com Área Variável: EC-1D-EI

Passamos ao caso de maior interesse para análises do separador 3S. Trata-se do estudo de Tubeiras Convergente-Divergente (TCD). TCDs são abordadas como EC-1D-E mantido em condição isentrópica com área de seção de escoamento variável: A=A(x) com $dA/dx \neq 0$. Este escoamento é aqui denominado EC-1D-EI. O EC-1D-EI corresponde aproximadamente ao cenário operacional do separador 3S, mas só é possível abordá-lo tendo os casos anteriores devidamente descritos.

Como antes, a condição isentrópica exigirá escoamento adiabático e desprovido de termos dissipativos de atrito. Por fim, também será adicionada a condição de escoamento horizontal como tradicionalmente feito em problemas de TCDs com escoamento compressível. Em síntese, as Eqs. (2.15a), (2.15b) e (2.15c) de EC-1D-E são colocadas na versão isentrópica EC-1D-EI mostradas nas Eqs. (2.23a), (2.23b) e (2.23c) a partir das seguintes imposições:

- Escoamento Adiabático: $\Omega = 0$
- Escoamento Reversível (atrito desprezível): $f(Re, \varepsilon / d) = 0 \Leftrightarrow \Psi = 0$
- Escoamento Horizontal: $sen(\alpha) = 0$

$$\frac{dq}{dx} = 0 \Rightarrow q \ constante \tag{2.23a}$$

$$\left(1 - \left(\frac{q}{\rho A}\right)^2 \Xi_P\right) \frac{dP}{dx} + \left(-\left(\frac{q}{\rho A}\right)^2 \Xi_\theta\right) \frac{d\theta}{dx} = \frac{q^2}{\rho A^3} \frac{dA}{dx} \tag{2.23b}$$

$$\left(1 - \Xi_P \left(\frac{q}{\rho A}\right)^2 + \frac{\theta \Xi_\theta}{\rho}\right) \frac{dP}{dx} + \left(\frac{\rho \overline{C}_P}{M_M} - \Xi_\theta \left(\frac{q}{\rho A}\right)^2\right) \frac{d\theta}{dx} = \frac{q^2}{\rho A^3} \frac{dA}{dx} \tag{2.23c}$$

Mantendo-se a Eq. (2.23b), suprimindo-se menção à óbvia Eq. (2.23a), e subtraindo-se (2.23b) de (2.23c) tem-se uma forma mais compacta para as equações EC-1D-EI nas Eqs. (2.24a) e (2.24b) seguintes.

$$\left(1 - \left(\frac{q}{\rho A}\right)^2 \Xi_P\right) \frac{dP}{dx} + \left(-\left(\frac{q}{\rho A}\right)^2 \Xi_\theta\right) \frac{d\theta}{dx} = \frac{q^2}{\rho A^3} \frac{dA}{dx} \tag{2.24a}$$

$$\left(\frac{\theta . \Xi_{\theta}}{\rho}\right) \left(\frac{dP}{dx}\right) + \left(\frac{\rho . \overline{C}_{P}}{M_{M}}\right) \left(\frac{d\theta}{dx}\right) = 0$$
(2.24b)

Dividindo-se Eqs. (2.24a) e (2.24b) por $\frac{d\theta}{dx}$, tem-se que a condição de entropia constante no EC-1D-EI autoriza a escrever a identidade na Eq. (2.24c):

$$\left(\frac{dP}{dx}\right) / \left(\frac{d\theta}{dx}\right) = \left(\frac{dP}{d\theta}\right)^* = \left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S}, Y}$$
 (2.24c)

A identidade Eq. (2.24c) permite que as Eqs. (2.24a) e (2.24b) do EC-1D-EI sejam agora postas sob a forma das Eqs. (2.25a) e (2.25b) abaixo:

$$\left(I - \left(\frac{q}{\rho A}\right)^2 \Xi_P \right) \left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y} - \left(\frac{q}{\rho A}\right)^2 \Xi_\theta = \frac{q^2}{\rho A^3} \left(\frac{dA}{dx} / \frac{d\theta}{dx}\right) \tag{2.25a}$$

$$\left(\frac{\theta.\Xi_{\theta}}{\rho}\right)\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y} + \left(\frac{\rho.\overline{C}_{P}}{M_{M}}\right) = 0$$
(2.25b)

Operando-se a Eq. (2.25a) obtém-se a Eq. (2.26a) para o perfil de temperatura no EC-1D-EI. Em seguida, novamente com a Eqs. (2.24c) e com a recém-obtida Eq. (2.26a), tem-se a Eq. (2.26b) para o perfil de pressão no EC-1D-EI. Eqs. (2.26a) e (2.26b) expressam as relações que as variáveis dependentes (θ , P) têm de cumprir a partir do perfil de área de escoamento do duto imposto pela função A(x) e sua derivada dA/dx.

$$\frac{d\theta}{dx} = \frac{\left(\frac{q}{\rho A}\right)^{2}}{\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y} - \left(\frac{q}{\rho A}\right)^{2} \left(\Xi_{P}\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y} + \Xi_{\theta}\right)} \left(\frac{\rho}{A}\right) \frac{dA}{dx} \tag{2.26a}$$

$$\frac{dP}{dx} = \frac{\left(\frac{q}{\rho A}\right)^2}{\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y} - \left(\frac{q}{\rho A}\right)^2 \left(\Xi_P \left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y} + \Xi_\theta\right)} \left(\frac{\rho}{A}\right) \left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y} \frac{dA}{dx} \tag{2.26b}$$

Eqs. (2.26a) e (2.26b) podem ser rearranjadas para as formas apresentadas nas Eqs. (2.27a) e (2.27b):

$$\frac{d\theta}{dx} = \frac{\left(\frac{q}{\rho A}\right)^{2}}{\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y}} \left(\frac{1}{\Xi_{P}\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y} + \Xi_{\theta}}\right) - \left(\frac{q}{\rho A}\right)^{2}} \left(\frac{1}{\Xi_{P}\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y} + \Xi_{\theta}}\right) \left(\frac{\rho}{A}\right) \frac{dA}{dx} \tag{2.27a}$$

$$\frac{dP}{dx} = \frac{\left(\frac{q}{\rho A}\right)^{2}}{\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\bar{S},Y}} \left(\frac{\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\bar{S},Y}}{\Xi_{P}\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\bar{S},Y} + \Xi_{\theta}}\right) - \left(\frac{q}{\rho A}\right)^{2}} \left(\frac{\frac{\partial P}{\partial \theta}}{\Xi_{P}\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\bar{S},Y} + \Xi_{\theta}}\right) \left(\frac{\rho}{A}\right) \frac{dA}{dx} \tag{2.27b}$$

O quadrado da propriedade termodinâmica velocidade sônica, proveniente da Eq. (2.20a), é expresso na Eq. (2.27c) abaixo. O quadrado do Número de Mach, este também já introduzido anteriormente, é escrito na Eq. (2.27d).

$$c^{2} = \left(\frac{q^{*}}{\rho \cdot A}\right)^{2} = \frac{\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S}, Y}}{\Xi_{\theta} + \Xi_{P}\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S}, Y}}$$
(2.27c)

$$Ma^{2} = \left(\frac{q}{\rho \cdot A}\right)^{2} \div \frac{\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S}, Y}}{\Xi_{\theta} + \Xi_{P}\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S}, Y}} \qquad \left\{Ma = \frac{\frac{q}{\rho \cdot A}}{c}\right\}$$
(2.27d)

Com Eqs. (2.27c) e (2.27d), as Eqs. (2.27a) e (2.27b) podem ser rearranjadas para as formas apresentadas nas Eqs. (2.28a) e (2.28b) contendo o Número de Mach:

$$\frac{d\theta}{dx} = c^2 \left(\frac{Ma^2}{1 - Ma^2}\right) \left(\frac{1}{\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S}, Y}}\right) \left(\frac{\rho}{A}\right) \frac{dA}{dx}$$
(2.28a)

$$\frac{dP}{dx} = c^2 \left(\frac{Ma^2}{1 - Ma^2}\right) \left(\frac{\rho}{A}\right) \frac{dA}{dx}$$
 (2.28b)

O perfil de velocidade do EC-1D-EI pode agora ser abordado com as Eqs. (2.28). A composição do fluido \underline{Y} é constante ao longo do EC-1D-EI e o mesmo acontece com a vazão mássica q pela Eq. (2.23a). Assim tem-se a validade da Eq. (2.28c):

$$q = \rho.v.A(x) \equiv constante \implies 0 = v.A.\frac{d\rho}{dx} + \rho.A.\frac{dv}{dx} + v.\rho.\frac{dA}{dx}$$
 { \underline{Y} cte (2.28c)

A Eq. (2.28c) pode ser escrita via Eq. (2.28d) já que a densidade responde apenas a θ , P que variam com a posição x:

$$0 = v.A. \left(\Xi_{\theta} \frac{d\theta}{dx} + \Xi_{P} \frac{dP}{dx} \right) + \rho.A. \frac{dv}{dx} + v.\rho \frac{dA}{dx}$$
 { Y cte} (2.28d)

Explicitando-se $\frac{d\theta}{dx}$ no termo à esquerda da Eq. (2.28d), e usando-se a Eq. (2.24c) tem-se:

$$0 = v.A. \left(\Xi_{\theta} + \Xi_{P} \left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y}\right) \frac{d\theta}{dx} + \rho.A. \frac{dv}{dx} + v.\rho \frac{dA}{dx} \qquad \qquad \{\underline{Y} \ cte$$
 (2.28e)

Que por sua vez, reduz-se à Eq. (2.28f) abaixo quando se substitui $\frac{d\theta}{dx}$ via Eq. (2.28a):

$$0 = v.\rho \left\{ 1 + c^{2} \left(\frac{Ma^{2}}{1 - Ma^{2}} \right) \left(\frac{\Xi_{\theta} + \Xi_{P} \left(\frac{\partial P}{\partial \theta} \right)_{\overline{S}, Y}}{\left(\frac{\partial P}{\partial \theta} \right)_{\overline{S}, Y}} \right) \right\} \frac{dA}{dx} + \rho.A \frac{dv}{dx}$$

$$(2.28f)$$

Com o quadrado da velocidade sônica via Eq. (2.27c), a Eq. (2.28f) produz finalmente a expressão seguinte na Eq. (2.28g) para $\frac{dv}{dx}$:

$$\frac{1}{v}\frac{dv}{dx} = -\left(\frac{1}{1 - Ma^2}\right)\frac{1}{A}\frac{dA}{dx} \tag{2.28g}$$

Sumarizamos as relações diferenciais básicas cumpridas pelos perfis θ , P, ν no EC-1D-EI:

$$\frac{d\theta}{dx} = c^2 \left(\frac{Ma^2}{1 - Ma^2}\right) \left(\frac{1}{\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S}, Y}}\right) \left(\frac{\rho}{A}\right) \frac{dA}{dx}$$
 (2.28a)

$$\frac{dP}{dx} = c^2 \left(\frac{Ma^2}{1 - Ma^2}\right) \left(\frac{\rho}{A}\right) \frac{dA}{dx}$$
 (2.28b)

$$\frac{1}{v}\frac{dv}{dx} = -\left(\frac{1}{1 - Ma^2}\right)\frac{1}{A}\frac{dA}{dx} \tag{2.28g}$$

Neste ponto cabe alguma reflexão sobre Eqs. (2.28a), (2.28b) e (2.28g). Estas relações são rigorosas para qualquer fluido (mono ou multifásico ou mesmo multi-reativo) em EC-1D-EI. As propriedades termodinâmicas ρ e $\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y}$ são propriedades de equilíbrio (mono ou multifásico ou mesmo multi-reativo) definidas e finitas no EC-1D-EI, que é um escoamento essencialmente em equilíbrio termodinâmico interno ponto a ponto. O mesmo acontece para $\frac{dA}{dx}$ que expressa apenas fatos geométricos sobre o duto ou TCD do escoamento. Assim é evidente nas Eqs. (2.28a), (2.28b) e (2.28g) que as inclinações dos perfis $\theta(x)$, P(x) e v(x), a saber, $\frac{d\theta}{dx}$, $\frac{dP}{dx}$, $\frac{dv}{dx}$, passarão por singularidades $\pm \infty$ quando $Ma \rightarrow I^-$ e $Ma \rightarrow I^+$ dependendo do sinal de $\frac{dA}{dx}$.

Em resumo, como consequências das Eqs. (2.28a), (2.28b) e (2.28g), têm-se os fatos limites expressos nas Eqs. (2.29a) e (2.29b) que, apesar de qualitativos, são "impressões digitais" muito características do EC-1D-EI, que, repetimos, são válidas em escoamento mono ou multifásico ou mesmo multi-reativo, desde que em equilíbrio termodinâmico no fluido. Portanto, são úteis como "certificados gráficos" da confiabilidade das soluções encontradas nesta Dissertação. Em outras palavras, os perfis (θ , P, v), plotados contra a posição axial x na TCD, devem cruzar a condição sônica na TCD com inclinações que apresentam as singularidades $\pm \infty$ seguintes:

$$\frac{dA}{dx} < 0 \qquad \Rightarrow \ell im \quad \frac{d\theta}{dx} = -\infty , \ell im \quad \frac{dP}{dx} = -\infty , \ell im \quad \frac{dv}{dx} = +\infty$$
 (2.29a)

(Bocal Convergente) $Ma \rightarrow 1^ Ma \rightarrow 1^ Ma \rightarrow 1^-$

$$\frac{dA}{dx} > 0 \qquad \Rightarrow \ell im \quad \frac{d\theta}{dx} = -\infty , \ell im \quad \frac{dP}{dx} = -\infty , \ell im \quad \frac{dv}{dx} = +\infty$$

$$(Bocal \ Divergente) \qquad Ma \to 1^+ \qquad Ma \to 1^+ \qquad Ma \to 1^+$$

$$(2.29b)$$

As Eqs. (2.28a), (2.28b) e (2.28g) também impõem os comportamentos qualitativos seguintes nas Eqs. (2.29c) para os perfis (θ , P, v), ao longo das seções convergente e divergente da TCD:

$$Ma < 1 \Rightarrow \begin{cases} \frac{dA}{dx} < 0 \xrightarrow{Bocal \\ Convergente} \rightarrow \frac{dv}{dx} > 0, \frac{d\theta}{dx} < 0, \frac{dP}{dx} < 0 \end{cases}$$
 { Aceleração, resfriamento, expansão}
$$\begin{cases} \frac{dA}{dx} > 0 \xrightarrow{Bocal \\ Divergente} \rightarrow \frac{dv}{dx} < 0, \frac{d\theta}{dx} > 0, \frac{dP}{dx} > 0 \end{cases}$$
 { Desaceleração, aquecimento, compressão}
$$Ma > 1 \Rightarrow \begin{cases} \frac{dA}{dx} < 0 \xrightarrow{Bocal \\ Convergente} \rightarrow \frac{dv}{dx} < 0, \frac{d\theta}{dx} > 0, \frac{dP}{dx} > 0 \end{cases}$$
 { Desaceleração, aquecimento, compressão}
$$\frac{dA}{dx} > 0 \xrightarrow{Bocal \\ Divergente} \rightarrow \frac{dv}{dx} < 0, \frac{d\theta}{dx} < 0, \frac{dP}{dx} < 0 \end{cases}$$
 { Aceleração, resfriamento, expansão}
$$(2.29c)$$

Desta forma, visando à produção de resfriamento intenso em separador 3S, a configuração do dispositivo deve seguir o desenho TCD (Bocal Convergente seguido de Bocal Divergente) de modo a gerar resfriamento tanto na seção convergente quanto na divergente. Ao longo da TCD ter-se-á constantemente aceleração, expansão e resfriamento, enquanto as características do escoamento não mudarem, isto é, enquanto se mantiver como EC-1D-EI. Embora o escoamento supersônico possa tolerar pequenas irreversibilidades como pequenos níveis de atrito nas superfícies de contato, o escoamento não tolera grandes irreversibilidades. Caso haja a ocorrência localizada de alguma grande irreversibilidade, este padrão de contínua aceleração, expansão e resfriamento será interrompido. Um dos exemplos mais comuns de tais grandes irreversibilidades é a ocorrência de frontal normal de choque (normal shock) que abruptamente colapsa o escoamento supersônico na seção divergente da TCD criando descontinuidades (saltos) nos perfis θ , P, v, Ma e ρ . O choque normal ocorre porque o escoamento EC-1D-EI é instável para Ma>1, e esta instabilidade é tão maior quanto maior for Ma e menor for P. As descontinuidades do choque normal implicam em um súbito aquecimento (salto em temperatura, $\theta \uparrow$), súbita recompressão do gás (salto em pressão, $P \uparrow$), súbito aumento da densidade do fluido (salto em densidade, $\rho\uparrow$) ao mesmo tempo em que a velocidade subitamente cai a níveis subsônicos (salto de velocidade, $v \downarrow$, $Ma \downarrow$). Os saltos no frontal de choque devem ser modelados impondo conservação das grandezas básicas do escoamento como a vazão mássica, a taxa de momentum da corrente e a taxa de energia total (entálpica+cinética) da corrente. Uma outra propriedade que não se conserva no choque normal é a entropia molar do fluido. Como o escoamento é adiabático e uma irreversibilidade ocorreu com o choque (i.e. não haverá retorno espontâneo para o EC-1D-EI), a entropia molar do fluido tem de apresentar um salto positivo quando este cruzar o frontal do choque.

2.4.5 Escoamento EC-1D-EI Isentrópico e Área Variável com Gás Ideal

Com fluido GI, as Eqs. (2.28a), (2.28b) e (2.28g), são integráveis analiticamente. A utilidade do EC-1D-EI com GI é evidente: as fórmulas facilmente obtidas têm afinidade com os fenômenos em TCD supersônico real. As Eqs. (2.28a), (2.28b) e (2.28g), devem ser resolvidas com as propriedades GI seguintes: EOS-GI e derivadas (Eqs. (2.30a)), velocidade

sônica GI (Eq. (2.21d) na Eq. (2.30b)), e
$$\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\bar{S},Y}$$
 (via Eq. (2.25b) na Eq. (2.30c)).

$$\rho' = \frac{P.M_M}{R.\theta} \quad , \quad \Xi_{\theta}' = -\frac{\rho'}{\theta} \quad , \quad \Xi_{P}' = \frac{\rho'}{P}$$
 (2.30a)

$$c' = \sqrt{\frac{\gamma'.R.\theta}{M_M}} \tag{2.30b}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \theta}\right)_{\overline{S},Y}' = -\frac{{\rho'}^2.\overline{C}_P'}{\theta.\Xi_{\theta}'M_M} = \frac{{\rho'}.\overline{C}_P'}{M_M} = \frac{P.\overline{C}_P'}{R.\theta} = \left(\frac{\gamma'}{\gamma'-1}\right)\frac{P}{\theta}$$
(2.30c)

As Eqs. (2.28a), (2.28b) e (2.28g) para EC-1D-EI produzem, com as relações acima, as seguintes expressões para as variáveis dependentes (θ ', P', ν ') no contexto GI:

$$\frac{d\theta'}{dx} = c'^2 \left(\frac{Ma^2}{1 - Ma^2}\right) \left(\frac{\gamma' - 1}{\gamma'}\right) \frac{\theta}{P} \left(\frac{P.M_M}{R.\theta}\right) \frac{1}{A} \frac{dA}{dx}$$
(2.31a)

$$\frac{dP'}{dx} = c'^2 \left(\frac{Ma^2}{1 - Ma^2}\right) \left(\frac{P.M_M}{R.\theta}\right) \frac{1}{A} \frac{dA}{dx}$$
 (2.31b)

$$\frac{1}{v'}\frac{dv'}{dx} = -\left(\frac{1}{1 - Ma^2}\right)\frac{1}{A}\frac{dA}{dx}$$
 (2.31c)

Ou, equivalentemente, com Eq. (2.30b):

$$\frac{d \ln \theta'}{dx} = \left(\frac{Ma^2}{1 - Ma^2}\right) (\gamma' - 1) \frac{d \ln A}{dx}$$
 (2.31d)

$$\frac{d \ln P'}{dx} = \gamma' \left(\frac{Ma^2}{1 - Ma^2}\right) \frac{d \ln A}{dx} \tag{2.31e}$$

$$\frac{d \ln v'}{dx} = -\left(\frac{1}{1 - Ma^2}\right) \frac{d \ln A}{dx} \tag{2.31f}$$

A diferenciação da Eq. (2.30b) permite escrever Eq. (2.31g) que é útil para transformar (2.31f) em um análogo para *Ma*:

$$\frac{d \ln c'}{dx} = \frac{1}{2} \frac{d \ln \theta}{dx} \Rightarrow \frac{d \ln c'}{dx} = \frac{1}{2} \left(\frac{Ma^2}{1 - Ma^2} \right) (\gamma' - 1) \frac{d \ln A}{dx}$$
 (2.31g)

Com a Eq. (2.31g) subtraída da Eq. (2.31f) resulta a relação de escoamento para Número de Mach para problemas EC-1D-EI com GI conforme mostrado na Eq. (2.31h):

$$\frac{d \ln Ma}{dx} = -\left\{ \frac{1 + Ma^2 \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right)}{1 - Ma^2} \right\} \frac{d \ln A}{dx}$$
(2.31h)

Removendo-se o diferencial dx, as Eqs. (2.31d), (2.31e), (2.31f) e (2.31h) ficam prontas para integração analítica em um TCD através das Eqs. (2.32a), (2.32b) e (2.32c) para as variáveis (θ', P', Ma) nas faixas $Ma: I \rightarrow Ma$, $A: A^* \rightarrow A$, $\theta': \theta^* \rightarrow \theta'$, $P': P^* \rightarrow P'$. Ou seja, parte-se da condição sônica em direção tanto a extremos subsônicos quanto supersônicos. Como antes, o sobrescrito "*" assinala as condições da garganta (*throat*) do TCD onde há escoamento EC-1D-E*.

$$d\ln\theta' = \left(\frac{Ma^2}{1 - Ma^2}\right)(\gamma' - 1).d\ln A \tag{2.32a}$$

$$d \ln P' = \gamma' \left(\frac{Ma^2}{1 - Ma^2}\right) d \ln A \tag{2.32b}$$

$$d \ln Ma = -\left\{ \frac{1 + Ma^2 \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right)}{1 - Ma^2} \right\} d \ln A$$
 (2.32c)

Inicia-se a integração pela Eq. (2.32c). Após processo de separação de variáveis, mudança de variável e técnicas de integração de funções racionais obtém-se a Eq. (2.33a) que explicita a razão de áreas de escoamento em termos de *Ma*. Com Eq. (2.33a) escreve-se o diferencial *dlnA* em termos do diferencial *dlnMa* o que permite retorno às Eqs. (2.32a) e (2.32b) para repetir o processo de separação de variáveis e técnicas de integração de funções racionais para obter o comportamento análogo das razões de temperatura e de pressão do GI em função de *Ma*, respectivamente expressas nas Eqs. (2.33b) e (2.33c).

$$\frac{A}{A^*} = \frac{1}{Ma} \left\{ \frac{1 + \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right) Ma^2}{1 + \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right)} \right\}^{\frac{\gamma' + 1}{2(\gamma' - 1)}}$$
(2.33a)

$$\frac{\theta'}{\theta^*} = \frac{1 + \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right)}{1 + \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right) Ma^2}$$
 (2.33b)

$$\frac{P'}{P^*} = \left\{ \frac{1 + \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right)}{1 + \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right) Ma^2} \right\}^{\frac{\gamma'}{\gamma' - 1}}$$
(2.33c)

As Eqs. (2.33) podem ser traçadas em gráfico para GIs de interesse, conforme mostrado nas Figuras 10, 11 e 12 respectivamente para Eq. (2.33a), Eq. (2.33b) e Eq. (2.33c), considerando-se espécies CH_4 e CO_2 que são típicos GI em temperatura e pressão ambientes. Espécies CH_4 e CO_2 foram escolhidas não apenas porque são típicas de gás natural. Mas também porque, embora com \overline{C}_P e γ' próximos, suas massas molares M_M são muito diferentes. Isto fez com que os seus perfis ficassem próximos nas Figuras 10, 11 e 12 que dependem apenas de γ' nas Eqs. (2.33). Mas isto poderá não ocorrer para outras variáveis do escoamento conforme veremos adiante. Em todas as Figuras 10, 11 e 12 "T" e "throat" são sinônimos de " θ " e "*".

Valores de coordenadas de estagnação (°) relativos a valores das mesmas coordenadas respectivamente na garganta, podem ser obtidos das Eqs. (2.33) substituindo-se Ma=0; obtêm-se as Eqs. (2.33d), (2.33e) e (2.33f).

$$\frac{A^o}{A^*} = \infty \tag{2.33d}$$

$$\frac{\theta'^o}{\theta^*} = \frac{\gamma' + 1}{2} \tag{2.33e}$$

$$\frac{P'^o}{P^*} = \left(\frac{\gamma' + 1}{2}\right)^{\frac{\gamma'}{\gamma' - 1}} \tag{2.33f}$$

A Eq. (2.33a) referente à razão de áreas da TCD versus *Ma* é apresentada no capítulo de EC-1D de FOX, MCDONALD e PRITCHARD (2006) e no Cap. 8 de OOSTHUIZEN e CARSCALLEN (1997), em ambos os casos juntamente com figura análoga à Figura 10. Mas em ambas as fontes o mesmo não foi feito para os demais perfis *θ, P* versus *Ma* mostrados

aqui nas Figuras 11 e 12. As coordenadas de estagnação para GI obtidas nas Eqs. (2.33d), (2.33e) e (2.33f) são idênticas às apresentadas em FOX, MCDONALD e PRITCHARD (2006) e no Cap. 8 de OOSTHUIZEN e CARSCALLEN (1997).

As Eqs. (2.33a), (2.33b) e (2.33c) podem ser recolocadas relacionando a condição de escoamento EC-1D-EI atual com outro ponto qualquer do escoamento que não seja a garganta; por exemplo, um ponto de referência "_R" qualquer (onde" "_R" pode ser "*"). Para isto reescrevem-se Eqs. (2.33a), (2.33b) e (2.33c) para o ponto "_R" nas Eqs. (2.33g), (2.33h) e (2.33i).

$$\frac{A_R}{A^*} = \frac{1}{Ma_R} \left\{ \frac{1 + \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right) M a_R^2}{1 + \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right)} \right\}^{\frac{\gamma' + 1}{2(\gamma' - 1)}}$$
(2.33g)

$$\frac{\theta_R'}{\theta^*} = \frac{1 + \left(\frac{\gamma' - I}{2}\right)}{1 + \left(\frac{\gamma' - I}{2}\right) M a_R^2} \tag{2.33h}$$

$$\frac{P_R'}{P^*} = \left\{ \frac{I + \left(\frac{\gamma' - I}{2}\right)}{I + \left(\frac{\gamma' - I}{2}\right) M a_R^2} \right\}^{\frac{\gamma'}{\gamma' - I}}$$
(2.33i)

Dividindo-se Eqs. (2.33a), (2.33b), (2.33c), respectivamente por Eqs. (2.33g), (2.33h), (2.33i), têm-se Eqs. (2.33j), (2.33k), (2.33l) relacionando dois pontos quaisquer do EC-1D-EI:

$$\frac{A}{A_R} = \frac{Ma_R}{Ma} \left\{ \frac{1 + \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right)Ma^2}{1 + \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right)Ma_R^2} \right\}^{\frac{\gamma' + 1}{2(\gamma' - 1)}}$$
(2.33j)

$$\frac{\theta'}{\theta_R'} = \frac{I + \left(\frac{\gamma' - I}{2}\right) M a_R^2}{I + \left(\frac{\gamma' - I}{2}\right) M a^2}$$
(2.33k)

$$\frac{P'}{P'_R} = \left\{ \frac{1 + \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right) M a_R^2}{1 + \left(\frac{\gamma' - 1}{2}\right) M a^2} \right\}^{\frac{\gamma}{\gamma' - 1}}$$
(2.33l)

O Leitor deve ter claro que as **Figuras 10, 11 e 12** são apenas ilustrativas de fenômenos em TCD, porque CH₄ e CO₂ reais podem condensar abaixo de suas respectivas temperaturas críticas de -82.6°C e 31°C. Além disto, CO₂ poderá congelar em temperatura abaixo daquela do seu ponto triplo a -57°C e 5.2 bar. Estes comportamentos de fase das espécies reais CH₄ e CO₂ evidentemente são francamente ignorados pelos perfis obtidos para GI nas **Figuras 10, 11 e 12** e nas demais que serão exploradas adiante com GI.

Deve-se notar que os perfis mostrados nas **Figuras 10, 11 e 12** não dependem das reais características geométricas da TCD (por exemplo, o seu comprimento axial), mas apenas da razão de áreas A/A^* . Isto permite que qualquer desenho de TCD, desde que grande o bastante para atender a faixa de valores A/A^* , possa ser escalado para reproduzir os desempenhos mostrados nas **Figuras 10, 11 e 12**.

Outra característica dos perfis nas **Figuras 11 e 12** é que não se percebem as singularidades apontadas nas Eqs. (2.29a) e (2.29b) na passagem pela garganta (*throat*) da TCD onde Ma=1. A explicação é que os perfis θ , P nas **Figuras 11 e 12** são traçados contra Ma cujo perfil espacial também apresenta inclinação com a singularidade $+\infty$ na garganta. Isto impede que se perceba qualquer uma das duas singularidades na inclinação dos perfis na garganta, porque apesar de singularizados com $\pm\infty$, tais inclinações apresentam razões limites finitas na garganta (no caso, ambas negativas como visto na **Figuras 11 e 12**). Por outro lado, as singularidades nas inclinações dos perfis θ , P, v, Ma serão perfeitamente identificáveis quando os gráficos são construídos com a posição axial da TCD no eixo das abscissas conforme será visto na próxima seção.

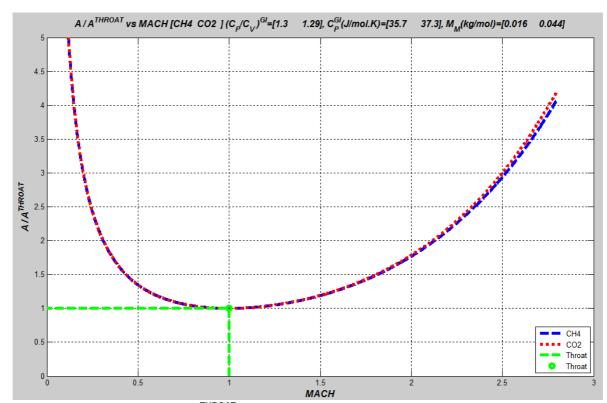


Figura 10: Perfis A/A^{THROAT} vs Ma para CH_4 e CO_2 como GI para $Ma \in [0, 2.8]$

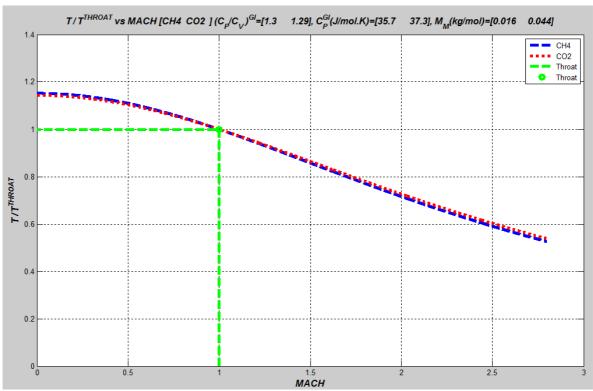


Figura 11: Perfis θ'/θ^{THROAT} vs Ma para CH_4 e CO_2 como GI para $Ma \in [0, 2.8]$

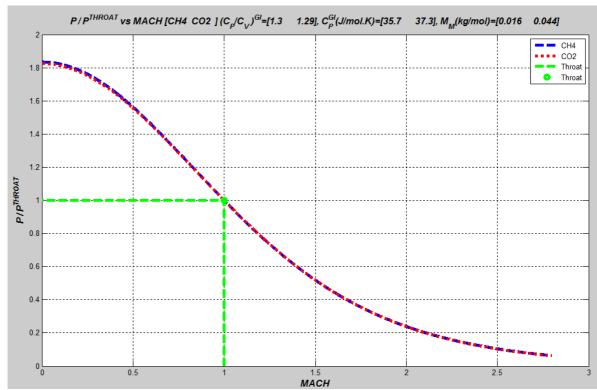


Figura 12: Perfis P'/P^{THROAT} vs Ma para CH_4 e CO_2 como GI para $Ma \in [0, 2.8]$

2.4.6 Escoamento EC-1D-EI Isentrópico com Gás Ideal em TCD Arbitrária

É interessante representar os perfis de variáveis dependentes do escoamento não apenas contra Ma, mas também contra a verdadeira coordenada espacial axial na TCD, ou seja, x. Esta representação é mais útil para engenharia de TCDs e permitirá visualização das singularidades nas inclinações dos perfis P, θ , v, Ma na garganta da TCD. Para isto a geometria da TCD deve ser estipulada.

Como explicado acima, há inúmeros desenhos de TCD que reproduzirão os comportamentos mostrados (a menos, é claro, de contrações ou dilatações destes comportamentos no eixo x). Assim, para exemplificação com CH_4 e CO_2 como GI considerase a TCD com perfis retilineares de diâmetro mostrada na **Figura 13** cujos dados geométricos estão na Tabela 3. Para esta TCD os perfis de diâmetros e de área de seção de escoamento são dados nas Eqs. (2.34a) e (2.34b) em termos de razões relativas aos respectivos parâmetros de garganta (*Throat*). A **Figura 14** representa graficamente o perfil de razão de área de escoamento versus x na Eq. (2.34b) para a TCD na **Figura 13**.

$$d/d^* = \begin{cases} I + 2\left(\frac{L_C - x}{d^*}\right) \cdot tan(\alpha) & \{x \le L_C \\ I + 2\left(\frac{x - L_C}{d^*}\right) \cdot tan(\beta) & \{x \ge L_C \end{cases}$$

$$(2.34a)$$

$$A/A^* = \begin{cases} \left(1 + 2\left(\frac{L_C - x}{d^*}\right) \cdot tan(\alpha)\right)^2 & \{x \le L_C \\ \left(1 + 2\left(\frac{x - L_C}{d^*}\right) \cdot tan(\beta)\right)^2 & \{x \ge L_C \end{cases}$$

$$(2.34b)$$

Tabela 3. Dados geométricos da TCD para testes com CH₄ e CO₂ como GI

Comprimento Axial Seção	Comprimento Axial Seção	Diâmetro Garganta	Ângulo de Parede Seção Convergente	Ângulo de Parede Seção Divergente
Convergente	Divergente			
$L_C = 0.5m$	$L_D = 1.5m$	$D^{THROAT} = 0.1m$	$\alpha = 9^{\circ}$	$\beta = 2^o$

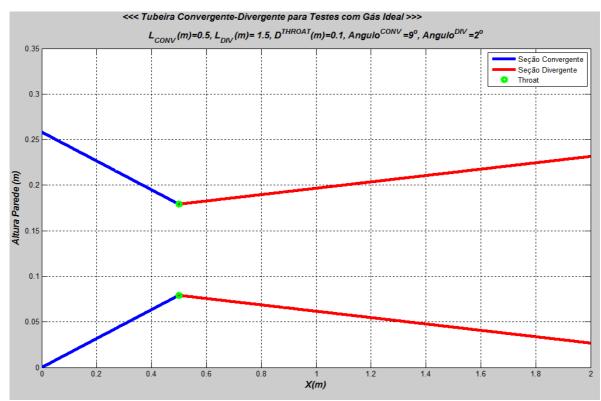


Figura 13: Tubeira Convergente-Divergente (TCD) para Testes com CH_4 e CO_2 como GI $L_C=0.5m$, $L_D=1.5m$, $D^{THROAT}=0.1m$, ângulo de convergência 9^o , ângulo de divergência 2^o

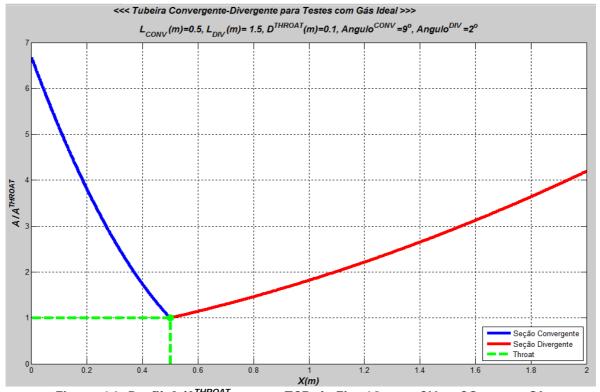


Figura 14: Perfil A/A^{THROAT} vs x na TCD da Fig. 13 para CH₄ e CO₂ como GI

A Eq. (2.34b) pode ser invertida criando x em função de A/A* para a TCD da Figura 14. Por outro lado, a Eq. (2.33a) fornece a dependência de A/A* com Ma para o GI. Portanto,

compondo-se estas funções chega-se à dependência de Ma com x para GI na TCD da Figura 14. Este processo é executado numericamente em ambiente MATLAB utilizando ferramentas de interpolação numérica e pode ser repetido para os demais perfis de interesse como mostrado esquematicamente nas Eqs. (2.35a), (2.35b), (2.35c) e (2.35d). Nestas equações os símbolos F, G, J, L referem-se às relações funcionais expressas, respectivamente, nos termos à direita nas Eqs. (2.34b), (2.33a), (2.33b) e (2.33c). Por outro lado, os símbolos H, K, M correspondem a funções compostas obtidas numericamente em MATLAB e dadas, respectivamente, por $H = G^{-1} \circ F$, $K = J \circ H$ e $M = L \circ H$.

respectivemente, por
$$H = G^{-1} \circ F$$
, $K = J \circ H$ e $M = L \circ H$.

$$A/A^* = F(x) \text{ via } Eq.(2.34b)$$

$$A/A^* = G(Ma) \text{ via } Eq.(2.34b)$$

$$A/A^* = G(Ma) \text{ via } Eq.(2.34b)$$

$$A/A^* = G(Ma) \text{ via } Eq.(2.33a)$$

$$\Rightarrow Ma = H(x)$$

$$\Rightarrow \theta'/\theta^* = K(x) \quad \{K = J \circ H \quad (2.35b)$$

$$A/A^* = F(x) \text{ via } Eq.(2.34b)$$

$$A/A^* = G(Ma) \text{ via } Eq.(2.34b)$$

$$A/A^* = G(Ma) \text{ via } Eq.(2.33a)$$

$$\Rightarrow Ma = H(x)$$

$$A/A^* = G(Ma) \text{ via } Eq.(2.33a)$$

$$\Rightarrow Ma = H(x)$$

$$A/A^* = G(Ma) \text{ via } Eq.(2.33a)$$

$$\Rightarrow P'/P^* = M(x) \quad \{M = L \circ H \quad (2.35c)$$

$$A' = F(x) \text{ via } Eq.(2.33c)$$

$$A' = G(Ma) \text{ via } Eq.(2.33c)$$

$$A' = G(Ma) \text{ via } Eq.(2.33a)$$

$$A' = G(Ma) \text{ via } Eq.(2.34b)$$

$$A' = G(Ma) \text{$$

$$A/A^* = F(x) \text{ via } Eq. (2.34b)$$

$$A/A^* = G(Ma) \text{ via } Eq. (2.33a)$$

$$\Rightarrow Ma = H(x)$$

$$\Rightarrow P'/P^* = M(x) \quad \{M = L \circ H \quad (2.35c)\}$$

As dependências Ma vs x, θ'/θ^* vs x e P'/P^* vs x para CO_2 e CH_4 como GI foram criadas pela composição numérica de funções mostradas nas Eqs. (2.35a), (2.35b) e (2.35c). Estes comportamentos foram traçados, respectivamente, nas Figuras 15, 16 e 17. É visível que o uso de escalas reduzidas adimensionais (θ/θ^* , P/P^* , Ma, etc) impõe que não haja muita diferença entre os perfis CH₄ e CO₂ apesar das suas grandes diferenças de massa molar (M_M) .

É também interessante observar que nas representações gráficas contra a posição axial x, todos os perfis Ma vs x, θ'/θ^* vs x e P'/P^* vs x apresentam inclinações com singularidades $\pm \infty$ ao cruzar a garganta da TCD. Especificamente, os perfis θ'/θ^* vs x e P'/P^* vs x apresentam singularidade $-\infty$ nas inclinações na garganta, enquanto Ma vs x exibe singularidade $+\infty$ na sua inclinação na garganta. Isto está totalmente de acordo com o previsto acerca de tais singularidades nas Eqs. (2.29a) e (2.29b), equações estas que foram estabelecidas para fluidos reais e não apenas GI. Os comportamentos mostrados nas Figuras 15, 16 e 17 também estão em concordância com os padrões de inclinações esperados nas seções convergente e divergente da TCD conforme descrito na Eq. (2.29c) também obtida para fluidos reais; a saber, ocorre aceleração, resfriamento e expansão tanto na seção convergente (Ma < 1) quanto na seção divergente (Ma > 1) da TCD.

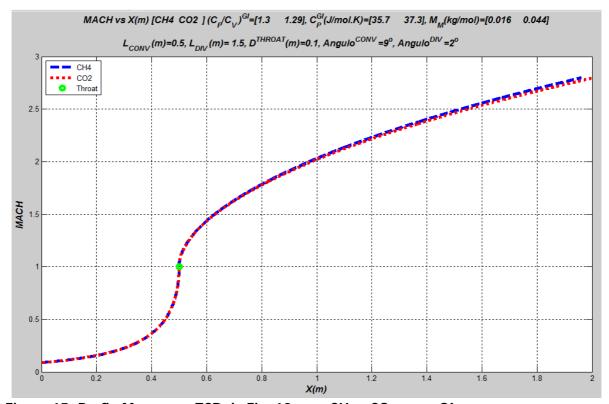


Figura 15: Perfis Ma vs x na TCD da Fig. 13 para CH₄ e CO₂ como GI

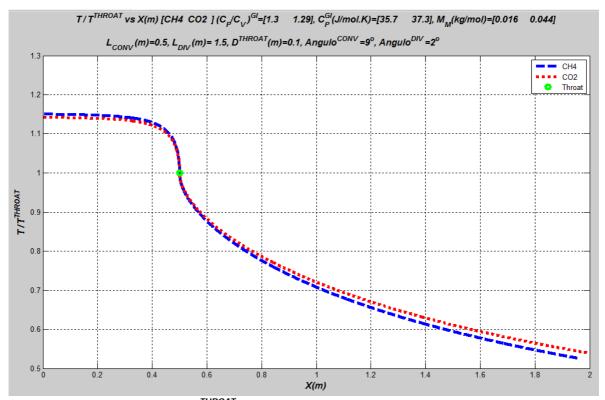


Figura 16: Perfis θ'/θ^{THROAT} vs x na TCD da Fig. 13 para CH_4 e CO_2 como GI

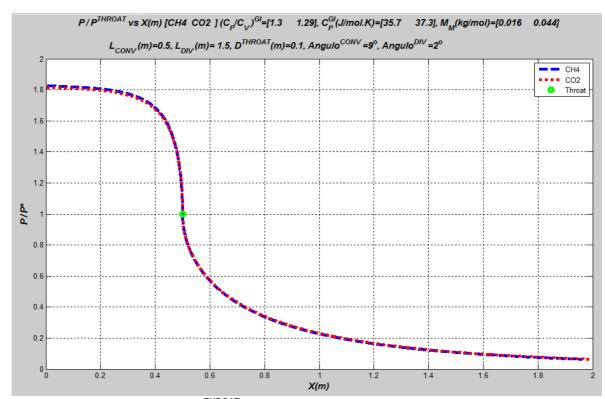


Figura 17: Perfis P'/PTHROAT vs x na TCD da Fig. 13 para CH₄ e CO₂ como GI

A extensão de resfriamento gerado nas **Figuras 15, 16 e 17** é profunda, sendo atingida no final da TCD da Figura 14 temperatura absoluta aproximadamente 55% da temperatura da garganta e aproximadamente 48% da temperatura de entrada do gás. A queda de pressão é ainda mais dramática: a pressão ao final da TCD atinge a aproximadamente 8% da pressão da garganta e 4% da pressão de entrada, com *Ma* de saída próximo a 2.8.

Todavia, como a demonstração de resultados absolutos é de maior interesse, tanto na engenharia de TCDs quanto nesta Dissertação (enfoque este que será determinante na apresentação de resultados no Cap. 5), convém re-apresentar as **Figuras 15, 16 e 17** em modo de escalas absolutas; isto é, em valores não escalados pelas condições de garganta ("*").

Neste contexto, para gerar perfis em valores absolutos de variáveis de escoamento na TCD, as coordenadas de estado e de velocidade de CH₄ e CO₂ na entrada da TCD têm de ser definidos. Tais coordenadas foram escolhidas próximo a valores típicos de operação de separador 3S como T_E =27°C, P_E =100bar, estando cada um dos gases respectivamente como GI puro na condição de entrada. A velocidade de entrada é compatível com Ma_E =0.09 conforme já obtido na extremidade x=0 na **Figura 15**.

Cabe aqui, entretanto, mais um alerta para lembrar que trabalhamos com condições hipotéticas de GI para CH₄ e CO₂. Porque, como é sabido, em condições reais seria

impossível ter-se CO_2 puro gás a $T_E=27^{\circ}C$, $P_E=100bar$, já que CO_2 está subcrítico a $27^{\circ}C$ e em uma pressão acima da respectiva pressão de vapor a $27^{\circ}C$ que é próxima a 68bar. Em outras palavras, CO_2 real é um líquido sub-resfriado a $T_E=27^{\circ}C$, $P_E=100bar$.

Com os perfis $\theta'(x)/\theta^*$, $P'(x)/P^*$ obtidos anteriormente nas Eqs. (2.35) e as condições de entrada dos gases na TCD ($T_E=27^\circ C$, $P_E=100bar$), os perfis de temperaturas e pressões são resgatados com as Eqs. (2.36a) e (2.36b) e traçados versus x nas **Figuras 18 e 19** para CH₄ e CO₂ como GI na TCD da **Figura 13**.

$$T'(x) = \theta'(x) = T_E \cdot \frac{\theta'(x)/\theta^*}{\theta'(x=0)/\theta^*}$$
 (2.36a)

$$P'(x) = P_E \cdot \frac{P'(x)/P^*}{P'(x=0)/P^*}$$
 (2.36b)

Sendo obtido o perfil T'(x), obtém-se também o perfil de velocidade sônica c'(x) pela Eq. (2.30b) para CH₄ e CO₂. Por fim, com perfis Ma(x) já obtidos na Eq. (2.35a) e com perfis c'(x), obtêm-se os perfis de velocidades v'(x) = c'(x) Ma(x) para ambos os gases. Os perfis c'(x), v'(x) são respectivamente traçados nas **Figuras 20 e 21** para CH₄ e CO₂ como GI na TCD da **Figura 13**.

Como pode ser visto nas **Figuras 18 a 21**, ambos os gases seguem curvas de despressurização muito similares atingindo pressão final de alguns bars apenas. Mas há alguma diferença nas curvas de resfriamento na seção supersônica da TCD, provavelmente associadas à menor velocidade atingida por CO₂ cuja velocidade final é de pouco mais de 500m/s enquanto CH₄ atinge a 850m/s. São gerados resfriamentos profundos na saída da TCD com temperaturas da ordem de -140°C e -130°C para CH₄ e CO₂ como GI. Como já dito, tal resfriamento para CO₂ real seria impossível de ser obtido sem formar gelo seco já que o seu ponto triplo está em -57°C e 5.2 bar. A formação de gelo seco, por sua vez, liberaria entalpia de congelamento de CO₂ (8.7kJ/mol) que "quebraria o frio" aumentando a temperatura de saída. Também é possível que a condição final de CH₄ esteja otimisticamente fria demais, porque provavelmente teria atingido a região de ELV do CH₄ real (ponto crítico a -82.6°C, 46 bar), o que formaria líquido elevando a temperatura de saída da TCD.

Os perfis de velocidade sônica de CH4 e CO2 são bem distintos (**Figura 20**) devido à grande diferença de massa molar (M_M). É interessante observar que estes perfis apresentam inclinação com singularidade - ∞ na garganta devido à mesma singularidade no perfil de temperatura. Por fim, embora os perfis Ma(x) sejam quase idênticos na **Figura 15**, os perfis

de velocidade v'(x) são muito diferentes para CH₄ e CO₂ na **Figura 21** devido à grande diferença nos perfis de velocidade sônica na **Figura 20**. Mas todos os perfis v'(x) cumprem a singularidade $+\infty$ de inclinação na garganta, como esperado.

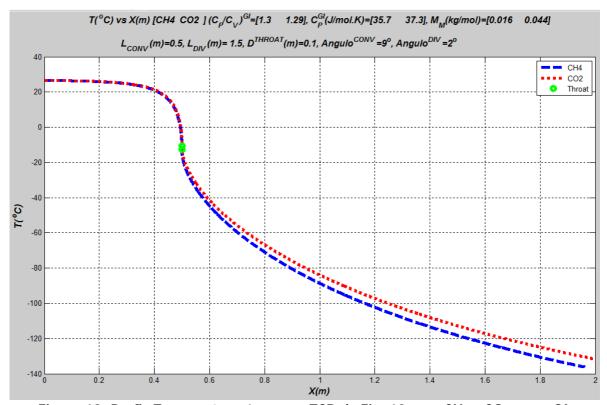


Figura 18: Perfis Temperatura θ' vs x na TCD da Fig. 13 para CH_4 e CO_2 como GI

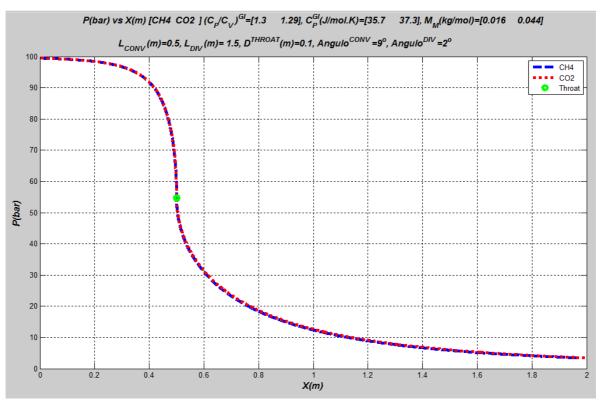


Figura 19: Perfis Pressão P' vs x na TCD da Fig. 13 para CH₄ e CO₂ como GI

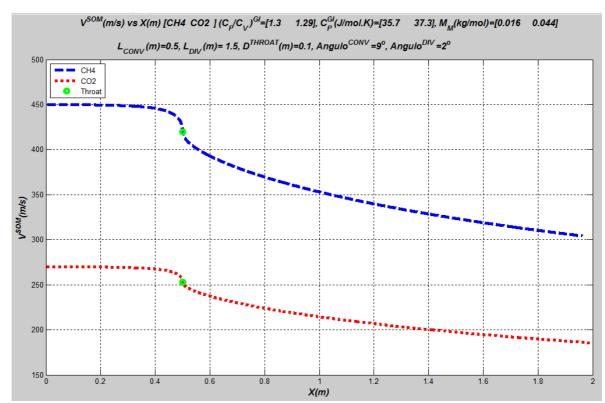


Figura 20: Perfis Velocidade Sônica c' vs x na TCD da Fig. 13 para CH₄ e CO₂ como GI

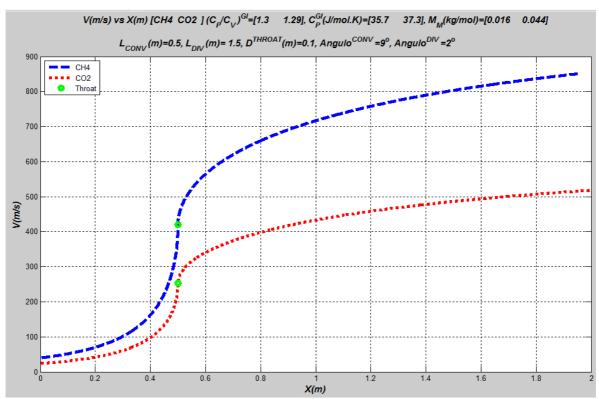


Figura 21: Perfis Velocidade v' vs x na TCD da Fig. 13 para CH_4 e CO_2 como GI

2.4.7 Frontal de Choque Normal em EC-1D-EI

O choque normal (normal shock) é um fenômeno irreversível e adiabático que pode ocorrer em qualquer campo de escoamento EC-1D-EI supersônico em tubos e em campos de escoamento SS externos. A ocorrência do choque normal é devida ao fato de que o EC-1D-EI supersônico é instável especialmente frente a pressões mais altas a jusante (FOX, MCDONALD e PRITCHARD, 2006). A instabilidade do EC-1D-EI supersônico cresce com Ma e com a redução da temperatura e da pressão do EC-1D-EI como visto na seção divergente da TCD das Figuras 15, 18 e 19. Ou seja, níveis muito baixos de pressão são atingidos na seção divergente da TCD. Ao mesmo tempo é esperado que a pressão de descarga (backpressure) da TCD seja mais elevada como ocorre com o separador 3S onde a backpressure está aproximadamente entre 1/2 e 2/3 da pressão de entrada. Isto inevitavelmente cria as condições para o colapso do escoamento SS em algum ponto da seção divergente da TCD cuja pressão esteja muito abaixo da backpressure.

O frontal de choque normal é uma zona de descontinuidade adiabática normal ao EC-1D-EI na qual variáveis dependentes como θ , P, v, Ma apresentam saltos abruptos bem próximos do que se entende por descontinuidade matemática (FOX, MCDONALD e PRITCHARD, 2006; OOSTHUIZEN e CARSCALLEN, 1997). Propriedades termodinâmicas como ρ , \overline{S} , \overline{H} também apresentam saltos no frontal de choque. A direção das transformações no choque é imposta pela Segunda Lei da Termodinâmica que determina que a entropia molar do fluido deverá aumentar já que o fenômeno é adiabático e irreversível. A irreversibilidade tem a ver com o fato de que o escoamento EC-1D-EI supersônico não retorna espontaneamente após o frontal de choque; i.e. o EC-1D permanece subsônico. Isto quer dizer que Ma obrigatoriamente deverá cair a um valor abaixo de 1. Assim o sentido das transformações quando o fluido cruza o frontal de choque normal é tal que súbita e abruptamente ocorrem os saltos mostrados na Eq. (2.37):

$$\frac{EC - 1D - EI}{Ma > 1} \xrightarrow{Choque\ Normal} \theta \uparrow, P \uparrow, v \downarrow, Ma \downarrow (até\ Ma < 1) \Rightarrow \rho \uparrow, \overline{S} \uparrow, \overline{H} \uparrow \qquad (2.37)$$

Em outras palavras, quando o fluido com Ma>1 cruza o frontal de choque a velocidade cai abruptamente, reduzindo a energia cinética o que obriga aumento de entalpia pela conservação de energia. Em consequência, o gás se aquece. A queda de velocidade reduz a taxa de momentum transportado pelo fluido, então, pela conservação da taxa de momentum total do escoamento a pressão a jusante deve subir. Mas a queda de velocidade obriga a subida

da densidade pela conservação de vazão mássica sem variação de área de escoamento, assim é necessário haver compressão e, portanto, a elevação da pressão também é justificada aqui. O aquecimento, por sua vez, eleva a velocidade sônica do fluido, que juntamente com a redução de velocidade significa queda de Ma, sendo esta queda obrigatoriamente a níveis subsônicos (Ma < 1). Com respeito à variação de entropia no choque, apesar de haver compressão, a subida de temperatura é dominante e a entropia molar do fluido aumentará.

Desta forma, entende-se porque o choque é irreversível. Se, após o choque, o fluido retornasse espontaneamente ao EC-1D-EI supersônico, teria de haver resfriamento e queda espontânea e adiabática de entropia o que é vetado pela Segunda Lei da Termodinâmica.

Como o frontal de choque ocorre na seção divergente da TCD, a abrupta queda do EC-1D-EI a EC-1D-E subsônico (Ma < 1), fará com que o restante da seção divergente funcione como um difusor causando compressão do fluido como visto na Eq. (2.29c) para um fluido qualquer. Assim ao longo do restante da seção divergente da TCD o fluido continuará sob compressão, aquecendo e desacelerando, embora, após o salto entrópico no choque, esta compressão devida ao efeito difusor seja praticamente isentrópica. Este comportamento será claramente observado nos resultados gerados no Cap. 5 da Dissertação.

Experimentos identificam que o frontal de choque normal em EC-1D-EI tem espessura de apenas 0.2 microns ou aproximadamente 4 vezes o percurso livre médio de uma molécula de gás. Ao longo de tão pequena distancia ocorrem grandes transformações nas variáveis do escoamento e nas propriedades do fluido, o que implica em gradientes gigantescos e acelerações locais da ordem de 10^6 g (FOX, MCDONALD e PRITCHARD, 2006). Estes fatos justificam que o frontal de choque normal seja numericamente tratado como uma descontinuidade no escoamento SS cuja posição não pode ser determinada analiticamente, i.e. depende de informação experimental.

Segundo FOX, MCDONALD e PRITCHARD (2006) e OOSTHUIZEN e CARSCALLEN (1997), a resolução do frontal de choque normal envolve determinar as condições de salto a jusante do choque (θ_{PC} , P_{PC} , v_{PC}) a partir das condições a montante do mesmo (θ_{AC} , P_{AC} , v_{AC}). Sendo conhecidas as condições a montante, as três variáveis dependentes a jusante são calculadas resolvendo-se as três equações de conservação cabíveis através do frontal, a saber: (i) Conservação da vazão mássica; (ii) Conservação da taxa total de momentum do escoamento; e (iii) Conservação da taxa de energia total do escoamento. A Segunda Lei da Termodinâmica não pode ser usada para calcular nada aqui, porque ela impõe

apenas uma desigualdade na variação de entropia através do choque. Isto é, a Segunda Lei não estipula de quanto será o salto entrópico no choque; mas sim, que tal salto deve existir e é positivo. Estas três restrições do frontal de choque normal estão respectivamente escritas nas Eqs. (2.38a), (2.38b) e (2.38c) abaixo. Devido à extensão axial microscópica do choque normal, foram desconsideradas a variação de área de seção de escoamento através do frontal e as ações de forças e de fenômenos que dependem da extensão axial do elemento para agir como a gravidade, termos de cizalhamento na parede e termos de troca térmica na parede (FOX, MCDONALD e PRITCHARD, 2006). O Leitor também deve notar que os cálculos de propriedades termodinâmicas (ρ , \overline{H} , \overline{S}) a partir da EOS do fluido não foram contabilizados como restrições (ao contrário do que é feito em FOX, MCDONALDS e PRITCHARD, (2006)), porque são exatamente isto, apenas cálculos de propriedades termodinâmicas a partir de duas variáveis dependentes (θ , P), sendo a composição \underline{Y} suposta constante e conhecida.

$$v_{PC}.\rho(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) - v_{AC}.\rho(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y}) = 0$$
(2.38a)

$$\left(P_{PC} + v_{PC}^2 \cdot \rho(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y})\right) - \left(P_{AC} + v_{AC}^2 \cdot \rho(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y})\right) = 0$$

$$(2.38b)$$

$$\left(\overline{H}(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) + M_M(\underline{Y}) \frac{v_{PC}^2}{2}\right) - \left(\overline{H}(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y}) + M_M(\underline{Y}) \frac{v_{AC}^2}{2}\right) = 0$$
(2.38c)

As restrições do frontal de choque normal constituem um sistema de equações não linear e com multiplicidade de soluções. Este sistema deve ser resolvido para o vetor de variáveis do choque $\underline{\eta}^t = [\theta_{PC} \ P_{PC} \ v_{PC}]$ através de método numérico como o Método Newton-Raphson (MNR), usado no Cap. 4 da Dissertação. O sistema de equações do choque normal é condensado na Eq. (2.39). Cabe lembrar que na resolução das Eqs. (2.39) todas as grandezas devem estar *estritamente* expressas no SI (P em Pa, M_M em kg/mol, v em m/s, etc).

$$\underline{F}(\underline{\eta}) = \underline{0} \qquad \left\{ \underline{\eta} = \begin{bmatrix} \theta_{PC} \\ P_{PC} \\ v_{PC} \end{bmatrix} \right. \tag{2.39}$$

A existência de múltiplas soluções no sistema Eq. (2.39) é provada de forma simples. Basta ver que as Eqs. (2.38a), (2.38b) e (2.38c) admitem a solução trivial $\theta_{PC} = \theta_{AC}$, $P_{PC} = P_{AC}$, $v_{PC} = v_{AC}$. Esta solução é espúria e trivial, apresentando variação de entropia nula $(\overline{S}(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) - \overline{S}(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y}) = 0)$. Portanto, esta não é a solução que interessa em um choque típico, adiabático e característicamente irreversível, que deve ter

 $\overline{S}(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) - \overline{S}(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y}) > 0$ e ser tal que $\theta_{PC} > \theta_{AC}, P_{PC} > P_{AC}, v_{PC} < v_{AC},$ $Ma_{PC} < 1 < Ma_{AC}$. Portanto o sistema Eq. (2.39) tem pelo menos duas soluções.

A variação de entalpia molar no frontal de choque normal, necessária na Eq. (2.38c), é calculada com a Eq. (2.40a) a partir do \overline{C}_P de GI e de propriedades residuais que são estimadas com a EOS apropriada.

$$\overline{H}(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) - \overline{H}(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y}) = \int_{\theta_{AC}}^{\theta_{PC}} \overline{C}_{P}' . d\theta + \overline{H}^{RES}(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) - \overline{H}^{RES}(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y})$$
(2.40a)

Se este \overline{C}_P de GI for aproximadamente constante, tem-se a Eq. (2.40b) para a mesma mudança de entalpia no choque:

$$\overline{H}(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) - \overline{H}(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y}) = \overline{C}_{P}'(\theta_{PC} - \theta_{AC}) + \overline{H}^{RES}(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) \\
- \overline{H}^{RES}(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y})$$
(2.40b)

A variação de entropia molar no frontal de choque normal é necessária para comprovar a não trivialidade da solução obtida. Ela é calculada com a Eq. (2.40c) também a partir do \overline{C}_P de GI e de propriedades residuais que são estimadas com a EOS apropriada.

$$\overline{S}(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) - \overline{S}(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y}) = \int_{\theta_{AC}}^{\theta_{PC}} \frac{\overline{C_P}'}{\theta} d\theta - R \ln\left(\frac{P_{PC}}{P_{AC}}\right) + \overline{S}^{RES}(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) \\
- \overline{S}^{RES}(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y})$$
(2.40c)

Se este \overline{C}_P de GI é constante, tem-se a Eq. (2.40d) para a variação de entropia no choque:

$$\overline{S}(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) - \overline{S}(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y}) = \overline{C}_{P}' \ln \left(\frac{\theta_{PC}}{\theta_{AC}}\right) - R \ln \left(\frac{P_{PC}}{P_{AC}}\right) + \overline{S}^{RES}(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) \\
- \overline{S}^{RES}(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y})$$
(2.40d)

Para GI com \overline{C}_P constante, as variações de entalpia e entropia no choque perdem os termos residuais ficando como mostrado nas Eqs. (2.40e) e (2.40f):

$$\overline{H}'(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) - \overline{H}'(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y}) = \overline{C}_{P}'(\theta_{PC} - \theta_{AC})$$
(2.40e)

$$\overline{S}'(\theta_{PC}, P_{PC}, \underline{Y}) - \overline{S}'(\theta_{AC}, P_{AC}, \underline{Y}) = \overline{C}_{P}' \ln\left(\frac{\theta_{PC}}{\theta_{AC}}\right) - R \ln\left(\frac{P_{PC}}{P_{AC}}\right)$$
(2.40f)

2.4.8 Resolução do Frontal de Choque Normal em EC-1D-EI com Gás Ideal

O choque normal é resolvido admitindo-se GI com composição <u>Y</u> constante, para o qual:

- EOS-GI na Eq. (2.30a);
- Identidade $\overline{C}_P' = \frac{R\gamma'}{\gamma' 1}$ válida para GI pela Eq. (2.30c) suposto \overline{C}_P' constante;
- Termos residuais de entalpia e entropia nulos nas Eqs. (2.40b) e (2.40d), i.e., utilizando-se as Eqs. (2.40e) e (2.40f);

Eqs. (2.38a), (2.38b), (2.38c) do choque são reescritas via Eqs. (2.41a), (2.41b), (2.41c):

$$\frac{P_{PC}}{\theta_{PC}}v_{PC} - \frac{P_{AC}}{\theta_{AC}}v_{AC} = 0 \tag{2.41a}$$

$$\left(P_{PC} + v_{PC}^2 \frac{P_{PC}}{\theta_{PC}} \frac{M_M}{R}\right) - \left(P_{AC} + v_{AC}^2 \frac{P_{AC}}{\theta_{AC}} \frac{M_M}{R}\right) = 0$$
(2.41b)

$$\frac{R\gamma'}{\gamma'-1}(\theta_{PC} - \theta_{AC}) + M_M(\underline{Y}) \frac{v_{PC}^2}{2} - M_M(\underline{Y}) \frac{v_{AC}^2}{2} = 0$$
 (2.41c)

Definindo-se novas variáveis como as razões adimensionais de aquecimento e de compressão através do choque, a saber: $\phi_{\theta}=\frac{\theta_{PC}}{\theta_{AC}}$, $\phi_{P}=\frac{P_{PC}}{P_{AC}}$. O sistema torna-se:

$$\phi_P v_{PC} - \phi_\theta v_{AC} = 0 \tag{2.41d}$$

$$\left(I + \frac{v_{PC}^2}{\theta_{AC}.\phi_{\theta}} \frac{M_M}{R}\right) \phi_P - \left(I + \frac{v_{AC}^2}{\theta_{AC}} \frac{M_M}{R}\right) = 0$$
(2.41e)

$$\frac{R\gamma'\theta_{AC}}{\gamma'-1}(\phi_{\theta}-1)+M_M(\underline{Y})\frac{v_{PC}^2}{2}-M_M(\underline{Y})\frac{v_{AC}^2}{2}=0$$
(2.41f)

Eliminando-se a velocidade pós-choque pela Eq. (2.41d) com $v_{PC} = v_{AC} \frac{\phi_{\theta}}{\phi_{P}}$, têm-se para as

demais equações:

$$\phi_P - I + \frac{v_{AC}^2}{\theta_{AC}} \frac{M_M}{R} \left(\frac{\phi_\theta}{\phi_P} - I \right) = 0 \tag{2.41g}$$

$$\frac{R\gamma'\theta_{AC}}{\gamma'-1}(\phi_{\theta}-1)+M_M(\underline{Y})\frac{v_{AC}^2}{2}\left(\frac{\phi_{\theta}^2}{\phi_P^2}-1\right)=0$$
(2.41h)

Com a velocidade sônica do GI na Eq. (2.30b), o quadrado do Número de Mach *imediatamente a montante* do choque é dado pela Eq. (2.41i), onde claramente $Ma_{AC}>1$:

$$Ma_{AC}^{2} = \frac{v_{AC}^{2}}{\left(\frac{R\gamma'\theta_{AC}}{M_{M}(\underline{Y})}\right)}$$
(2.41i)

Desta forma as Eqs. (2.41g) e (2.41h) ficam:

$$\phi_P - 1 + \gamma' \cdot Ma_{AC}^2 \left(\frac{\phi_\theta}{\phi_P} - 1 \right) = 0 \tag{2.41j}$$

$$\phi_{\theta} - I + \frac{(\gamma' - I)}{2} M a_{AC}^{2} \left(\frac{\phi_{\theta}^{2}}{\phi_{P}^{2}} - I \right) = 0 \tag{2.411}$$

Deve-se ter claro que as variáveis do escoamento a montante do choque ($\theta_{AC}, P_{AC}, v_{AC}, Ma_{AC}$) são conhecidas nas Eqs. (2.41j) e (2.41l). As incógnitas são apenas as razões ϕ_{θ}, ϕ_{P} . As Eqs. (2.41j) e (2.41l) também são atendidas pela solução trivial $\phi_{\theta} = I, \phi_{P} = I$ independentemente do valor de Ma_{AC} . Neste ponto uma solução analítica é possível para Eqs. (2.41j) e (2.41l) após manipulação algébrica e mudança de variáveis. No caso, resolvem-se Eqs. (2.41j) e (2.41l) para novas variáveis ϕ_{P} , $\lambda = \frac{\phi_{\theta}}{\phi_{P}}$. As equações

tornam-se:

$$\phi_P - 1 + \gamma' \cdot Ma_{AC}^2(\lambda - 1) = 0$$
 (2.41m)

$$\lambda \phi_P - I + \frac{(\gamma' - I)}{2} M a_{AC}^2 (\lambda^2 - I) = 0$$
 (2.41n)

Substituindo-se Eq. (2.41m) em (2.41n) após resolução para ϕ_P , tem-se a Eq. (2.41o):

$$\lambda \left(1 - \gamma' M a_{AC}^2 (\lambda - 1) \right) - 1 + \frac{(\gamma' - 1)}{2} M a_{AC}^2 (\lambda^2 - 1) = 0$$
 (2.41o)

Eq. (2.41o) pode ser dividida por $(\lambda-I)$, eliminando o risco da solução trivial $(\lambda=I)$, e deixando uma equação linear para λ na Eq. (2.41p):

$$1 - \gamma' M a_{AC}^2 \lambda + \frac{(\gamma' - 1)}{2} M a_{AC}^2 (\lambda + 1) = 0$$
 (2.41p)

Cuja solução é:

$$\lambda = \frac{2 + (\gamma' - 1)Ma_{AC}^2}{(\gamma' + 1)Ma_{AC}^2}$$
 (2.41q)

Assim, com (2.41m), tem-se

$$\phi_P = \frac{1 - \gamma' + 2\gamma' M a_{AC}^2}{\left(\gamma' + 1\right)} \tag{2.41r}$$

A razão de aquecimento no choque é encontrada com $\lambda = \frac{\phi_{\theta}}{\phi_{P}}$:

$$\phi_{\theta} = \frac{\left(2 + (\gamma' - 1)Ma_{AC}^2\right)\left(1 - \gamma' + 2\gamma'Ma_{AC}^2\right)}{(\gamma' + 1)^2Ma_{AC}^2}$$
(2.41s)

Por fim a velocidade do escoamento pós-choque segue com $v_{PC} = v_{AC} \frac{\phi_{\theta}}{\phi_{P}}$:

$$v_{PC} = v_{AC} \left(\frac{2 + (\gamma' - 1) M a_{AC}^2}{(\gamma' + 1) M a_{AC}^2} \right)$$
 (2.41t)

E o respectivo Número de Mach segue por:

$$\frac{v_{PC}}{\sqrt{\frac{\gamma'R\theta_{PC}}{M_M}}} = \frac{v_{AC}}{\sqrt{\frac{\gamma'R\theta_{AC}\phi_{\theta}}{M_M}}} \left(\frac{2 + (\gamma' - 1)Ma_{AC}^2}{(\gamma' + 1)Ma_{AC}^2}\right)$$
(2.41u)

Ou, com (2.41s) e (2.41i):

$$Ma_{PC} = \sqrt{\frac{2 + (\gamma' - I)Ma_{AC}^2}{1 - \gamma' + 2\gamma'Ma_{AC}^2}}$$
 (2.41v)

A solução das Eqs. (2.41d) a (2.41f) para as razões de salto ϕ_{θ} , ϕ_{P} , $\frac{v_{PC}}{v_{AC}} = \frac{\phi_{\theta}}{\phi_{P}}$, Ma_{PC} , mostradas nas Eqs. (2.41r), (2.41s), (2.41t) e (2.41v) estão corretas. Um indicativo desta correção é o fato de todas estas equações reproduzirem, consistentemente, o resultado $\phi_{\theta} = 1$, $\phi_{P} = 1$, $\frac{v_{PC}}{v_{AC}} = 1$, $Ma_{PC} = 1$ quando é usado $Ma_{AC} = 1$. Esta não é a (citada anteriormente) solução trivial, que foi removida pela divisão utilizada na passagem da Eq. (2.41p). É, de fato, a solução do choque para as condições da garganta (*throat*), que equivalem a dizer que não há choque quando $Ma_{AC} = 1$. Isto é, o choque só poderá ocorrer quando $Ma_{AC} > 1$. Outro indicativo da correção das Eqs. (2.41r), (2.41s), (2.41t) e (2.41v) é apresentada na Figura 22, onde são locados ϕ_{θ} , ϕ_{P} , $\frac{v_{PC}}{v_{AC}} = \frac{\phi_{\theta}}{\phi_{P}}$, Ma_{PC} versus $Ma_{AC} \in [1,2.8]$

para CH₄ e CO₂. Verifica-se na **Figura 22** que sempre se têm, consistentemente, $\phi_{\theta} > 1$, $\phi_{P} > 1$, $\frac{v_{PC}}{v_{AC}} = \frac{\phi_{\theta}}{\phi_{P}} < 1$, $Ma_{PC} < 1$ para $Ma_{AC} > 1$.

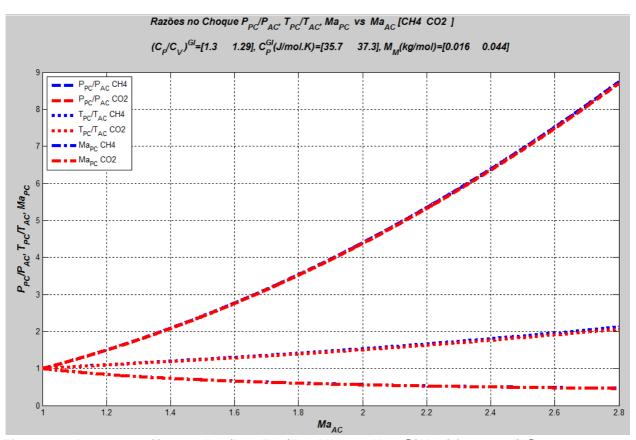


Figura 22: Razões no Choque P_{PC}/P_{AC} , T_{PC}/T_{AC} , Ma_{PC} vs Ma_{AC} [CH₄, CO₂ como GI]

Por fim cabe verificar se esta teoria de choque normal cumpre a Segunda Lei da Termodinâmica. Como o Choque ocorre adiabaticamente e é irreversível, a entropia molar do fluido deverá saltar positivamente quando este cruza o frontal de choque. No caso, abordando o choque com GI, a variação de entropia molar segue pela Eq. (2.40f). Com $\overline{C}_P{}' = \frac{R\gamma'}{\gamma'-1}$ e substituindo-se as razões de choque para temperatura e pressão tem-se a Eq. (2.41x).

$$\frac{\Delta \overline{S}'^{Choque}}{R} = \left(\frac{\gamma'}{\gamma' - 1}\right) \ln \phi_{\theta} - \ln \phi_{P} \tag{2.41x}$$

As Eqs. (2.41r) e (2.41s) definem a variação de entropia molar no choque como:

$$\frac{\Delta \overline{S}'^{Choque}}{R} = \left(\frac{\gamma'}{\gamma' - 1}\right) ln \left(\frac{\left(2 + (\gamma' - 1)Ma_{AC}^2\right)\left(1 - \gamma' + 2\gamma'Ma_{AC}^2\right)}{(\gamma' + 1)^2 Ma_{AC}^2}\right) - ln \left(\frac{1 - \gamma' + 2\gamma'Ma_{AC}^2}{\gamma' + 1}\right)$$

$$(2.41z)$$

A variação de entropia molar no choque pela Eq. (2.41z) como GI é traçada na **Figura 23** em função do Número de Mach imediatamente antes do frontal (Ma_{AC}) para CH₄ e CO₂. É possível verificar que a solução do choque nas Eqs. (2.41r), (2.41s), (2.41t) e (2.41v) é coerente com a Segunda Lei da Termodinâmica, sendo obtidas variações de entropia sempre positivas e crescentes com Ma_{AC} . Isto indica que a instabilidade do escoamento SS realmente aumenta à medida que Ma_{AC} cresce acima de 1, porque a variação de entropia associada com a quebra do regime SS cresce como visto na **Figura 23**. Isto é, o escoamento SS é eminentemente instável porque há uma alternativa competidora com maior entropia que pode ser acessada adiabaticamente através do choque. Também é visível que a "pressão termodinâmica" para "quebrar" o escoamento SS cresce com Ma_{AC} , ou seja, como dito anteriormente, a instabilidade do escoamento supersônico cresce com Ma_{AC} .

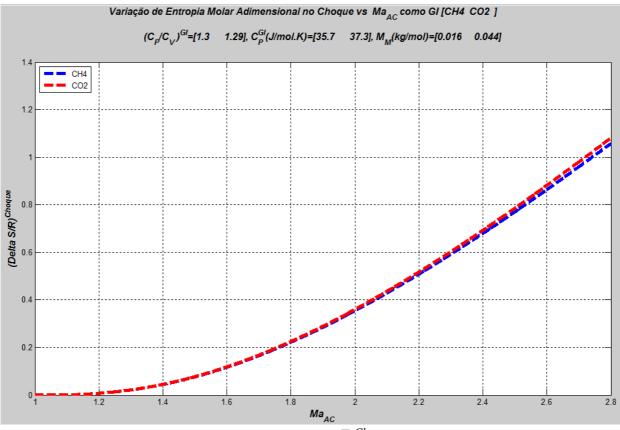


Figura 23: Salto de Entropia Molar no Choque $\frac{\Delta \overline{S}^{rChoque}}{R}$ vs Ma_{AC} [CH₄, CO₂ como GI]

As fórmulas aqui apresentadas para análise completa de choque normal em EC-1D-EI com GI, expressas na Eqs. (2.41r), (2.41s), (2.41t), (2.41v) e (2.41z) não são comuns em livros textos clássicos. Uma análise similar, com mesmo resultado final, foi encontrada apenas no Cap. 5 de OOSTHUIZEN e CARSCALLEN (1997).

As Eqs. (2.41r), (2.41s), (2.41t), (2.41v) e (2.41z), podem agora ser usadas para recalcular os exemplos de resposta da tubeira convergente-divergente (TCD) nas **Figuras 13 e 14** com EC-1D-EI supersônico para CH₄ e CO₂ como GI. Exceto que agora será admitindo, como na realidade ocorre, um frontal de choque normal em algum ponto da seção divergente quebrando o EC-1D-EI irreversivelmente a regime subsônico.

A posição do frontal de choque é um fator importante que obviamente afeta os resultados. Todavia ela é tão fácil de ser prevista como seria fácil prever o ponto em que um material metaestável executa uma transição adiabática irreversível rumo a uma configuração de maior entropia. Em outras palavras, não é possível calcular o ponto de manifestação do choque, havendo total analogia entre a metaestabilidade do EC-1D-EI supersônico e fenômenos similares da Termodinâmica envolvendo materiais metaestáveis.

Um material metaestável é localmente estável mas não globalmente estável, pois há outra configuração de maior entropia acessível por transição adiabática irreversível. Na eventualidade de pequena perturbação, a transição ocorre e o material se altera irreversivelmente com "saltos" de temperatura, densidade, compressibilidade e entropia, sendo conservadas a massa, composição global (sob ausência de reações químicas) e entalpia total. Um exemplo é o resfriamento de água líquida abaixo de 0°C a 1 atm, que pode ser feito cuidadosamente até vários graus Celsius abaixo de 0°C sem congelamento. Mas tal estado é globalmente instável porque pequenas perturbações mecânicas, báricas, sônicas, térmicas ou materiais podem agir sobre o líquido subresfriado deflagrando congelamento súbito até uma extensão compatível com a entalpia disponível, sendo acompanhado de aumento da temperatura (de volta a 0°C) e da entropia do material.

Portanto a posição do choque no bocal divergente da TCD só pode ser determinada experimentalmente para determinados modelos de equipamento e condições de escoamento. Para isto, submetem-se modelos da TCD a condições de EC-1D com similaridade dinâmica ao caso de interesse (FOX, MCDONALD e PRITCHARD, 2006). Cada tipo de projeto TCD favorece ou retarda a aparição do choque ao longo do eixo da seção divergente da TCD. A transição supersônico-subsônico é agravada pelo fato da *backpressure* da TCD ser muito superior à pressão da garganta da TCD; ou seja, a instabilidade do regime SS cresce pelo fato de haver pressão mais alta a jusante.

Para fins de exemplificação nesta revisão, será admitido que o frontal de choque ocorre na seção divergente da TCD quando o Número de Mach atingir $Ma_{AC}=2$ onde " $_{AC}$ " refere-se à condição imediatamente pré-frontal. As Figuras 24, 25, 26, 27, 28, 29 e 30 apresentam perfis

na TCD da **Figura 12** para CH₄ e CO₂ como GI sob ocorrência do frontal em Ma_{AC} =2. Ou seja, estas figuras complementam os anteriores perfis para EC-1D-EI nas **Figuras 15 a 22** que admitiam escoamento isentrópico prevalecendo até a descarga da TCD. As **Figuras 24 a 31** foram traçadas mantendo-se os perfis EC-1D-EI das **Figuras 15 a 22** anteriores até Ma_{AC} =2 determinando assim a posição axial do frontal x^{Choque} . Em x^{Choque} aplicam-se as condições de salto das Eqs. (2.41r), (2.41s), (2.41t), (2.41v) obtendo-se valores pós-choque θ_{PC} , P_{PC} , v_{PC} , c_{PC} , Ma_{PC} caracterizados pelas descontinuidades mostradas. As condições θ_{PC} , P_{PC} , v_{PC} , c_{PC} , Ma_{PC} definem agora a condição de referência " $_R$ " para completar-se o cálculo do EC-1D-EI no restante divergente da TCD pelas Eqs. (2.33j), (2.33k) e (2.33l), sendo a primeira utilizada para o perfil Ma e as demais para os perfis θ e P. A relação entre posição x e área de escoamento está nas Eqs. (2.34). No restante divergente da TCD pós-choque o escoamento é subsônico havendo pelas Eqs. (2.29c) compressão, mais aquecimento e mais redução de velocidade e de Ma. Os saltos em velocidades sônicas e os respectivos perfis nos trechos EC-1D-EI são calculados a partir dos respectivos saltos e perfis de temperatura pela Eq. (2.30b).

A Figura 24 traz perfis de Número de Mach ao longo da TCD com choque. Devido à geometria o valor de saída Ma=0.2 é superior ao de entrada, fazendo com que o fluido deixe a TCD com maior energia cinética molar comparativamente à mesma entrada, consequentemente estará um pouco mais frio que naquela. A Figura 25 mostra perfis de temperatura ao longo da TCD com choque. Como a entalpia GI não depende da pressão, o fluido deixa a TCD quase na mesma temperatura de entrada, estando apenas alguns graus mais frio pela conservação de energia associada com a maior carga cinética de saída relativamente à entrada. Todo o profundo frio de quase -90°C do escoamento SS em Ma=2 simplesmente desaparece no frontal de choque com a recuperação de entalpia do fluido ao desacelerar bruscamente. Os perfis de pressão são vistos na Figura 26 para TCD com choque em Ma=2. A razão de compressão adiabática no choque é superior a 5, explicando o súbito aquecimento de ≈100°C no frontal e a súbita perda de velocidade pelo aumento de densidade. No restante da TCD a pressão continua se elevando isentropicamente, de modo que o fluido emerge a 2/3 da pressão de entrada, enquanto no âmago do escoamento SS a pressão desce a quase 1/10 da entrada. Os perfis de velocidade e de velocidade sônica são mostrados nas Figuras 27 e 28. Os perfis CH₄ e CO₂, antes juntos nos gráficos *Ma vs x*, agora se separam devido à grande diferença de velocidade sônica entre CH₄ e CO₂ por conta da grande diferença de massas molares. Por fim, as Figuras 29 e 30 trazem perfis de temperatura e pressão escalados pelas respectivas condições de garganta.

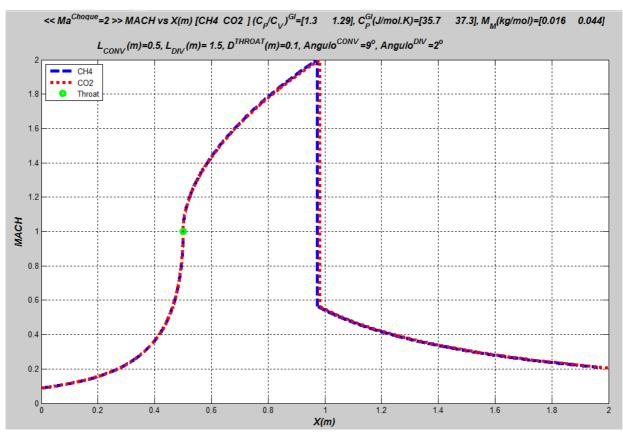


Figura 24: Perfis Ma vs x na TCD da Fig. 13 – Choque em Ma_{AC}=2 [CH₄, CO₂ sob GI]

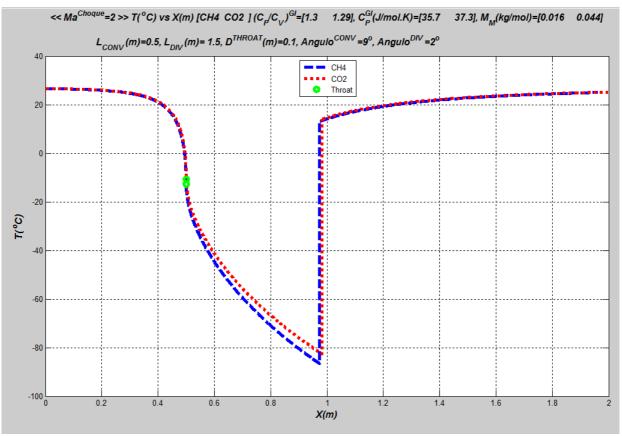


Figura 25: Perfis $T(^{\circ}C)$ vs x na TCD da Fig. 13 – Choque em $Ma_{AC}=2$ [CH₄, CO₂ sob GI]

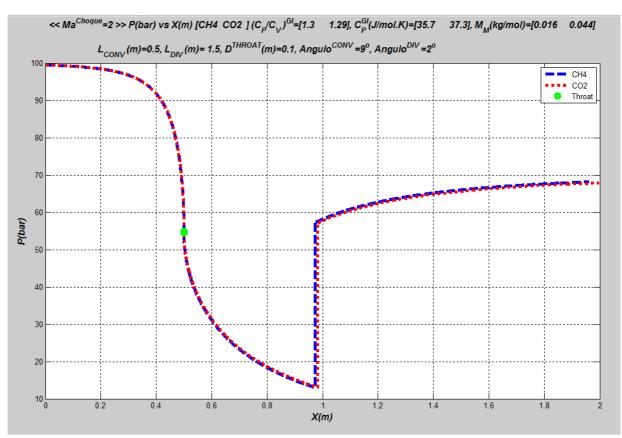


Figura 26: Perfis P(bar) vs x na TCD da Fig. 13 – Choque em $Ma_{AC}=2$ [CH₄, CO₂ sob GI]

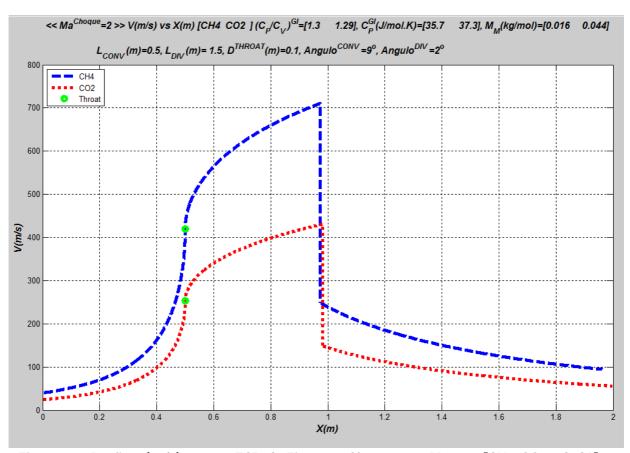


Figura 27: Perfis v(m/s) vs x na TCD da Fig. 13 – Choque em $Ma_{AC}=2$ [CH₄, CO₂ sob GI]

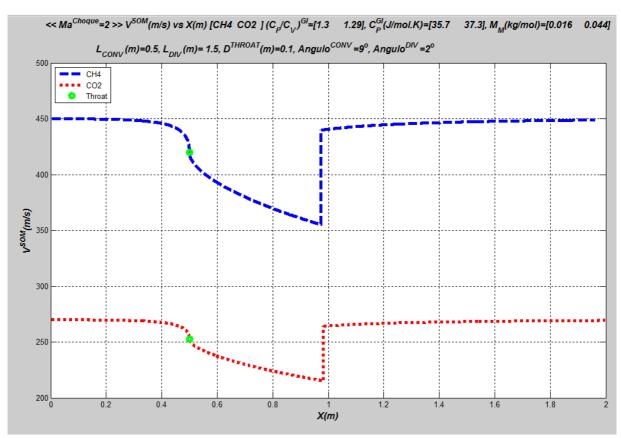


Figura 28: Perfis c(m/s) vs x na TCD da Fig. 13 – Choque em $Ma_{AC}=2$ [CH₄, CO₂ sob GI]

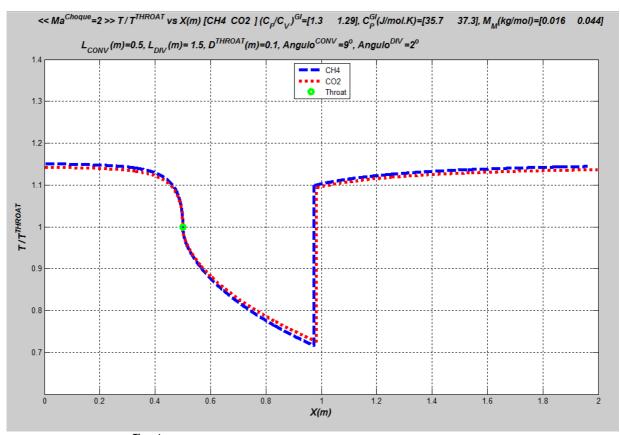


Figura 29: T/T^{Throat} vs x na TCD da Fig. 13 – Choque em $Ma_{AC}=2$ [CH₄, CO₂ sob GI]

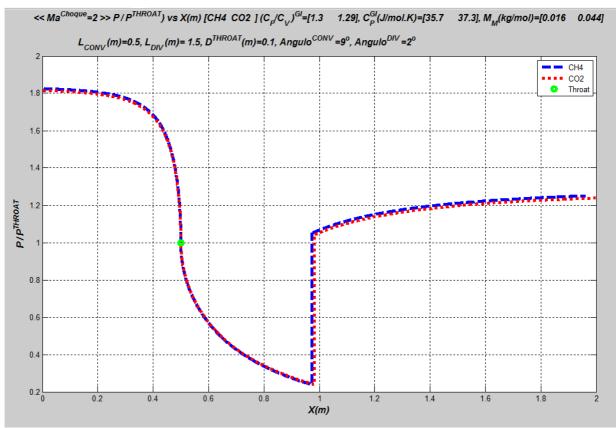


Figura 30: P/P^{Throat} vs x na TCD da Fig. 13 – Choque em $Ma_{AC}=2$ [CH₄, CO₂ sob GI]

2.5 PROCESSO DE SEPARAÇÃO SUPERSÔNICA2.5.1 Introdução

Como visto na seção anterior, o 3S acelera um fluido compressível pressurizado até velocidades supersônicas pela expansão em uma tubeira convergente-divergente (TCD). A rápida elevação da energia cinética do fluido gera uma instantânea redução de entalpia, forçando a queda de temperatura, e promovendo a separação dos componentes mais pesados do gás por condensação e congelamento.

O 3S também tem sido analisado através de fluidodinâmica computacional (CFD). Estes estudos costumam ser realizados para investigação do impacto que detalhes construtivos do equipamento (p.ex: posição do coletor de líquido em relação à garganta) possam ter na eficiência do mesmo. Uma forma comum de caracterizar a condensação do gás em CFD é através de um processo de nucleação. Este processo considera que após o fluido alcançar uma condição de P e T que possibilite a condensação uma determinada partícula de condensado pode se tornar o núcleo de uma gota (PRAST, LAMMERS, BETTING, 2006).

Em outro estudo (DENGYU et. al., 2010) verificou-se que esta nucleação no 3S é diretamente impactada pela taxa de resfriamento alcançada, quanto maior o resfriamento, maior a saturação, concordando assim, com a referência anterior. Este mesmo trabalho também indica que a liberação de calor latente devido à condensação do gás reduz a velocidade do fluido por uma razão óbvia que é o aumento de densidade do fluido multifásico em comparação a um gás monofásico. Basicamente, esta liberação de calor tende a aumentar a temperatura do fluido ou tende a evitar que ela caia mais rapidamente, prejudicando a performance de resfriamento criado no 3S.

Para não prejudicar a eficiência de separação no 3S, o frontal de choque normal deve ocorrer próximo à entrada do difusor, após o líquido já ter sido separado do gás (WEN et. al, 2010). Esse estudo demonstrou o impacto que a localização da remoção de líquido tem na eficiência de separação. Tendo em vista que a recompressão devido ao choque normal leva ao aquecimento do gás, o líquido condensado pela expansão re-vaporizaria impedindo portanto a separação. Ou seja, para que seja possível remover o líquido do gás, o coletor deve estar a montante do frontal de choque normal. Esta mesma referência indica que quanto maior a recuperação de pressão alcançada na saída do 3S, mais próximo à garganta ocorreu o choque.

Os estudos anteriores em CFD corroboram alguns conceitos e comportamentos verificados nesta dissertação. No entanto o objetivo do presente estudo é analisar o escoamento e o ELV ao longo do 3S do ponto de vista de simulação de processos químicos

estacionários utilizando ferramenta apropriada para este contexto que são os simuladores profissionais de processos químicos amplamente difundidos na comunidade de engenharia química.

O equipamento 3S mostrado na **Figura 8** combina os efeitos de expansão, separação gás/líquido por ciclones e recompressão (MOKHATAB, et al., 2006), conforme pode ser verificado na própria figura. Atualmente este equipamento possui as seguintes aplicações (BROWER e EPSOM, 2003):

- Desidratação de gás natural;
- Ajuste de ponto de orvalho de GN;
- Extração de líquido de gás natural (LGN);
- Redução de poder calorífico.

Ainda de acordo com os autores, novas aplicações estão em estudo com 3S, tais como:

- Tratamento de gás combustível para instalações *offshore*;
- Pré-tratamento para remoção de CO₂ e de H₂S de GN, antes de operações de adoçamento com membranas e absorção com aminas;

No próximo item serão discutidas com mais detalhes as características do 3S.

2.5.2 Características do separador

A aceleração do fluido no 3S é um processo quase isentrópico com mudança de fase, podendo ser modelado ao longo da direção axial através de uma sucessão de resoluções de *flashes* pressão-entropia, *flash* (P,\overline{S}), corrigidos por eficiência adiabática para considerar as pequenas irreversibilidades do escoamento. Portanto, do ponto de vista termodinâmico, possui um comportamento similar ao processo de turbo-expansão, sendo a principal diferença entre eles o fato de que o separador 3S transforma a entalpia do fluido em energia cinética com Ma>1, enquanto o turbo expansor transforma entalpia do fluido em energia mecânica no eixo da turbina (SCHINKELSHOEK e EPSOM, 2008). Outras fontes também consideram que o processo termodinâmico do 3S segue este caminho, dentre os quais destaca-se o GPSA, que inclusive menciona que este processo costuma ter cerca de 90% de eficiência adiabática (GPSA, 2004).

No entanto, em algum ponto da seção divergente da TCD do 3S, ocorre o fenômeno de choque normal supersônico. No frontal de choque normal o fluido é abruptamente

desacelerado até velocidade subsônica, recuperando parte da pressão e temperatura iniciais (FOX, MACDONALD e PRITCHARD, 2006; ANDERSON, 1990). O frontal de choque normal é caracterizado por descontinuidades nas variáveis do escoamento, como os perfis de temperatura, pressão e velocidade, e nos perfis de propriedades do fluido como densidade, entalpia e entropia. Estas grandezas apresentam um salto no frontal de choque (temperatura, pressão e densidade se elevam, e a velocidade cai a um valor sub-sônico), enquanto que as grandezas conserváveis se mantêm constantes (vazão mássica, composição do gás, e as taxas de energia total e de momentum da corrente). Outro fato importante associado ao frontal de choque normal é que ele é essencialmente um fenômeno irreversível que ocorre adiabaticamente, sendo, portanto, caracterizado por aumento da entropia específica do gás; isto é, sob nenhuma circunstancia a passagem do escoamento pelo choque poderá ser considerada isentrópica. O choque ocorre porque o escoamento compressível supersônico é essencialmente um regime instável, sendo esta instabilidade tanto maior quanto maior estiver o Número de Mach acima de 1 (FOX, MACDONALD e PRITCHARD, 2006).

Pela **Figura 31** podem ser identificadas as diferentes seções do 3S TwisterTM (BROUWER, EPSOM e TWISTER BV, 2003).

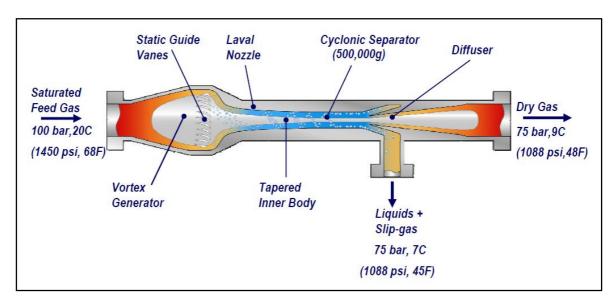


Figura 31: 3S Twister™ (Fonte: Twister BV, 2003)

- Uma tubeira convergente-divergente (TCD) onde o gás é acelerado até velocidade supersônica (tipicamente Ma≈2). Neste ponto, o gás se encontrará em baixa temperatura e pressão resultando em condensação parcial.
- Chicanas e aletas estacionárias (vanes) são instaladas na entrada da TCD para promover vórtice de elevado RPM, que é necessário para produzir um campo

centrífugo de alta intensidade de modo a forçar os materiais de maior densidade (condensado e sólidos) em direção às paredes do 3S para serem recolhidos pelas saídas laterais, deixando o gás condicionado próximo ao centro da TCD.

- Após as saídas de condensado, no difusor divergente há a região onde ocorre o choque supersônico normal que "quebra" subitamente o escoamento supersônico a subsônico. Este processo ocorre de forma irreversível e adiabática havendo conservação da energia total da corrente (entalpia + energia cinética) e criação de entropia. No choque, a carga cinética supersônica é transformada em grande parte em entalpia, havendo redução drástica de velocidade, aquecimento e recompressão do fluido. Após o choque, seguindo o difusor divergente a corrente de gás é desacelerada ainda mais e recupera parte da pressão de entrada (de 1/2 a 2/3).
- A corrente de material condensado e/ou solidificado que sai do 3S lateralmente contém ainda uma parcela de gás (Slip Gas). Este gás é separado do líquido em um vaso separador (não mostrado) e é então misturado ao gás condicionado de saída do 3S.

A etapa de recompressão inicia-se com a formação do frontal de choque normal supersônico no 3S. Esta transformação obedece às seguintes restrições:

- Vazão mássica e composição do fluido se mantêm constantes;
- Taxa de energia total do gás (entalpia + energia cinética) se mantém constante;
- Taxa de momentum do escoamento se mantém constante;
- A entropia específica do fluido se eleva após o choque;
- Descontinuidades (saltos) em temperatura, pressão, velocidade e densidade.

Em geral, o 3S é um equipamento compacto com, tipicamente, comprimento de 2m e 0,15m de diâmetro, sendo capaz de tratar até 35MMscfd de gás a 100bar. Outra característica importante é que devido ao baixo tempo de residência e ao elevado campo centrífugo, em caso de estar o gás de entrada com água, não haverá retenção de sólidos (hidratos + gelo) no interior do 3S. Todo o hidrato e gelo formados escoarão diretamente para as paredes do 3S sendo separados juntamente com a fase líquida de condensado. Por último, cabe citar também que devido ao 3S não possuir partes móveis, a confiabilidade do mesmo é maior, e portanto acarreta menores custos de manutenção (BROUWER, EPSOM e TWISTER BV, 2003). Considerando que não há retenção de hidratos ou gelo dentro do separador, o 3S dispensaria a utilização de plantas de desidratação como pré-requisito para sua operação, sendo ele o

próprio responsável pela desidratação do gás. Somando-se isto ao fato de que o 3S é um equipamento relativamente pequeno, robusto e com baixa necessidade de manutenção comparativamente a outros processos, ele se torna uma opção cada vez mais interessante para condicionar gás natural em contexto *offshore* e *sub-sea*.

2.5.3 Caracterização do escoamento no separador supersônico

São poucos os trabalhos na literatura analisando a modelagem e o desempenho 3S. Inevitavelmente, há abordagens via modelos simples como GI, comuns em livros de Mecânica de Fluidos como FOX, MACDONALD e PRITCHARD (2006), mas que não são apropriadas para 3S com mudança de fase e ELV ou ESLV ponto a ponto. Um destes trabalhos é MAHMOODZADEH VAZIRI et al (2010) que apresentam três abordagens distintas para o escoamento adiabático no 3S: processo isentrópico, escoamento isentrópico com choque não-isentrópico e processo não isentrópico.

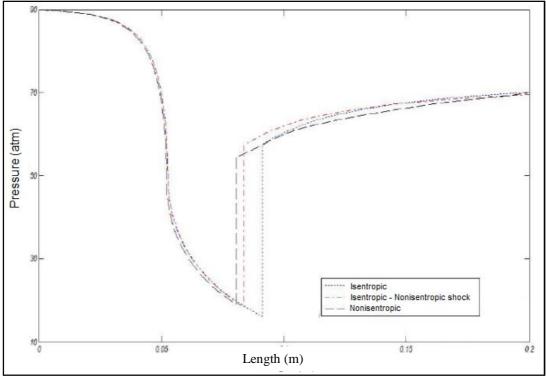


Figura 32: Perfil de pressão ao longo do 3S para três cenários (Mahmoodzadeh Vaziri et al; 2010)

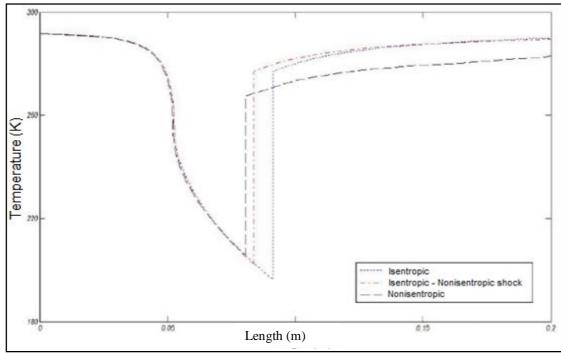


Figura 33: Perfil de temperatura ao longo do 3S para três cenários (Mahmoodzadeh Vaziri et al; 2010)

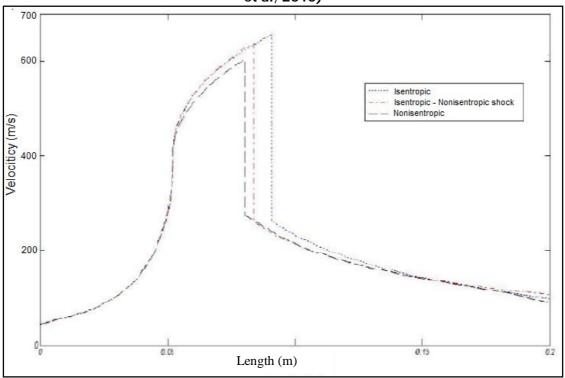


Figura 34: Perfil velocidade ao longo do 3S para três cenários (Mahmoodzadeh Vaziri et al; 2010)

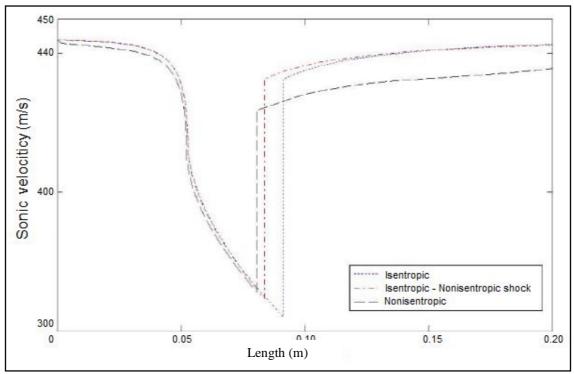


Figura 35: Perfil de velocidade sônica no 3S para três cenários (Mahmoodzadeh Vaziri et al; 2010)

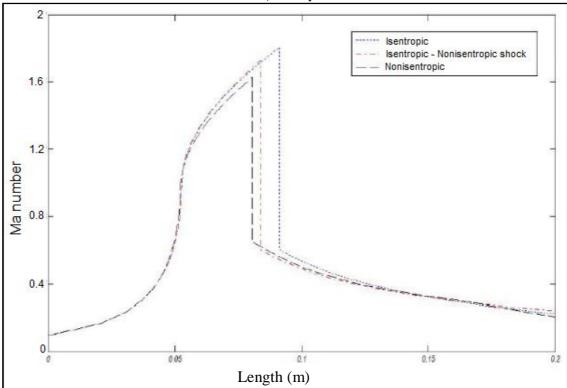


Figura 36: Perfil de Número de Mach no 3S para três cenários (Mahmoodzadeh Vaziri et al; 2010)

A Figura 32, a Figura 33, a Figura 34, a Figura 35 e a Figura 36 apresentam os principais perfis calculados que caracterizam o 3S de acordo com MAHMOODZADEH VAZIRI et al (2010). Este trabalho apresenta diversos pontos questionáveis em certos

aspectos, todavia é um trabalho em modelagem 3S e será aqui analisado. Há erros algébricos em algumas equações e alguns erros de consistência dimensional entre as equações e a tabela de definição de nomenclatura apresentada no trabalho. Em todos os casos é possível identificar a ocorrência do choque supersônico através da descontinuidade dos perfis na zona de Número de Mach maior que 1. Todavia, apesar de inerentemente irreversível, e de envolver saltos em temperatura, pressão e velocidade (Figuras 32 a 36) o frontal de choque é tratado de maneira diferente em cada caso e sempre de maneira não ortodoxa com respeito ao apresentado na Seção 2.4. No caso isentrópico, por exemplo, os cálculos do frontal de choque são executados especificando-se a pressão de descarga do 3S e resolvendo-se as restrições do choque de conservação de massa, energia e momento linear, adicionadas de restrições de entropia constante na seção divergente entre a garganta da tubeira (*throat*) e a posição préchoque; e entre a posição pós-choque e a descarga do 3S. Nos demais casos, as equações de conservação do choque são anexadas de uma equação que estima a vazão do choque a partir da diferença de pressão entre os dois lados do choque como um bocal subsônico.

KARIMI e ABDI (2009) avaliaram a eficiência do 3S para desidratação de gás natural. O foco deste trabalho foi analisar o comportamento do escoamento ao longo do 3S e determinar a posição de ocorrência do choque normal supersônico, utilizando modelagem rigorosa para o choque cujas equações não-lineares foram resolvidas pelo Método Newton-Raphson (MNR) programado em MATLABTM. O cálculo de propriedades termodinâmicas do fluido foi conduzido via acesso em modo de execução ao simulador de processos HYSYSTM (versão 2006) com PR-EOS. O modelo proposto pelos autores utilizava como especificações a geometria do 3S (diâmetros de entrada, de saída e da garganta, ângulos convergente e divergente e o comprimento), vazão e composição do fluido (95% CH4, 230 ppm de água, e o restante da composição em etano e propano), condições de entrada e a recuperação de pressão na saída do separador. KARIMI e ABDI (2009) utilizaram a recuperação de pressão como especificação, pois para o cálculo do 3S, é necessário especificar uma das seguintes informações: pressão ou Mach de ocorrência do choque ou pressão de saída. Assim, tendo em vista que o foco foi determinar a localização do choque, optou-se pela especificação da recuperação de pressão do 3S. Os autores mostram que para alcançar altos valores de recuperação de pressão, o choque normal deverá ocorrer próximo à garganta, e quanto mais próximo à saída do 3S estiver o choque, menor será a recuperação de pressão. Isso implica que o valor máximo de recuperação de pressão ocorrerá quando o choque se der na garganta. KARIMI e ABDI (2009) também analisam o impacto da recuperação de pressão na remoção

de água do gás, mostrando que remoção de água do gás cresce com a redução na recuperação de pressão.

As **Figuras 37 a 41** apresentam os perfis obtidos pelo modelo proposto em KARIMI e ABDI (2009) e os resultados obtidos por CFD no software Fluent. Assim como no estudo anterior, o ponto de ocorrência do choque supersônico é definido pela descontinuidade nos perfis e é justamente neste ponto onde ocorre a maior parte da recuperação da pressão de entrada.

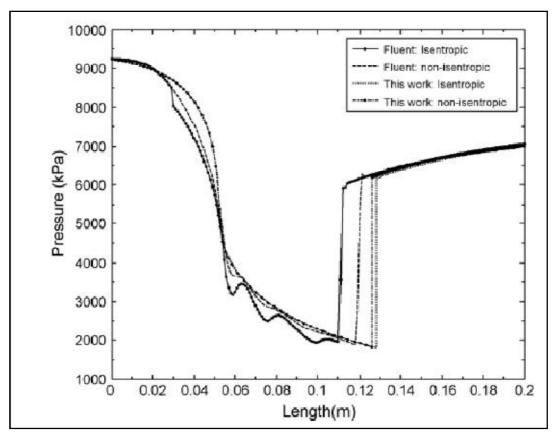


Figura 37: Perfil de pressão comparado com software de CFD (KARIMI e ABDI; 2009)

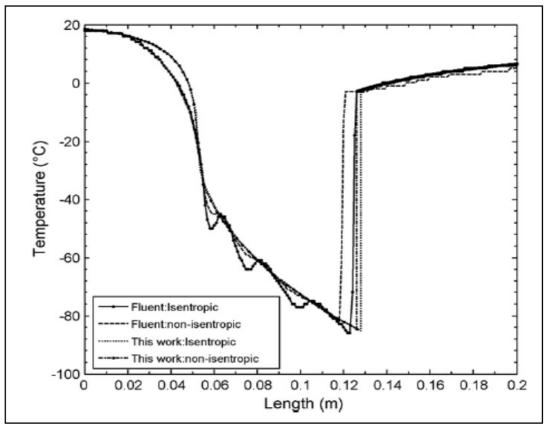


Figura 38: Perfil de temperatura comparado com software CFD (KARIMI e ABDI; 2009)

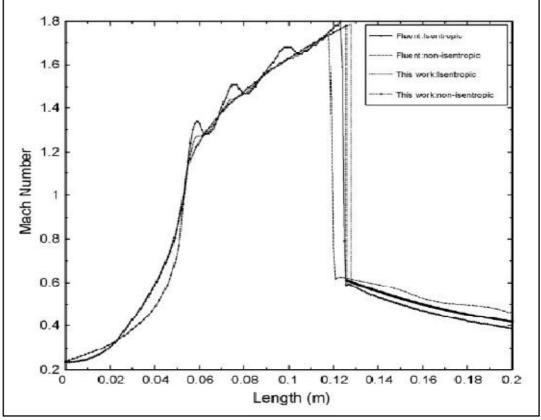


Figura 39: Perfil de Número de Mach comparado com software de CFD (KARIMI e ABDI; 2009)

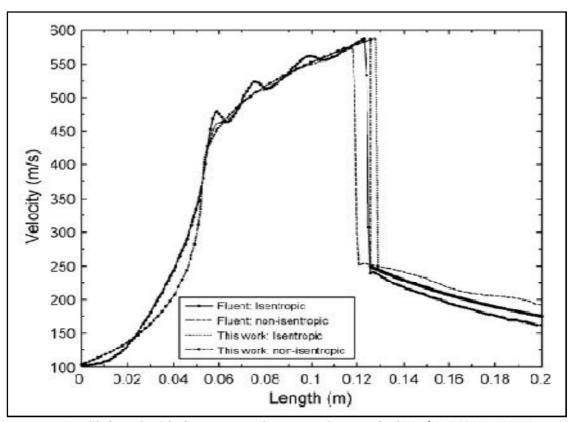


Figura 40: Perfil de velocidade comparado com software de CFD (KARIMI e ABDI; 2009)

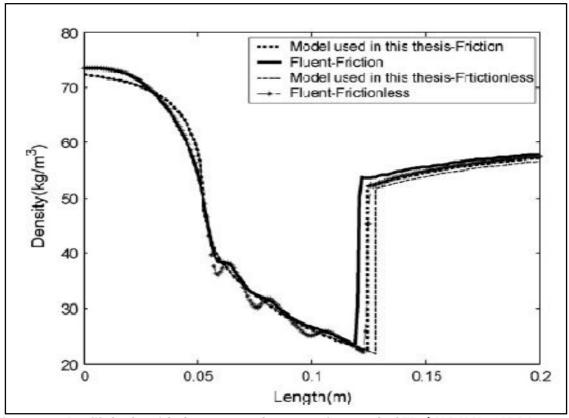


Figura 41: Perfil de densidade comparado com software de CFD (KARIMI e ABDI; 2009

2.5.4 Comparação entre o processo de separação supersônica e outros processos para tratamento de gás natural

De acordo com SCHINKELSHOECK e EPSOM (2008), O separador 3S TWISTER apresenta uma maior eficiência na recuperação de hidrocarbonetos com mais de três átomos de carbono do que o processo JT. A **Figura 42** apresenta esta análise.

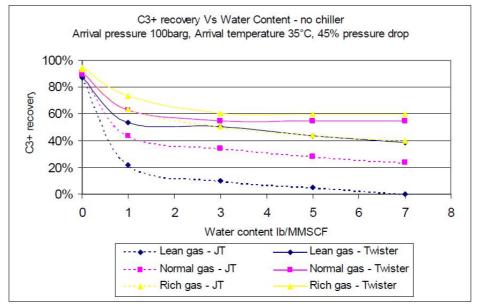


Figura 42: Comparação entre os processos JT e 3S para separação de LGN (Fonte: SCHINKELSHOECK e EPSOM; 2008)

A **Figura 43** apresenta uma comparação entre a variação de temperatura alcançada para uma dada expansão, entre os processos 3S, JT e TE (ALFYOROV et al., 2005). Como o 3S alcança uma menor temperatura para uma mesma queda de pressão, 3S gera maior condensação, o que permite maior recuperação de LGN, como também mostrado na **Figura 44**.

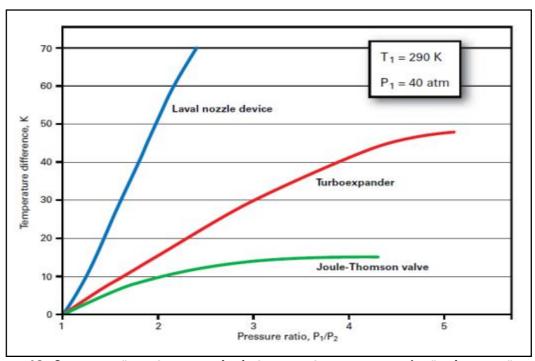


Figura 43: Comparação entre a queda de temperatura com a variação de pressão para diferentes tecnologias (Fonte: ALFYOROV et al., 2005)

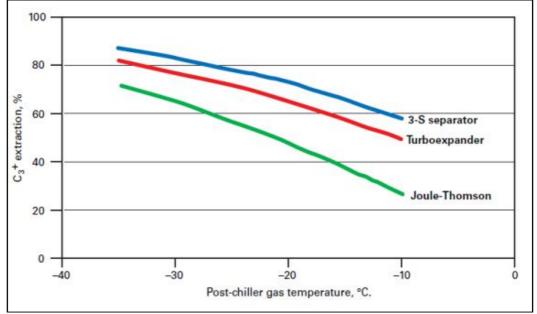


Figura 44: Comparação entre as eficiências de remoção de hidrocarbonetos com mais de três átomos de carbono para diferentes tecnologias (Fonte: ALFYOROV et al., 2005)

Outro estudo comparativo entre o processo JT e o 3S utilizando um gás natural saturado com água para o processamento indica que a principal vantagem do ponto de vista econômico em favor de 3S é que para operar JT foi necessário desidratar o gás, tendo em vista que havia a possibilidade de formação de hidratos (MACHADO, et al., 2012). Portanto, JT necessitou de mais equipamentos e de mais operadores do que a alternativa 3S. No entanto, o mesmo

estudo indicou que mesmo JT necessitando de mais equipamentos e operadores do que 3S, este necessita de CAPEX e OPEX superiores. Explica-se isto pela necessidade de um compressor de entrada para viabilizar 3S.

MALYSHIKNA (2010) evidenciaram a dependência da recuperação de pressão em 3S termos do Número de Mach do gás no ponto conhecido como pré-choque (Ma_{AC}) e em termos da temperatura de entrada do gás (**Figura 45**, **Figura 46**, **Figura 47** e **Figura 48**).

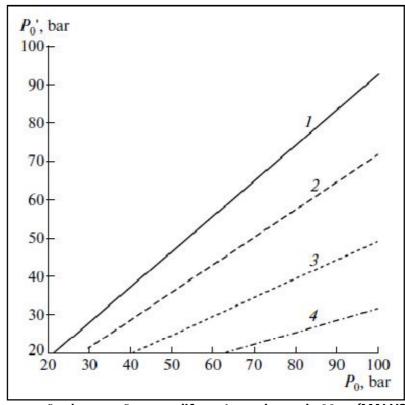


Figura 45: Recuperação de pressão para diferentes valores de Ma_{AC} (MALYSHKINA; 2010)

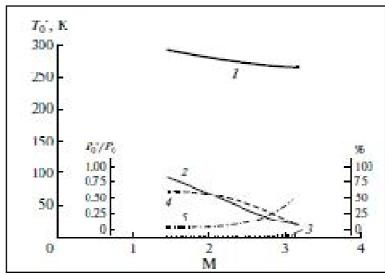


Figura 46: Análise da influência do Ma_{AC} na recuperação de pressão $[T_E=300K]$ (MALYSHKINA; 2010)

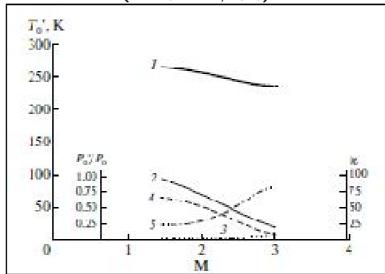


Figura 47: Análise da influência do Ma_{AC} na recuperação de pressão $[T_E=275K]$ (MALYSHKINA; 2010)

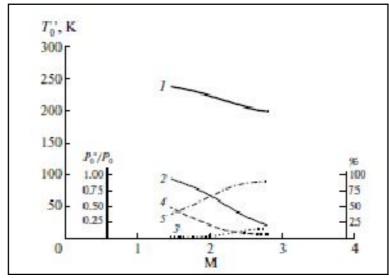


Figura 48: Análise da influência do Ma_{AC} na recuperação de pressão $[T_E=250K]$ (MALYSHKINA; 2010)

2.5.5 Exemplos de unidades operando com 3S

São apresentados alguns exemplos existentes na literatura acerca da tecnologia 3S em operação.

Petronas and Sarawak Shell Berhad (SSB): Em 2003 instalou-se um sistema de desidratação utilizando o 3S para a plataforma de produção de gás natural, B11. Este sistema tem produção nominal de 600 MMscfd de gás desidratado (SCHINKELSHOECK e EPSOM, 2006) sendo mostrado na Figura 49.



Figura 49: Plataforma B11 (Fonte: SCHINKELSHOECK e EPSOM, 2006)

Planta de desidratação na Nigéria: Em 2000 a empresa Twister BV instalou um sistema de desidratação utilizando 3S para atendimento de especificação de gás natural para transporte (5°C de ponto de orvalho de água a 70 bar de pressão de exportação) (BROUWER e EPSOM, 2003). Este sistema de desidratação foi capaz de reduzir em 22-28°C o ponto de orvalho de água. Além disto, os autores também mencionam que este sistema foi capaz de alcançar o ponto de orvalho de hidrocarbonetos (15°C a 80 bar) através da incorporação de um vaso separador ao processo. Os autores ressaltam que o atendimento ao ponto de orvalho de hidrocarbonetos é fortemente dependente da composição do gás de entrada.

3 MODELAGEM DO SEPARADOR SUPERSÔNICO

A apresentação da modelagem do 3S é dividida em quatro partes: premissas, discussão acerca da modelagem termodinâmica do escoamento, modelagem ELV/ELLV e modelagem do frontal de choque normal supersônico.

As premissas adotadas são:

- Geometria da TCD 3S totalmente conhecida, sendo admitida TCD com perfis de diâmetro retilineares como aquela mostrada na Figura 13, sendo especificados: diâmetros de entrada e de saída; e ângulos de parede das seções convergente e divergente. Os comprimentos das seções convergente e divergente e o diâmetro da garganta do 3S são calculados para compatibilizar a garganta com a ocorrência de escoamento sônico. Os símbolos referentes a estas grandezas estão definidos na Tabela de Nomenclatura nas páginas iniciais desta Dissertação.
- Gás de entrada definido em termos de sua vazão mássica, composição, temperatura e pressão (símbolos na Tabela de Nomenclatura).
- Regime estacionário e escoamento EC-1D-E na direção axial da tubeira 3S.
- Não há reações químicas, i.e. as taxas molares de espécies se conservam ao longo do 3S.
- Não há transferência de calor entre o fluido e o ambiente, ou seja, o escoamento é adiabático.
- Vazão mássica e taxa de energia total (entalpia+energia cinética) se conservam ao longo do equipamento;
- Todo o cálculo termodinâmico executado no escoamento 3S, seja em escoamento monofásico ou multifásico, é executado via interface MS-EXCEL
 3SHY.xls que comanda HYSYS em cálculo iterativo ao longo do 3S.
- Modelagem termodinâmica, em geral, seja em escoamento monofásico ou multifásico em todo o 3S, é feita com PR-EOS que apresenta calibração no Simulador HYSYS para todas as espécies típicas do GN em ampla faixa de pressão e temperatura. A versão HYSYS em uso é v.2006.1. Em cada ponto ao longo do eixo da TCD 3S, HYSYS obtém o estado termodinâmico da corrente (monofásico, ou bifásico em ELV ou multifásico em ELLV) via análise de

- comportamento de fase no ponto em questão com teste de estabilidade termodinâmica e resolução subsequente de ELV ou ELLV se necessário.
- Considera-se possibilidade de formação apenas de fases líquidas (uma ou duas fases líquidas, sendo estas hidrocarboneto e água livre) na tubeira 3S, posto que o Simulador HYSYS que é utilizado para cálculo de propriedades termodinâmicas, não executa cálculo automático de transição de fase para o estado sólido. Em outras palavras, água livre a -30°C, por exemplo, será considerada em estado líquido por HYSYS em modo de cálculo automático (i.e. sem intervenção do usuário).
- Para fins de cálculo, os fluidos segregados (gás e líquidos) não são separados na tubeira 3S. Isto é um fator de idealização que não ocorre no 3S real, pois caso contrário o aquecimento de ≈60°C gerado no choque normal destruiria boa parte da segregação de fases e re-vaporizaria os componentes condensáveis de volta ao seio do gás destruindo a separação. Todavia, para fins de cálculo estes condensados foram deixados na corrente de fluido para avaliar-se o impacto do choque normal sobre eles. Uma versão de cálculo em que estes condensados seriam retirados antes do choque não teria maiores dificuldades de ser implementada.
- Irreversibilidades de atrito são consideradas no escoamento através de eficiência adiabática para a conversão de entalpia em energia cinética. Esta eficiência não significa que há perda de energia do escoamento. Ou melhor, parte da energia mecânica (i.e. cinética) é destruída pelo atrito na parede e, em seguida, reaquece o gás somando-se à entalpia da corrente. Assim o total entalpia + energia cinética da corrente é conservado em operação adiabática. Já a taxa de momentum da corrente é reduzida pelo atrito, que transfere momentum à estrutura metálica do 3S e à sua fixação no local de operação. É sabido que há esforços mecânicos na fixação do 3S justamente devido a fugas de momentum axial da corrente pelo atrito supersônico que, portanto, não é desprezível.

Conforme visto nas Secs. 2.4 e 2.5 a aceleração do fluido no 3S é um processo quase isentrópico com mudança de fase sob contínua queda de pressão e temperatura até a zona do frontal de choque. A resolução do estado termodinâmico da corrente ao longo da expansão no 3S é conduzida por HYSYS ponto a ponto no eixo da TCD. HYSYS faz análise completa de comportamento de fase da corrente, eventualmente partindo-a em ELV ou ELLV de acordo

com o indicado por teste de estabilidade de fases implementado ao longo de todo o processamento numérico nas resoluções 3S aqui conduzidas.

A eficiência adiabática ξ é usada para lidar com irreversibilidades, incapazes de colapsar o escoamento supersônico, associadas ao atrito do fluido sobre superfícies do 3S. A ação do atrito é praticamente proporcional ao quadrado da velocidade da corrente e à extensão da TCD do 3S. Apesar da extensão axial do 3S ser pequena, velocidades em alguns casos atingem $Ma \ge 2$. Portanto, a ação do atrito não é desprezível e deve ser levada em conta. Outra razão para não se supor *a priori* o atrito desprezível tem a ver com o elevado índice de desgaste por abrasão que afeta estes equipamentos, noção esta implicitamente reportada em várias das referências anteriores sobre 3S. A abrasão é um atestado inquestionável da intensidade do atrito no 3S, sendo causada pela alta velocidade de partículas de líquido e sólido formados com o resfriamento que colidem com as superfícies do 3S.

As irreversibilidades de atrito são implementadas através da eficiência adiabática ξ que estima tais pequenas irreversibilidades no escoamento. A eficiência adiabática ξ poderá ter valores entre 0.6 e 1 (mais comumente próximo a 0.9) e corrige a resolução isentrópica para o cenário real. O uso de ξ é similar ao que é feito em turbinas adiabáticas que convertem entalpia em trabalho, enquanto o 3S converte entalpia em carga cinética. A eficiência adiabática ξ relaciona a variação real de entalpia do fluido sob conversão em carga cinética com a variação de entalpia do fluido convertida em carga cinética sob escoamento isentrópico " IS " como mostrado na Eq. (3.1) para um mol de fluido.

$$\xi = \frac{\Delta \overline{H}^{Conversão Cinética}}{\Delta \overline{H}^{Conversão Cinética,IS}}$$
(3.1)

Para a modelagem de ELV ou ELLV no 3S, adotou-se o modelo termodinâmico PR-EOS (VAN NESS, SMITH, ABBOT, 2007) disponibilizado em HYSYS e devidamente calibrado para todas as espécies típicas de gás natural. Embora existam várias versões PR-EOS em HYSYS, utilizou-se a versão clássica PR-EOS por representar bem misturas de hidrocarbonetos leves e CO₂. PR-EOS é recomendada em GPSA (2009) para GN não por ser a mais precisa EOS, mas, dado que há incerteza em todos os modelos termodinâmicos, PR-EOS devidamente calibrada é a mais simples EOS com erros em ordem de grandeza aceitáveis e próximos aos de modelos mais complexos com muito mais parâmetros de calibração. Desta forma, PR-EOS foi selecionada por representar com simplicidade e suficiente acurácia as espécies típicas do gás natural de acordo com GPSA (2009). No

entanto, ressalta-se que a metodologia aqui utilizada pode ser aplicada com qualquer modelo termodinâmico capaz de realizar cálculos de equilíbrio multifásico.

O frontal de choque normal supersônico foi densamente discutido na Seção 2.4, sendo caracterizado pela transição adiabática e irreversível de um estado de menor entropia (fluido em escoamento SS) a um estado de maior entropia (fluido comprimido em escoamento subsônico com maior carga entálpica) sendo conservadas três propriedades centrais do escoamento ao longo do frontal: vazão mássica, taxa de energia total da corrente e taxa de momentum da corrente. Admite-se, como é praxe, que todas as propriedades do escoamento são conhecidas justo a montante do frontal (" $_{AC}$ "). A posição do frontal é indeterminada (Sec. 2.4.8), ocorrendo em algum ponto da seção divergente da TCD. Desta forma, para sua resolução, há a necessidade de se especificar sua posição por uma das seguintes opções:

- Pela especificação do Número de Mach justo antes do frontal Ma_{AC} como mostrado na Sec. 2.4.8 com Ma_{AC} =2;
- Pela especificação da pressão justo antes do frontal P_{AC} ;
- Pela especificação da pressão de descarga.

Todas estas especificações são usadas na literatura e são provavelmente equivalentes. KARIMI e ABDI (2009) usam a última, enquanto MALYSHIKNA (2010) usam a primeira. Como o TCD 3S normalmente atinge pelo menos Número de Mach igual a 2, este poderia ser o critério de especificação para o choque, exatamente como feito na Sec. 2.4.8 com GI. Alternativamente, a posição Ma_{AC} =2 corresponde a uma pressão de aproximadamente 13 a 15 bar no frontal de choque nos perfis de pressão na Figura 27 que é aproximadamente 13% a 15% da pressão de entrada da alimentação de gás pressurizado do 3S. Os dois primeiros critérios são de similar nível de dificuldade em termos de implementação numérica. No presente desenvolvimento, implementado no Cap. 4, o segundo critério foi escolhido. Desta a forma a posição do choque está associada à locação na seção divergente da TCD com pressão P_{AC} baixa o bastante para corresponder a algo próximo de 15 bar como ocorreu com os exemplos da Sec. 2.4.8.

A resolução do choque visa a determinar, sob composição global constante, pressão, temperatura, Número de Mach e velocidade subsônica após o frontal (P_{PC} , T_{PC} , Ma_{PC} , v_{PC}). Estas variáveis são resolvidas através da solução dos balanços de massa, energia e momentum através do frontal. Como a vazão mássica já é conhecida, a velocidade pode ser eliminada pela divisão da vazão mássica pela área e densidade do fluido, esta última função apenas de

 P_{PC} , T_{PC} . Assim a resolução do choque se reduz à busca de duas variáveis (P_{PC} , T_{PC}) em duas equações, balanço de energia e de momentum. Cabe também mencionar que em cada iteração da resolução do choque, com a estimativa corrente de P_{PC} , T_{PC} , HYSYS faz análise completa de comportamento de fase da corrente, eventualmente partindo-a em ELV ou ELLV de acordo com o indicado por testes de estabilidade de fases que são implementados ao longo de todo o processamento numérico nas resoluções 3S aqui conduzidas.

4 METODOLOGIA DE CÁLCULO DO SEPARADOR SUPERSÔNICO

Apresenta-se a metodologia de resolução de projeto 3S com os aspectos de modelagem discutidos no Cap. 3. Todo o cálculo de propriedades termodinâmicas e de equilíbrio multifásico ELV/ELLV, é executado por HYSYS. Este, por sua vez, é comandado pelo aplicativo MS-EXCEL *3SHY.xls* que dispõe de várias rotinas desenvolvidas em Visual BasicTM para intervenções em HYSYS em modo de execução, tais como:

- Inserção em correntes do fluxograma HYSYS de valores de pressão, temperatura, composição e vazão;
- Coleta em correntes do fluxograma HYSYS de valores de propriedades termodinâmicas de correntes como densidade, entropia, entalpia, fração vaporizada, fração de água livre, composição de todas as fases no caso de corrente multifásica, etc.
- Execução de resolução de operações unitárias do fluxograma HYSYS como *Flash(P,T), Flash(P,S), Adiabatic Expander, Adiabatic Compressor* etc.
- Cálculos iniciais com os dados de entrada descritos nos Passos I, II e III, a seguir.
- Resolução do escoamento EC-1D-E até o frontal de choque normal como descrito no Passo IV e no Passo V que deve ser acionado diversas vezes até a chegada do frontal de choque normal.
- Resolução numérica das equações de choque normal, obtendo os devidos saltos de variáveis no choque, como descrito no Passo VII a seguir.
- Resolução do escoamento EC-1D-E após o frontal de choque até a saída da TCD 3S, como descrito no Passo VIII a seguir.

A apresentação a seguir terá os passos numerados em algarismos romanos como as etapas de um algoritmo.

4.1 CÁLCULO DAS CONDIÇÕES DE ENTRADA

- I. Entrar especificações: Definir condições de entrada do gás de carga: composição em frações molares globais (\underline{Z}_E), vazão molar (F_E), pressão (P_E) e temperatura (T_E). A massa molar do fluido é obtida (M_{ME}). Definir parâmetros da TCD: diâmetro de entrada (D_E), diâmetro de saída (D_S), ângulo da seção convergente (α), ângulo da seção divergente (β). Definir eficiência adiabática (ξ). Definir a pressão do choque (P_{AC}) (por exemplo, $\approx 15bar$).
- II. Entrar estimativa do diâmetro da garganta (D_T): Esta estimativa sofrerá correção em nova tentativa caso seja imprópria, como será mostrado. Não há grau de liberdade para especificar D_T e os comprimentos da TCD pois a vazão de gás foi especificada e a posição da garganta deve ser compatível com Número de Mach unitário ($Ma_T = 1$). Os comprimentos axiais das seções convergente (L_C) e divergente (L_D), e total (L) da TCD são calculados no corrente D_T pelas Eqs. (4.1), (4.2) e (4.3):

$$L_C = \frac{D_E - D_T}{2(\tan \alpha)} \tag{4.1}$$

$$L_D = \frac{D_S - D_T}{2(\tan \beta)} \tag{4.2}$$

$$L = L_C + L_D \tag{4.3}$$

III. Cálculos de entrada com HYSYS: HYSYS é usado no cálculo de propriedades de entrada nas Eqs. (4.4), (4.5), (4.6) e (4.7), com equilíbrio multifásico se necessário. A velocidade do som c_E no gás de entrada vem pela Eq. (2.21a), aqui colocada como Eq. (4.8). Como enfatizado na Sec. 2.4.3, a definição da velocidade sônica na Eq. (2.21a) é absolutamente geral e pode ser usada em correntes e materiais multifásicos, se necessário, desde que haja Equilíbrio Termodinâmico perfeito. A propriedade c_E é necessária no Número de Mach de entrada, Ma_E na Eq. (4.9). A Eq. (4.8) para ser operada corretamente exige cálculo numérico por diferenças finitas (no SI) para estimar $\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{\overline{S},Y}^{Entrada}$ com operação HYSYS capaz de criar expansões multifásicas sob entropia e composição global constantes. Esta é a operação Adiabatic Expander configurada com eficiência adiabática 100% para entropia constante que aceita segregação de fase na entrada e saída; isto é, HYSYS aplicará ELV ou ELLV, se necessário. A diferenciação numérica na Eq. (4.10)

exige o uso do Adiabatic Expander na Eq. (4.11) com o gás de carga sob pequena

queda de pressão h ($h \approx 10Pa$) de P_E a P_E -h para garantir acurácia na derivada parcial. A ação do $Adiabatic\ Expander$ com eficiência 100% equivale a calcular propriedades fixando a entropia de gás de entrada \overline{S}_E obtida na Eq. (4.4). Cabe chamar a atenção do Leitor, mais uma vez, para o fato de que todo e qualquer cálculo de propriedade termodinâmica nesta metodologia é implicitamente multifásico sob ELV ou ELLV, cabendo a HYSYS os devidos testes de estabilidade e de resolução ELV ou ELLV para garantir que o Equilíbrio se aplique e que os valores de propriedades tenham sentido físico; i.e. sejam propriedades de equilíbrio. Seguem-se as equações a serem calculadas no Passo III.

$$\begin{cases} \rho_E = \rho(T_E, P_E, \underline{Z}_E) \\ \overline{H}_E = \overline{H}(T_E, P_E, \underline{Z}_E) \\ \overline{S}_E = \overline{S}(T_E, P_E, \underline{Z}_E) \end{cases}$$
(4.4)

$$v_E = \frac{F_E . M_{ME}}{\left(\frac{\pi . D_E^2}{4}\right) . \rho_E} \tag{4.5}$$

$$\overline{E}_{CE} = \frac{M_{ME}.v_E^2}{2} \tag{4.6}$$

$$\overline{E}_E = \overline{E}_{CE} + \overline{H}_E \tag{4.7}$$

$$c_E = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{\bar{S},Y}^{Entrada}}} \tag{4.8}$$

$$Ma_E = \frac{v_E}{c_E} \tag{4.9}$$

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{\overline{S},Y}^{Entrada} = \left(\frac{\rho(\overline{S}_E, P_E - h, \underline{Z}_E) - \rho_E}{(P_E - h) - P_E}\right)$$
(4.10)

$$\frac{Z_{E}}{P_{E}, T_{E}} \atop \overline{H}_{E} \atop \overline{S}_{E} \atop \rho_{F}$$
Adiabatic Expander

Eficiência $\xi = 100\%$, \underline{Z}_{E} const., \overline{S}_{E} const.
$$\frac{Z_{E}}{P_{E} - h} \atop T(\overline{S}_{E}, P_{E} - h, \underline{Z}_{E}) \atop \rho(\overline{S}_{E}, P_{E} - h, \underline{Z}_{E})$$
(4.11)

4.2 RESOLUÇÃO DO ESCOAMENTO ATÉ O CHOQUE NORMAL

- IV. Iniciando sequência de cálculo EC-1D-E: O EC-1D-E adiabático, quase isentrópico, expandindo continuamente na TCD até próximo ao frontal de choque normal, como visto nos perfis da Figura 2.26, é modelado em HYSYS via uma sequência de chamados Adiabatic Expander com gradativas reduções de pressão. HYSYS obtém expansão quase isentrópica (multifásica ou não) através do Adiabatic Expander usando-se o parâmetro adiabatic efficiency para estipular a eficiência adiabática requerida (com eficiência 100% a expansão é isentrópica, sendo assim usada no cálculo anterior da Eq. (4.10)). Para o EC-1D-E na TCD 3S são necessárias várias pequenas expansões de passo, digamos, $\tau = 100Pa$ para corrigir sucessivamente o diâmetro da seção de escoamento que varia ao longo da TCD. É necessário executar várias pequenas expansões pois Adiabatic Expander evidentemente equivale a um trecho EC-1D-E quase isentrópico de seção constante. Desta forma, através de dezenas de pequenas expansões Adiabatic Expander, cada uma da ordem de $\tau = 100Pa$ com seção constante, é possível reproduzir todo o EC-1D-E na TCD de seção variável do 3S até próximo ao frontal de choque. Esta coleção de trechos elementares de área de escoamento constante é a discretização necessária para resolução do 3S. Simultaneamente, garante-se todo o rigoroso ferramental HYSYS para cálculos de segregação multifásica que é acionado na saída de cada Adiabatic Expander ao longo da TCD. Isto emulará o desempenho 3S em termos de separação, rigor termodinâmico e cálculo de segregação de fases. Esta sucessão prossegue até que o choque normal seja locado na pressão pré-choque P_{AC} ($\approx 15 bar$, ver Cap. 3). O contador de discretização de trechos na TCD é inicializado neste ponto com n=1.
- V. Resolução trecho n de EC-1D-E: Considere-se o trecho n da sequência de expansões $Adiabatic \, Expander$ para a qual variáveis e propriedades são P_n , T_n , Ma_n , v_n , ρ_n , c_n . A composição do fluido é fixa na entrada (\underline{Z}_E). A meta é obter o diâmetro do trecho n, D_n , o Número de Mach Ma_n , a posição axial x_n , e assim concluir sobre o cruzamento ou não da garganta, corrigindo-se ou mantendo-se D_T quando $Ma_n=1$. Para n=0 tem-se o ponto de entrada da TCD 3S obtido no Passo III: $P_0=P_E$, $T_0=T_E$, $Ma_0=Ma_E$, $v_0=v_E$, $\rho_0=\rho_E$, $c_0=c_E$, $D_0=D_E$. Assim, para $n \geq 1$, sempre o trecho n-1 já terá sido resolvido. No trecho n faz-se a resolução de Eqs. (4.12), (4.13),

(4.14), (4.15), (4.16), (4.17), (4.18), (4.19) e (4.20). Para obter a velocidade sônica c_n na Eq. (4.16), a mesma diferenciação numérica da Eq. (4.10) é usada na Eq. (4.17), novamente implicando em um chamado extra do *Adiabatic Expander* na Eq. (4.18) com eficiência 100% para entropia \overline{S}_n constante e despressurização h (h=10Pa). A partir daí tem-se Ma_n .

$$\frac{\underline{Z}_{E}}{P_{n-1}, T_{n-1}} \xrightarrow{Adiabatic Expander} \xrightarrow{Eficiência \ \xi \le 1, \ \Delta P = -\tau, \ \underline{Z}_{E} \ const.} \xrightarrow{\left\{ \begin{array}{l} \underline{Z}_{E} \\ P_{n} = P_{n-1} - \tau, T_{n} \\ \overline{H}_{n} = \overline{H}(P_{n}, T_{n}, \underline{Z}_{E}) \\ \overline{S}_{n} = \overline{S}(P_{n}, T_{n}, \underline{Z}_{E}) \\ \rho_{n} = \rho(P_{n}, T_{n}, \underline{Z}_{E}) \end{array} \right\}$$

$$(4.12)$$

$$\overline{E}_{Cn} = \overline{E}_E - \overline{H}_n \tag{4.13}$$

$$v_n = \sqrt{\frac{2.\overline{E}_{Cn}}{M_{ME}}} \tag{4.14}$$

$$D_n = \sqrt{\frac{4.F_E.M_{ME}}{\pi.\rho_n.v_n}} \tag{4.15}$$

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{\overline{S}, Y}^{Em(T_n, P_n)}}}$$
(4.16)

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{\overline{S},Y}^{Em(T_n,P_n)} = \left(\frac{\rho(\overline{S}_n, P_n - h, \underline{Z}_E) - \rho_n}{(P_n - h) - P_n}\right)$$
(4.17)

$$\frac{Z_{E}}{P_{n}, T_{n}} \begin{cases}
P_{n}, T_{n} \\
\overline{H}_{n} \\
\overline{S}_{n} \\
\rho_{n}
\end{cases}
\xrightarrow{Adiabatic Expander} \underbrace{\sum_{E ficiência \xi = 100\%, Z_{E} const., \overline{S}_{n} const.}_{Adiabatic Expander} \xrightarrow{E ficiência \xi = 100\%, Z_{E} const., \overline{S}_{n} const.} \begin{cases}
\overline{Z}_{E} \\
P_{n} - h \\
T(\overline{S}_{n}, P_{n} - h, \underline{Z}_{E}) \\
\rho(\overline{S}_{n}, P_{n} - h, \underline{Z}_{E})
\end{cases}$$
(4.18)

$$Ma_n = \frac{v_n}{c_n} \tag{4.19}$$

$$x_{n} = L_{C} - \left(\frac{D_{n} - D_{T}}{2 \cdot \tan \alpha}\right) \qquad \{Se \ Ma_{n} \le 1$$

$$x_{n} = L_{C} + \left(\frac{D_{n} - D_{T}}{2 \cdot \tan \beta}\right) \qquad \{Se \ Ma_{n} > 1$$

$$(4.20)$$

VI. Decisão de progressão: Neste ponto tem-se uma decisão que deve excludentemente:

- (i) repetir o Passo V em novo trecho n Adiabatic Expander a montante do choque;
- (ii) concluir que o frontal de choque foi atingido, passando-se às equações de choque;
- (iii) concluir que a estimativa utilizada de D_T está incorreta e deve ser substituída. A Eq. (4.21) expressa as cláusulas desta tomada de decisão.

$$Se \ (P_n > P_{AC} - \tau/2) \& (P_n < P_{AC} + \tau/2) \& (Ma_n > 1) \xrightarrow{Frontal \ Choque} \\ Se \ (P_n > P_{AC} - \tau/2) \& (P_n < P_{AC} + \tau/2) \& (Ma_n > 1) \xrightarrow{Frontal \ Choque} \\ Se \ (D_{n-1} > D_n > D_T) \& (Ma_n < 1) \xrightarrow{Sec. \ Convergente \ \& \ G \ arg \ anta \ a \ Jusante} \\ Se \ (D_n > D_{n-1} > D_T) \& (Ma_n > 1) \xrightarrow{Sec. \ Divergente \ \& \ G \ arg \ anta \ a \ montante} \\ Se \ (D_n > D_{n-1} > D_T) \& (Ma_n > 1) \xrightarrow{Sec. \ Divergente \ \& \ G \ arg \ anta \ a \ montante} \\ Se \ (D_n \cong D_{n-1}) \& (D_n > D_T) \& (Ma_n \cong 1) \xrightarrow{Re \ gime \ Sônico \ DEPOIS \ de \ D_\tau} \\ Se \ (D_n \cong D_{n-1}) \& (D_n < D_T) \& (Ma_n \cong 1) \xrightarrow{Re \ gime \ Sônico \ DEPOIS \ de \ D_\tau} \\ Se \ (D_n \cong D_{n-1}) \& (D_n < D_T) \& (Ma_n \cong 1) \xrightarrow{Re \ gime \ Sônico \ DEPOIS \ de \ D_\tau} \\ Se \ (D_n \cong D_{n-1}) \& (D_n < D_T) \& (Ma_n \cong 1) \xrightarrow{Re \ gime \ Sônico \ DEPOIS \ de \ D_\tau} \\ Se \ (D_n \cong D_{n-1}) \& (D_n < D_T) \& (Ma_n \cong 1) \xrightarrow{Re \ gime \ Sônico \ DEPOIS \ de \ D_\tau} \\ Se \ (D_n \cong D_{n-1}) \& (D_n < D_T) \& (Ma_n \cong 1) \xrightarrow{Re \ gime \ Sônico \ DEPOIS \ de \ D_\tau} \\ Se \ (D_n \cong D_{n-1}) \& (D_n < D_T) \& (Ma_n \cong 1) \xrightarrow{Re \ gime \ Sônico \ DEPOIS \ de \ D_\tau} \\ Se \ (D_n \cong D_{n-1}) \& (D_n < D_T) \& (D_n < D_T) \& (Ma_n \cong 1) \xrightarrow{Re \ gime \ Sônico \ DEPOIS \ de \ D_\tau} \\ Se \ (D_n \cong D_n) \& (D_n < D_T) \& (D_n < D_T)$$

4.3 CÁLCULO DO FRONTAL DE CHOQUE NORMAL

VII. Resolução do frontal de choque normal: A resolução do choque normal se reduz à busca das variáveis (P_{PC} , T_{PC}) nas Eqs. (2.38c) e (2.38b), respectivamente, os balanços estacionários de energia e de momentum do escoamento através do frontal, reescritos nas Eqs. (4.22) e (4.23) com v_{PC} explicitada na Eq. (4.24). Nas Eqs. (4.22) a (4.24) todas as grandezas estão *estritamente* no SI. O sistema algébrico do choque normal é escrito nas Eqs. (4.25). As Eqs. (4.25) são resolvidas numericamente com o MNR a partir de estimativa inicial $\underline{\eta}_0$ que pode ser obtida com a solução do choque normal do GI nas Eqs. (2.41r) e (2.41s), onde Ma_{AC} é o Número de Mach a montante do frontal. O procedimento MNR é resumido no algoritmo da Eq. (4.26) onde k é o

(4.26)

contador de iterações. Após a convergência do MNR são obtidas as variáveis justo a jusante do choque: P_{PC} , T_{PC} . Propriedades densidade, entalpia e entropia são obtidas via Eq. (4.27) e a velocidade v_{PC} via Eq. (4.28). Para o Número de Mach Ma_{PC} pela Eq. (4.30) velocidade sônica pós-choque c_{PC} é obtida na Eq. (4.29) pela diferenciação numérica na Eq. (4.31) usada anteriormente nas Eqs. (4.10) e (4.11). Esta diferenciação numérica exige um acionamento extra do *Adiabatic Expander* em pequena expansão na Eq. (4.32) com eficiência 100% para entropia \overline{S}_{PC} constante e despressurização h (h=10Pa). A partir daí tem-se Ma_{PC} pela Eq. (4.30).

$$\left(\overline{H}(T_{PC}, P_{PC}, \underline{Z}_E) + M_{ME} \frac{v_{PC}^2}{2}\right) - \left(\overline{H}(T_{AC}, P_{AC}, \underline{Z}_E) + M_{ME} \frac{v_{AC}^2}{2}\right) = 0$$
(4.22)

$$\left(P_{PC} + v_{PC}^2 \cdot \rho(T_{PC}, P_{PC}, \underline{Z}_E)\right) - \left(P_{AC} + v_{AC}^2 \cdot \rho(T_{AC}, P_{AC}, \underline{Z}_E)\right) = 0 \tag{4.23}$$

$$v_{PC} = \frac{4.F_E.M_{ME}}{\pi.D_{AC}^2.\rho(T_{PC}, P_{PC}, \underline{Z}_E)}$$
(4.24)

$$\underline{F}(\underline{\eta}) = \underline{0} \qquad \left\{ \underline{\eta} = \begin{bmatrix} P_{PC} \\ T_{PC} \end{bmatrix} \right\} \tag{4.25}$$

1.
$$k = 0$$
; $Erro = 1$; $\zeta = 1E - 6$; $Entrar \underline{\eta}_0$

2. Enquanto Erro $> \zeta$

Calcular
$$\underline{F}_k = \underline{F}(\underline{\eta}_k), \ \underline{\underline{J}} = \underline{\underline{J}}(\underline{\eta}_k)$$

$$\underline{\Omega}_{k} = -\underline{\underline{J}}^{-1} \underline{F}_{k} \quad , \quad Erro = \|\underline{\Omega}_{k}\|$$

$$Se \ Erro < 1 \quad \Rightarrow b = 1$$

Se
$$Erro \le 100 \Rightarrow b = 0.1$$

Se
$$Erro > 100 \Rightarrow b = 0.01$$

$$\underline{\eta}_{k+1} = \underline{\eta}_k + b.\underline{\Omega}_k$$
$$k = k+1$$

$$3. \eta = \eta_{k}$$
 [Fim]

$$\begin{cases}
\rho_{PC} = \rho(T_{PC}, P_{PC}, \underline{Z}_E) \\
\overline{H}_{PC} = \overline{H}(T_{PC}, P_{PC}, \underline{Z}_E) \\
\overline{S}_{PC} = \overline{S}(T_{PC}, P_{PC}, \underline{Z}_E)
\end{cases}$$
(4.27)

$$v_{PC} = \frac{4.F_E M_{ME}}{\pi . D_{AC}^2 . \rho_{PC}} \tag{4.28}$$

$$c_{PC} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{\bar{S},Y}^{Em\ PC}}} \tag{4.29}$$

$$Ma_{PC} = \frac{v_{PC}}{c_{PC}} \tag{4.30}$$

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{\overline{S},Y}^{Em\ PC} = \left(\frac{\rho(\overline{S}_{PC}, P_{PC} - h, \underline{Z}_E) - \rho_{PC}}{(P_{PC} - h) - P_{PC}}\right)$$
(4.31)

$$\frac{Z_{E}}{P_{PC}, T_{PC}}$$

$$\frac{\overline{H}_{PC}}{\overline{S}_{PC}}$$

$$\frac{P_{PC}}{P_{PC}}$$

$$\frac{Adiabatic Expander}{Eficiência \xi = 100\%, Z_{E} const., \overline{S}_{PC} const.}$$

$$\frac{Z_{E}}{P_{PC}}$$

$$\frac{Z_{E}}{P_{PC} - h}$$

$$T(\overline{S}_{PC}, P_{PC} - h, Z_{E})$$

$$\rho(\overline{S}_{PC}, P_{PC} - h, Z_{E})$$

$$\rho(\overline{S}_{PC}, P_{PC} - h, Z_{E})$$

$$(4.32)$$

4.4 RESOLUÇÃO DO ESCOAMENTO APÓS O CHOQUE NORMAL

VIII. Iniciando sequência EC-1D-E pós-choque: A jusante do choque normal, subsônico (Ma<1) e na seção divergente da TCD, o EC-1D-E adiabático, quase isentrópico, deverá sofrer contínua compressão, aquecimento e redução de velocidade até a descarga, como previsto na Eq. (2.29c) e visto nos perfis da Figura 2.26. Este EC-1D-E é modelado em HYSYS via uma sequência de chamados Adiabatic Compressor com gradativos aumentos de pressão. Adiabatic Compressor é totalmente análogo a Adiabatic Expander obtendo compressão quase isentrópica (multifásica ou não) regulada pelo parâmetro adiabatic efficiency para a eficiência adiabática requerida (com eficiência 100% a compressão é isentrópica). Para o EC-1D-E pós-choque são necessárias várias pequenas compressões de passo $\tau = 100Pa$ para corrigir sucessivamente o diâmetro da seção divergente pós-choque. Análogamente aos Passos IV e V, é necessário executar várias pequenas compressões, pois Adiabatic Compressor equivale a um trecho EC-1D-E quase isentrópico de seção constante. Desta forma, através de dezenas de pequenas compressões Adiabatic Compressor, cada uma da ordem de $\tau = 100Pa$ com seção constante, é possível reproduzir o final do EC-1D-E de seção variável do 3S na seção divergente da TCD.

Simultaneamente, garante-se todo o rigoroso ferramental HYSYS para cálculos de segregação multifásica que é acionado na saída de cada *Adiabatic Compressor*. Isto emulará o desempenho 3S em termos de separação, rigor termodinâmico e cálculo de segregação de fases. Esta sucessão prossegue até que se atinja a posição axial de descarga da TCD $x_n=L_C+L_D$. O contador de trechos na seção divergente pós-choque é inicializado em x_{PC} com n=1.

IX. Resolução trecho n de EC-1D-E: Considere-se o trecho n da sequência de compressões $Adiabatic \ Compressor$ para a qual variáveis e propriedades são P_n , T_n , Ma_n , v_n , ρ_n , c_n . A composição do fluido é fixa na entrada (\underline{Z}_E). A meta é obter o diâmetro do trecho n, D_n , o Número de Mach Ma_n , a posição axial x_n . Para n=0 tem-se o ponto pós-choque $x_{PC} = x_{AC}$ obtido no Passo VII: $P_0 = P_{PC}$, $T_0 = T_{PC}$, $Ma_0 = Ma_{PC}$, $v_0 = v_{PC}$, $\rho_0 = \rho_{PC}$, $c_0 = c_{PC}$, $D_0 = D_{PC} = D_{AC}$. Assim, para $n \ge 1$, sempre o trecho n-1 já terá sido resolvido. No trecho n faz-se a resolução de Eqs. (4.33), (4.34), (4.35), (4.36), (4.37), (4.38), (4.39), (4.40) e (4.41). Para obter a velocidade sônica c_n na Eq. (4.37), diferenciação numérica similar à da Eq. (4.10) é usada na Eq. (4.38), desta vez com um chamado extra do $Adiabatic \ Compressor$ na Eq. (4.39) sob eficiência 100% para entropia \overline{S}_n constante e pressurização h (h=10Pa). A partir daí tem-se Ma_n .

$$\begin{array}{c}
\underline{Z}_{E} \\
P_{n-1}, T_{n-1} \\
\overline{H}_{n-1} \\
\overline{S}_{n-1} \\
\rho_{n-1}
\end{array}$$

$$\xrightarrow{Adiabatic Compressorr} \\
\underline{Eficiência} \ \xi \leq 1, \Delta P = +\tau, \underline{Z}_{E} \ const.$$

$$\begin{array}{c}
\underline{Z}_{E} \\
P_{n} = P_{n-1} + \tau, T_{n} \\
\overline{H}_{n} = \overline{H}(P_{n}, T_{n}, \underline{Z}_{E}) \\
\overline{S}_{n} = \overline{S}(P_{n}, T_{n}, \underline{Z}_{E}) \\
\rho_{n} = \rho(P_{n}, T_{n}, \underline{Z}_{E})
\end{array}$$

$$(4.33)$$

$$\overline{E}_{Cn} = \overline{E}_E - \overline{H}_n \tag{4.34}$$

$$v_n = \sqrt{\frac{2.\overline{E}_{Cn}}{M_{ME}}} \tag{4.35}$$

$$D_n = \sqrt{\frac{4.F_E.M_{ME}}{\pi.\rho_n.\nu_n}} \tag{4.36}$$

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{\overline{S},Y}^{Em(T_n, P_n)}}} \tag{4.37}$$

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_{\overline{S},Y}^{Em(T_n,P_n)} = \left(\frac{\rho(\overline{S}_n, P_n + h, \underline{Z}_E) - \rho_n}{(P_n + h) - P_n}\right)$$
(4.38)

$$\frac{Z_{E}}{P_{n}, T_{n}} \begin{cases}
P_{n}, T_{n} \\
\overline{H}_{n} \\
\overline{S}_{n}
\end{cases}$$

$$\frac{\overline{B}_{n}}{P_{n}} \begin{cases}
Adiabatic Compressor \\
\underline{Eficiencia} \ \xi = 100\%, \underline{Z}_{E} \ const., \overline{S}_{n} \ const.
\end{cases}$$

$$\frac{Z_{E}}{P_{n} + h}$$

$$T(\overline{S}_{n}, P_{n} + h, \underline{Z}_{E})$$

$$\rho(\overline{S}_{n}, P_{n} + h, \underline{Z}_{E})$$

$$\rho(\overline{S}_{n}, P_{n} + h, \underline{Z}_{E})$$

$$(4.39)$$

$$Ma_n = \frac{v_n}{c_n} \tag{4.40}$$

$$x_n = L_C + \left(\frac{D_n - D_T}{2 \cdot \tan \beta}\right) \tag{4.41}$$

- X. Decisão de progressão: Neste ponto tem-se uma decisão que deve excludentemente:
 - (i) repetir o Passo IX em novo trecho n Adiabatic Compressor a montante da saída;
 - (ii) concluir que a saída da TCD 3S foi atingida, passando-se ao fim do cálculo 3S. A Eq. (4.42) expressa as cláusulas desta tomada de decisão.

$$Se (x_n \ge L_C + L_D) \xrightarrow{Saida \ da \ TCD \ 3S \ atingida} \begin{cases} Abortar \ Sequencia \\ Fim \ do \ Cálculo \ 3S \end{cases}$$

$$Se (x_n < L_C + L_D) \xrightarrow{Sec. \ Divergente \ \& \ G \ arg \ anta \ a \ mon \ tan \ te} \begin{cases} n = n + 1 \\ Re \ petir \ Passo \ IX \end{cases}$$

$$(4.42)$$

.

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

O modelo 3S desenvolvido nesta Dissertação será testado via geração de resultados no Equipamento 3S para dois tipos distintos de gás natural na Tabela 3: Gás A e Gás B. O Gás A representa um gás natural mais leve, isento de água e mais próximo às especificações da ANP. O Gás B representa um gás natural mais rico em frações pesadas, saturado em água e, portanto, mais distante das especificações da ANP e sujeito a produzir muito maior segregação de fases densas no 3S.

As condições destas cargas de gás são mostradas na Tabela 3. As condições do Equipamento 3S (dados geométricos, pressão a montante do choque normal) são também mostradas na Tabela 3.

Tabela 3: Composições e Condições dos Gases Testados e do Equipamento 3S

Tabela 3. Composições e Condições dos Cases Testados e do Equipamento 33		
Componentes e Composições	Gás A	Gás B
Fração molar C1	0.7000	0.5999
Fração molar C2	0.1300	0.1500
Fração molar C3	0.0600	0.1000
Fração molar iC4	0.0200	0.0250
Fração molar nC4	0.0200	0.0250
Fração molar iC5	0	0.0100
Fração molar nC5	0	0.0100
Fração molar N ₂	0.0200	0
Fração molar CO ₂	0.0500	0.0800
Fração molar H ₂ O (umidade de saturação se ≠0)	0	0.0001
Condições de Entrada das Cargas de Gases Testados no 3S		
Pressão (bar)	82	82
Temperatura (°C)	25°C	37.77°C
Vazão (MMNm³/d)	1.9354	1.9354
Vazão (kgmol/s)	1	1
Condições do Equipamento 3S de Paredes Retilineares (ver Figura 13) Modelado		
Diâmetro de Entrada	0.1m	0.1m
Diâmetro de Saída	0.08m	0.08m
Ângulo de Parede da Seção Convergente	12.67°	12.67°
Î I I D I I G ~ D'	2.66°	2.66°
Ângulo de Parede da Seção Divergente	2.00	2.00

5.1 Análise de sensibilidade do modelo 3S ao valor da eficiência adiabática

A geração de resultados será conduzida verificando-se, ao mesmo tempo, a resposta do modelo 3S aqui desenvolvido e como o parâmetro de eficiência adiabática afeta o desempenho deste modelo 3S e as propriedades do fluido ao longo do separador 3S para as duas composições de gás natural e de equipamento na Tabela 3.

Para realizar a análise de sensibilidade serão considerados diferentes casos de escoamento compressível com condensação parcial no 3S: isentrópico e com eficiências adiabáticas de 90%, 80%, 73% e 60%. Em cada um destes casos serão apresentados os perfis de Número de Mach, pressão, temperatura, velocidade, velocidade sônica como propriedade do fluido e diâmetro versus posição axial no separador 3S. Nesta última figura fica evidente o comprimento das seções do 3S (L_C , L_D), o comprimento total do separador (L), e o diâmetro da garganta (D_T). O caso assim chamado "isentrópico", na verdade não é estritamente isentrópico porque o choque normal adiabático e irreversível faz obrigatoriamente criação positiva de entropia. Apenas nas resoluções de escoamento aplica-se o termo "isentrópico".

5.1.1 Análise de sensibilidade do modelo à eficiência adiabática para o Gás A

5.1.1.1 Escoamento isentrópico

No escoamento isentrópico (ξ =100%) o Gás A alcança maiores velocidades. Isto ocorre porque a eficiência adiabática de escoamento representa as perdas de energia do gás com atrito e consequentemente aquecimento do mesmo. Portanto, como neste caso tal perda é inexistente, o gás alcançará maiores velocidades e temperaturas mais baixas, sendo assim o caso de maior capacidade de separação.

Os resultados deste caso estão nas figuras seguintes. As figuras com perfis Ma(x), T(x), P(x), v(x) e c(x) apresentam resultados qualitativamente similares às **Figuras 24, 25, 26, 27, 28** geradas na Sec. 2.4.8 para GI. Por exemplo, as singularidades $\pm \infty$ para as inclinações dos perfis T(x), P(x), Ma(x), v(x), c(x) na garganta com Ma=1, previstas pelas Eqs. (2.29a) e (2.29b), e os comportamentos destas inclinações fora da garganta, previstas pelas Eqs. (2.29c), são cumpridas sem exceção.

Verifica-se que o frontal de choque normal ocorre claramente: o fluido passa subitamente de uma condição SS para subsônica, com queda de Número de Mach 2.102 para

0.662 (**Figura 50**). Devido ao maior Número de Mach pré-choque, este caso alcançou o maior salto em número de Mach através do frontal de choque: $Ma_{PC} - Ma_{AC} = -1.44$.

Por se tratar de escoamento isentrópico, o fluido alcança a pressão de choque (15 bar) com maior energia cinética do que nos demais casos. Portanto, como a pressão recuperada (pressão pós-choque) é função da energia cinética do fluido na entrada do choque, este é o caso em que há a maior recuperação de pressão na descarga do gás ou 62.72 % da pressão inicial (**Figura 51**). Tendo em vista que este é o cenário com maior recuperação de pressão, este também é o cenário em que ocorre o maior resfriamento devido à aceleração do fluido - 46.6°C antes do choque e maior aquecimento devido ao choque com temperatura pós-choque: 3.97°C (**Figura 52**). Isto ocorre porque a passagem pelo frontal de choque é uma compressão adiabática súbita na qual o aquecimento cresce com a razão de compressão observada, que neste caso é de aproximadamente 3.5. Este também é o caso em que se alcança maior energia cinética justo antes do choque normal, devido a não haver perdas de energia por atrito, ou seja, 486 m/s de velocidade. Além disso, também foi o caso em que o fluido alcança maior desaceleração no choque de 324.6 m/s, com velocidade pós-choque de 161.4 m/s (**Figura 53**).

Como a velocidade sônica responde ao inverso da variação da densidade com a pressão sob entropia constante, para fluidos com maior entalpia esta dependência é menor, implicando maior velocidade sônica. No caso, não há ganho de entalpia por atrito, assim o gás escoa em menores temperaturas e menor entalpia. Portanto, este é o cenário com menores valores de velocidade sônica (**Figura 54**). Também é perceptível um pequeno aumento da velocidade sônica com o início da condensação por razões óbvias, já que a velocidade sônica em fluido multifásico é maior do que em um gás monofásico devido à presença de líquido. A **Figura 55**traz o perfil de diâmetro no 3S revelando que há quase 0.6m de comprimento e garganta pouco abaixo de 0.04m de diâmetro.

A **Figura 56** e a **Figura 57** indicam que do ponto de vista de redução de HCDP do gás, a localização ótima para remoção de condensado no 3S seria o ponto justo a montante do choque normal, pois é onde a fração molar de metano na fase gás e a fração de condensado encontram seu máximo. Também é possível mostrar que por não haver a separação do condensado e devido à recuperação de entalpia graças ao choque normal, o gás A re-vaporiza completamente, e, portanto, a fração molar de metano no gás na saída do 3S é igual ao valor de entrada 0.7 (**Figura 57**).

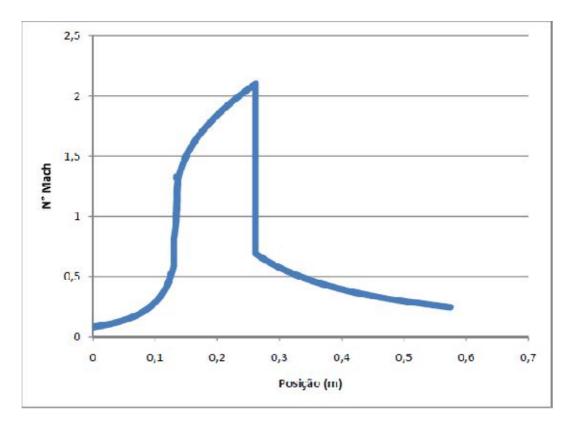


Figura 50: Perfil de N° de Mach ao longo do separador para o Gás A em escoamento isentrópico

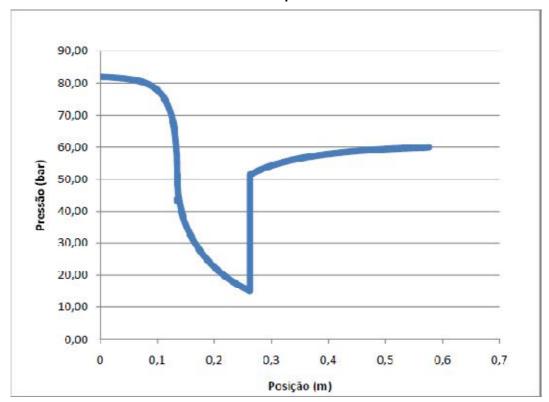


Figura 51: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás A em escoamento isentrópico

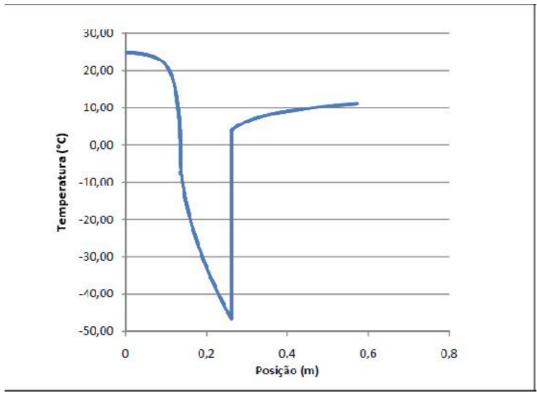


Figura 52: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás A em escoamento isentrópico

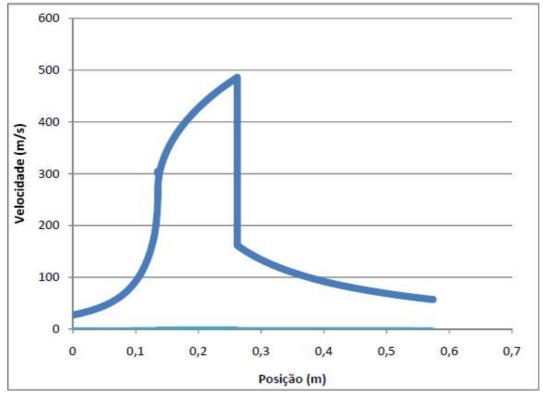


Figura 53: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás A em escoamento isentrópico

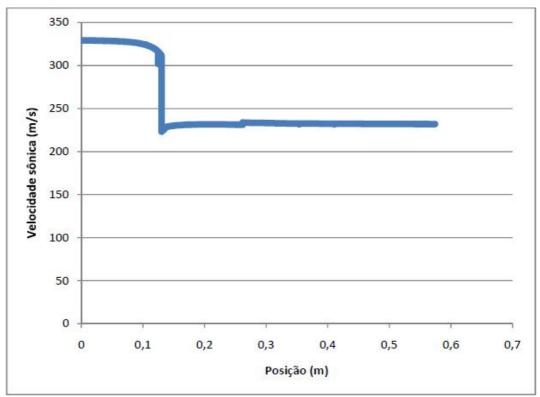


Figura 54: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o Gás A em escoamento isentrópico

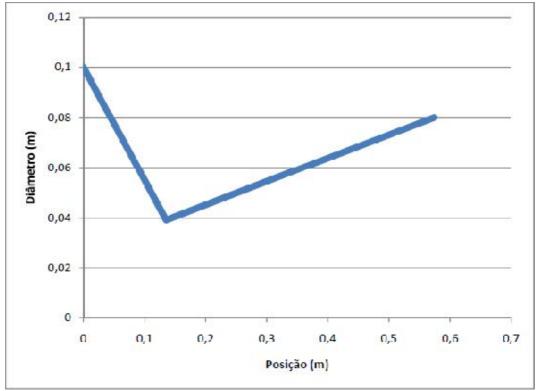


Figura 55: Diâmetro ao longo do separador para o Gás A em escoamento isentrópico

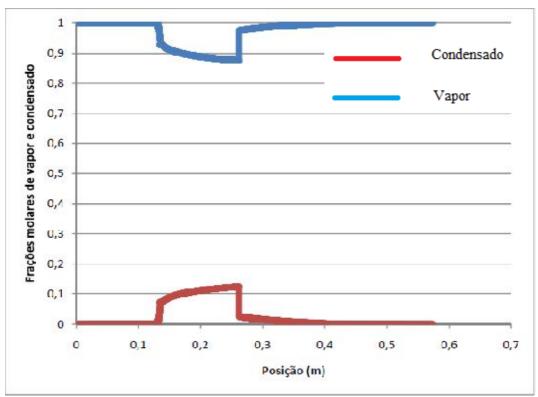


Figura 56: Perfil de fraçãoes molares de vapor e condensado ao longo do separador supersônico parao o gás A em escoamento isentrópico

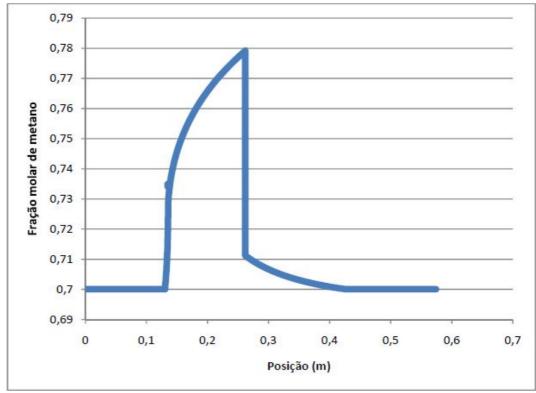


Figura 57: Perfil de fração molar de metano na fase vapor ao longo do separador supersônico para o gás A em escoamento isentrópico

5.1.1.2 Escoamento com 90% de eficiência adiabática

Neste caso o Gás A alcança velocidades menores do que no caso anterior. Isto ocorre porque a diminuição da eficiência adiabática de escoamento aumentou as perdas de energia mecânica do gás por atrito e consequentemente causou aquecimento entálpico. Portanto, neste caso não foram alcançadas temperaturas tão baixas e a eficiência de separação diminui.

Os resultados deste caso estão nas figuras seguintes. As figuras com perfis Ma(x), T(x), P(x), v(x) e c(x) apresentam resultados qualitativamente similares às **Figuras 24, 25, 26, 27, 28** geradas na Sec. 2.4.8 para GI. Por exemplo, as singularidades $\pm \infty$ para as inclinações dos perfis T(x), P(x), Ma(x), v(x), c(x) na garganta com Ma=1, previstas pelas Eqs. (2.29a) e (2.29b), e os comportamentos destas inclinações fora da garganta, previstas pelas Eqs. (2.29c), são cumpridas sem exceção.

Também, devido à menor eficiência adiabática, o fluido chega à pressão de choque normal (15 bar) com menor energia cinética que no caso anterior. Devido a este decréscimo, o fluido alcança um menor Número de Mach (1.962) no choque e menor desaceleração obtendo Número de Mach de 0.709 no pós-choque com queda de 1.253 (**Figura 58**). O fluido apresenta perda de energia mecânica por atrito maior do que no caso anterior, de modo que atinge com menor energia cinética a pressão de choque. Portanto, como a pressão recuperada (pressão pós-choque) é função da energia cinética pré-choque, a recuperação de pressão (54.79% da pressão inicial) é inferior à do caso anterior (**Figura 59**).

Por apresentar recuperação de pressão menor que o caso anterior, também apresenta menor resfriamento na aceleração do fluido com -43.9°C no pré-choque, e menor aquecimento no choque com 0.136°C no pós-choque (**Figura 60**). O fluido alcança menor energia cinética no pré-choque em relação ao caso anterior, devido à maior perda mecânica por atrito, obtendo 461.15 m/s no pré-choque e menor desaceleração de 288.46 m/s, com 172.69 m/s no pós-choque (**Figura 61**). Como a velocidade sônica responde pelo inverso da variação da densidade com pressão em entropia constante, com maior entalpia, esta dependência é menor e a velocidade sônica é maior; i.e. $\overline{H} \uparrow \Rightarrow T \uparrow \Rightarrow c \uparrow$. No caso, há maior perda mecânica por atrito do que o caso anterior, fazendo com que o gás escoe mais aquecido e com maiores velocidades sônicas (**Figura 62**). Aqui também há pequeno aumento da velocidade sônica com o início da condensação devido ao ingresso de líquido na corrente

A **Figura 63** apresenta o diâmetro ao longo do 3S, sendo evidentes os comprimentos das seções e total do 3S (abaixo de 0.6m) e o respectivo diâmetro de garganta D_T =0.04m.

Demonstra-se através da **Figura 64** e da **Figura 65** do ponto de vista de redução de HCDP do gás, a localização ótima para remoção de condensado no 3S seria o ponto justo a montante do choque normal, pois é onde a fração molar de metano na fase gás e a fração de condensado encontram seu máximo. Além disso, a **Figura 65** mostra que por não haver a separação do condensado e devido à recuperação de entalpia graças ao choque normal, a revaporização do gás A é quase completa e, portanto, a fração molar de metano no gás na saída do 3S aproxima-se do valor de entrada (**Figura 65**). Há presença de condensado na saída do 3S para este caso pois a recuperação de entalpia é menor do que no caso anterior.

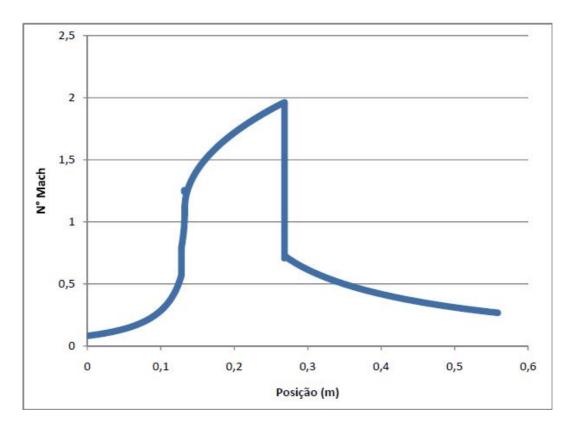


Figura 58: Perfil do número de Mach ao longo do separador para o Gás A com 90% de eficiência adiabática

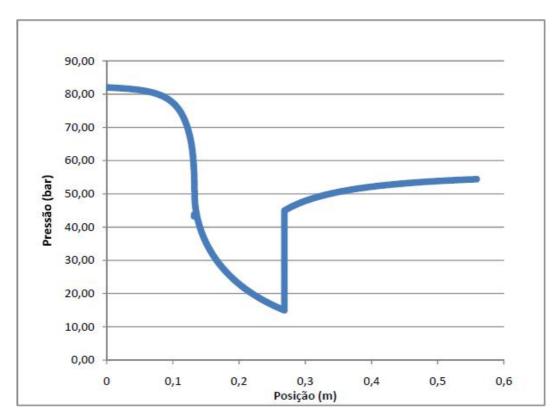


Figura 59: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás A com 90% de eficiência adiabática

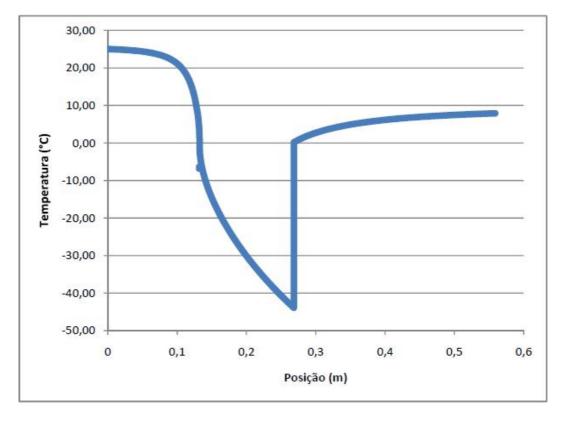


Figura 60: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás A com 90% de eficiência adiabática

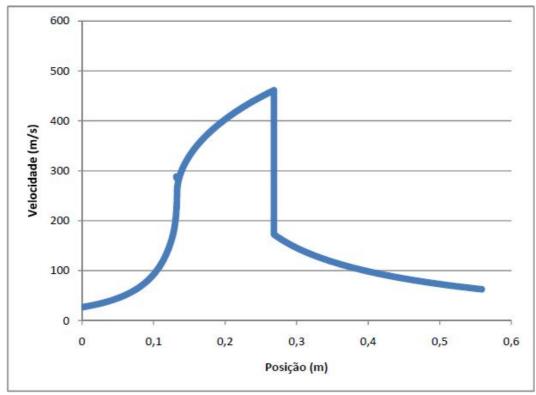


Figura 61: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás A com 90% de eficiência adiabática

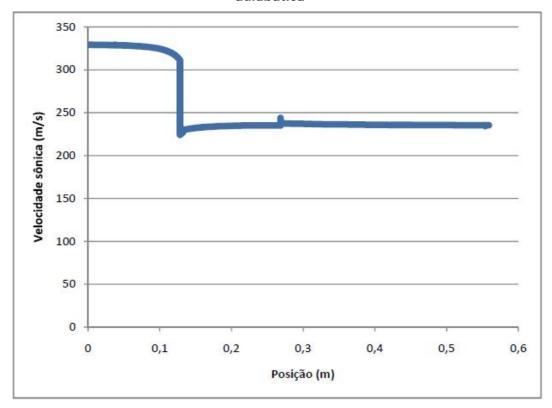


Figura 62: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para Gás A com 90% de eficiência adiabática

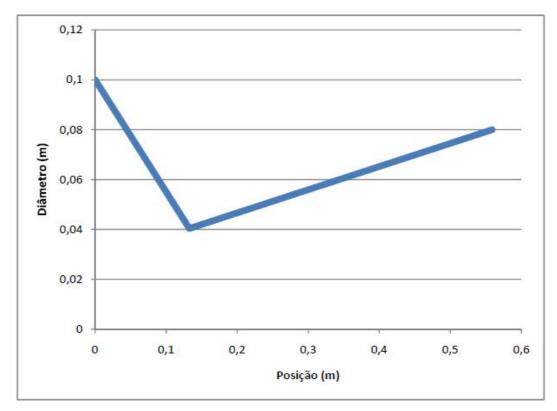


Figura 63: Diâmetro ao longo do separador para o Gás A com 90% de eficiência adiabática

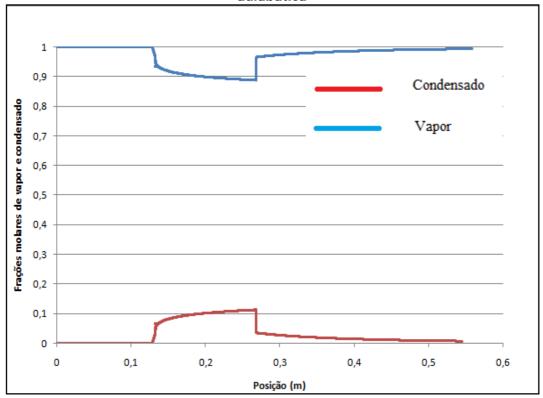


Figura 64: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás A com 90% de eficiência adiabática

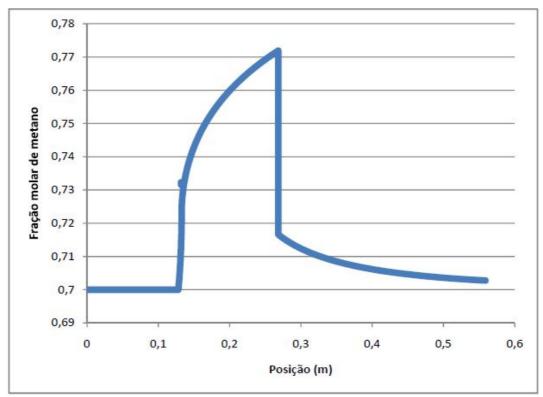


Figura 65: Perfil de fração molar de metano na fase vapor ao longo do separador supersônico para o gás A com 90% de eficiência adiabática

5.1.1.3 Escoamento com 80% de eficiência adiabática

O Gás A alcança velocidades menores que o caso anterior pela mesma razão já analisada, ou seja, a diminuição da eficiência adiabática aumenta as perdas mecânicas por atrito, com consequente maior aquecimento. Portanto, no caso, não foram alcançadas temperaturas tão baixas e a eficiência de separação cai. Mas, ainda assim, as figuras com perfis Ma(x), T(x), P(x), v(x) e c(x) apresentam resultados qualitativamente similares às **Figuras 24, 25, 26, 27, 28** geradas na Sec. 2.4.8 para GI. Por exemplo, as singularidades $\pm \infty$ para as inclinações dos perfis T(x), P(x), Ma(x), v(x), c(x) na garganta com Ma=1, previstas pelas Eqs. (2.29a) e (2.29b), e os comportamentos destas inclinações fora da garganta, previstas pelas Eqs. (2.29c), são cumpridas sem exceção.

Devido à menor eficiência adiabática, o fluido chega à pressão de choque normal (15 bar) com menor energia cinética que no caso anterior. Devido a esta queda, o fluido alcança menor Número de Mach 1.822 no choque e uma menor desaceleração ocorre, obtendo Mach 0.762 no pós-choque (**Figura 66**). Como o fluido tem maior perda mecânica por atrito que no caso anterior, há menor energia cinética na chegada no pré-choque e, como a compressão no choque cresce com Mach pré-choque, a recuperação de pressão de 47.28% da pressão inicial, é inferior à do caso anterior (**Figura 67**). Por apresentar menor recuperação de pressão, aqui também ocorre menor resfriamento pela aceleração, atingindo apenas -41.2°C no pré-choque e menor aquecimento no choque com -3.96°C no pós-choque (**Figura 68**). O fluido atinge menor energia cinética no pré-choque relativamente ao caso anterior, alcançando 434.86 m/s no pré-choque e menor desaceleração de 249.07 m/s dando 185.79 m/s pós-choque (**Figura 69**).

A velocidade sônica é tanto maior quanto maior o conteúdo entálpico do gás, i.e. sua temperatura (basta ver a própria fórmula c para GI na Eq. (2.30b)). Assim, no caso, o fluido está em média mais aquecido que no caso anterior devido ao maior atrito, apresentando perfil de velocidade sônica no 3S mais elevado que o anterior (**Figura 70**). Embora também aqui haja um outro efeito responsável por leve ascensão da velocidade sônica justo após a garganta que é a condensação, pelo simples fato de introduzir líquido na corrente, criando uma velocidade sônica bifásica superior à de gás seco. Por fim, a **Figura 71** apresenta o perfil de diâmetro ao longo do 3S, sendo evidentes os comprimentos das seções e total (próximo a 0.55m) do 3S e o respectivo diâmetro de garganta um pouco acima de 0.04m

Assim como nos casos anteriores a localização ótima para remoção de condensado no 3S (do ponto de vista de redução de HCDP do gás) é justo a montante do choque normal (**Figura 72** e **Figura 73**), pois é onde a frações molar de metano na fase gás e a fração de condensado encontram seu máximo. Demonstra-se também pela **Figura 73** que por não haver a separação do condensado e devido à recuperação de entalpia graças ao choque normal, a revaporização do gás A é quase completa e portanto a fração molar de metano no gás na saída do 3S aproxima-se do valor de entrada. A presença de condensado na saída do 3S para este caso é maior do que a anterior, pois há uma menor recuperação de entalpia.

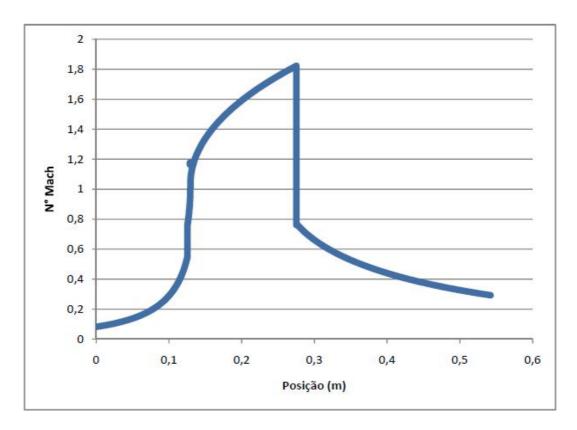


Figura 66: Perfil do número de Mach ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência adiabática

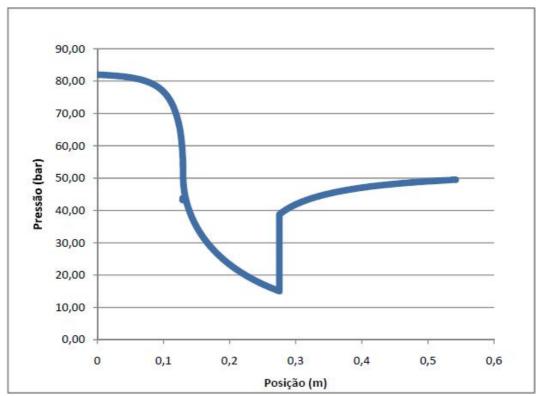


Figura 67: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência adiabática

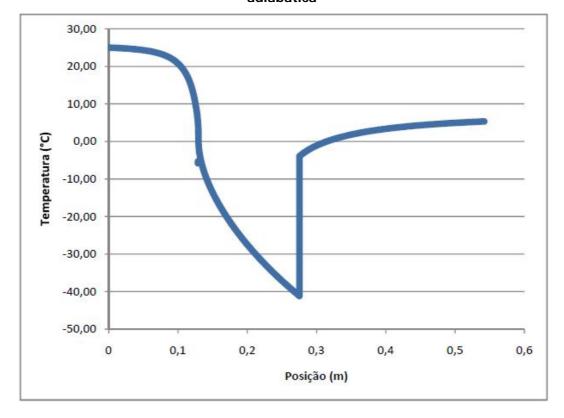


Figura 68: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência adiabática

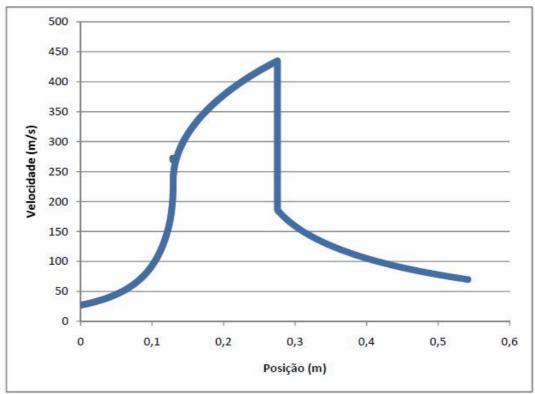


Figura 69: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência adiabática

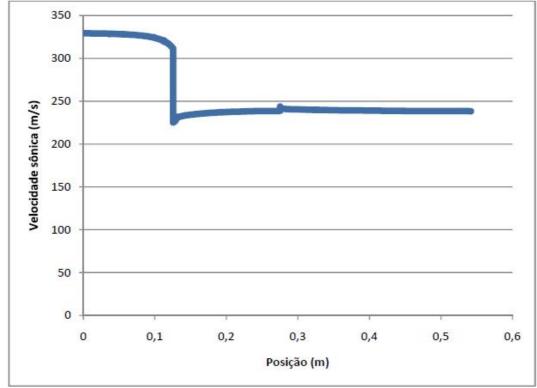


Figura 70: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência adiabática

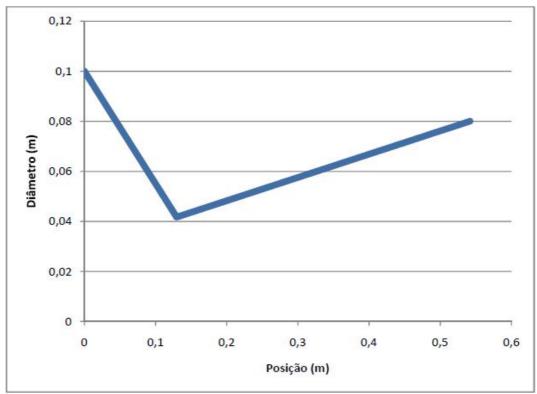


Figura 71: Diâmetro ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência adiabática

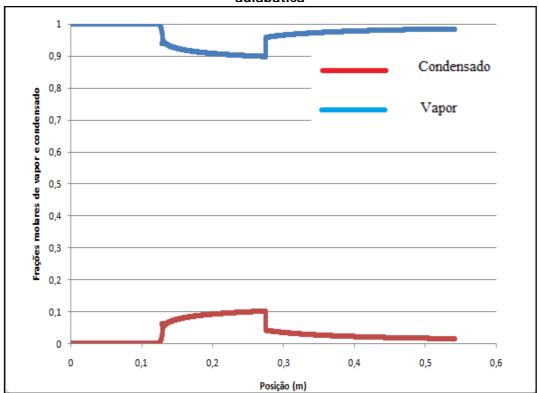


Figura 72: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência adiabática

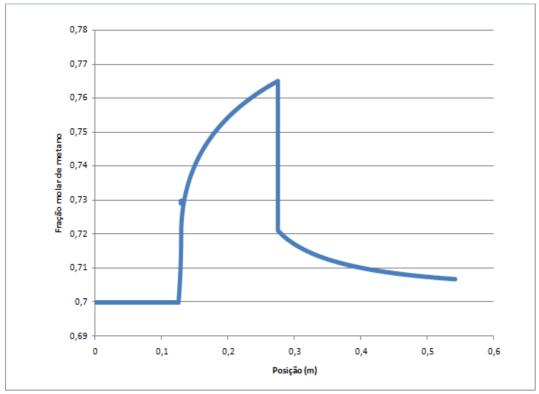


Figura 73: Perfil de fraçãomolar de metano na fase vapor ao longo do separador para o Gás A com 80% de eficiência adiabática

5.1.1.4 Escoamento com 73% de eficiência adiabática

O Gás A alcança velocidades ainda menores que no caso anterior. A queda da eficiência adiabática de escoamento eleva a perda mecânica por atrito, aquecendo mais o gás, resultando em resfriamento modesto. O fluido atinge pressão de pré-choque (15 bar) com menor energia cinética que o caso anterior, com menor Número de Mach 1.722 no pré-choque e menor desaceleração de 0.916 dando Mach 0.806 no pós-choque (Figura 74). Como a pressão póschoque cresce com Mach pré-choque, a recuperação de pressão de apenas 42.23% da inicial é inferior à do caso anterior (Figura 75). Devido ao menor Mach pré-choque, este caso apresenta menor resfriamento pela aceleração do fluido de apenas -39.2°C no pré-choque e menor aquecimento no choque chegando a -7.02°C no pós-choque (Figura 76). O fluido atinge o pré-choque com 415.48 m/s, havendo menor desaceleração de 219.12 m/s no choque e 196.36 m/s no pós-choque (Figura 77). O perfil de velocidade sônica deste caso é mais elevado que os anteriores pela maior temperatura média do escoamento devido às razões já discutidas (Figura 78), embora também haja a contribuição da condensação, para elevar a velocidade sônica bifásica, justo após a garganta. A Figura 79 apresenta o perfil de diâmetro no 3S, sendo evidentes os comprimentos das seções e total (pouco abaixo de 0.55m) do 3S e o respectivo diâmetro de garganta de 0.042m. O ponto de máxima geração de condensado e mínimo de HCDP é alcançado justo a montante do choque normal (Figura 80 e Figura 81), sendo este o ponto ótimo para remoção de líquido. Este caso apresenta uma maior fração de condensado na saída do 3S do que o caso anterior por alcançar uma menor recuperação de entalpia.

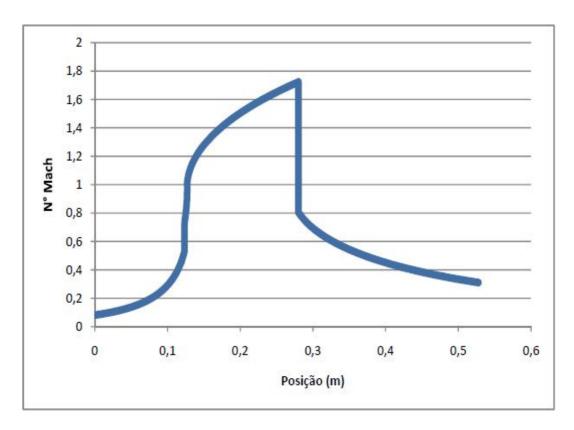


Figura 74: Perfil de número de Mach ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática

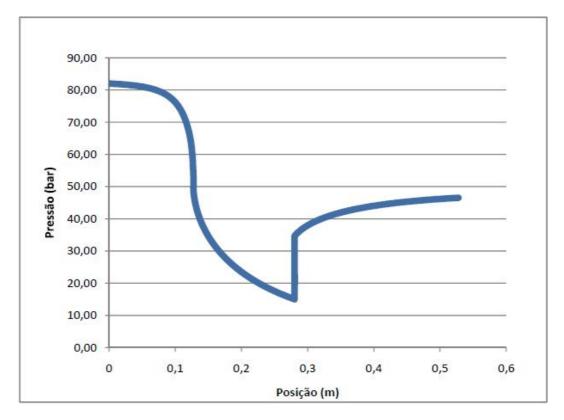


Figura 75: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática

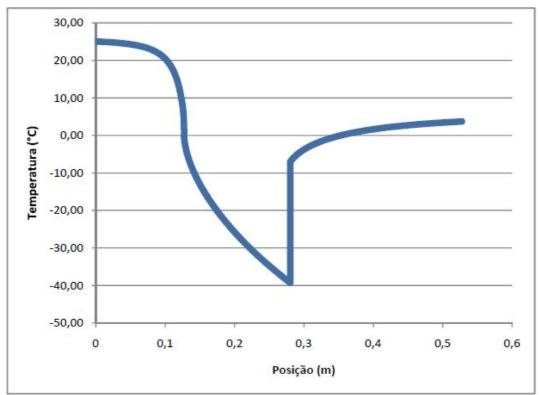


Figura 76: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática

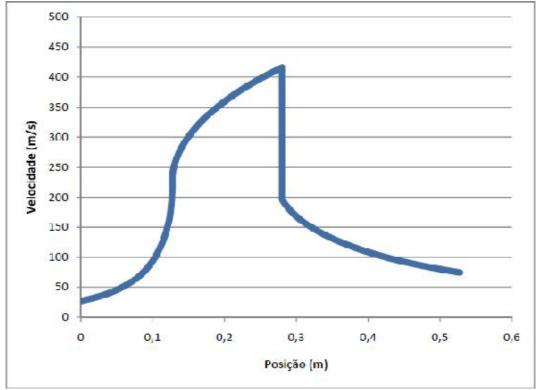


Figura 77: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática

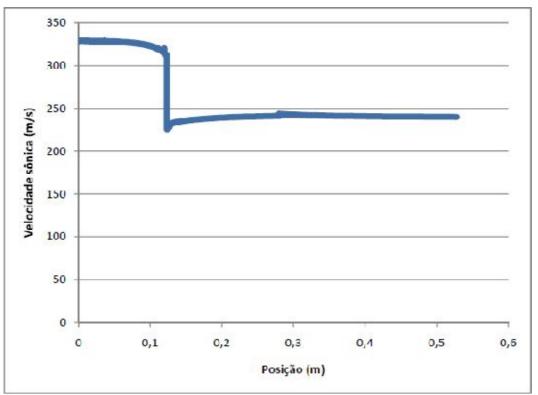


Figura 78: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática

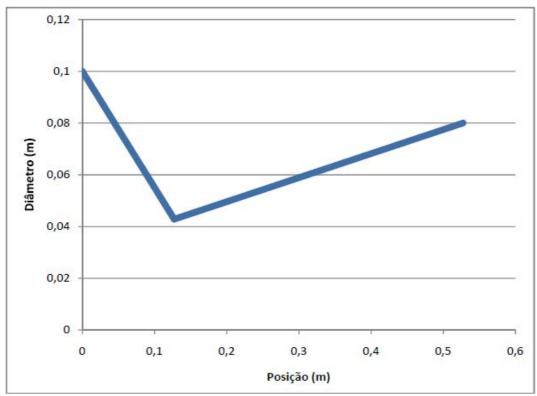


Figura 79: Diâmetro ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática

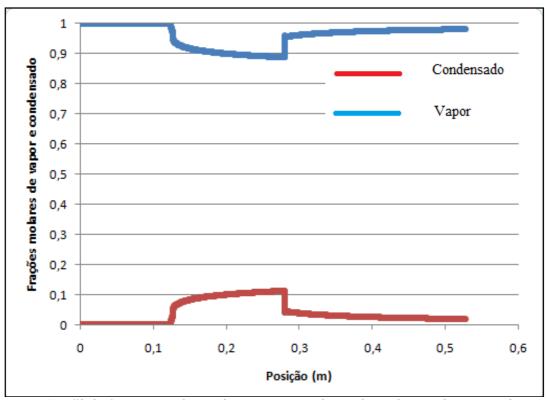


Figura 80: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática

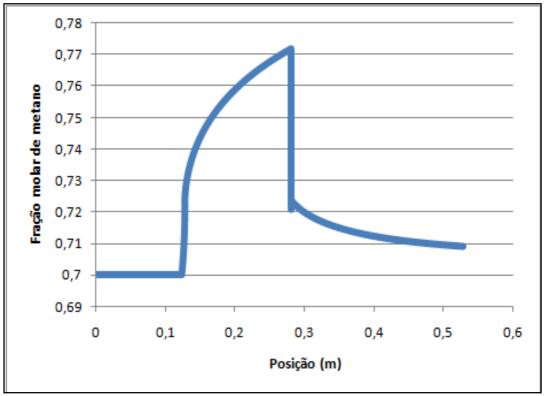


Figura 81: Perfil de fração de metano na fase gás ao longo do separador para o Gás A com 73% de eficiência adiabática

5.1.1.5 Escoamento com 60% de eficiência adiabática

Esta eficiência é a menor de todas, havendo o máximo de perda mecânica por atrito, o máximo aquecimento por atrito, e mínimo resfriamento por aceleração. O fluido chega à pressão de pré-choque (15 bar) com menor energia cinética que o caso anterior, com Mach pré-choque de 1.533, menor desaceleração de 0.629 com Mach pós-choque de 0.904 (Figura 82). Como a pressão pós-choque cresce com Mach pré-choque, a recuperação de pressão de apenas 33.33% da inicial é inferior à do caso anterior (Figura 83). O menor Mach pré-choque implica em menor resfriamento pela aceleração do fluido de -35.7°C no pré-choque e menor aquecimento no choque dando -13.34°C no pós-choque (Figura 84). O fluido alcança menor energia cinética máxima com 376.94 m/s no pré-choque, com menor desaceleração no choque de 68.17 m/s, resultando 220.29 m/s pós-choque (Figura 85). O perfil de velocidade sônica deste caso é mais elevado que os anteriores pela maior temperatura média do escoamento devido às razões já discutidas (Figura 86), embora também seja perceptível um pequeno aumento da velocidade sônica com o início da condensação pela introdução de líquido na corrente, o que cria uma superior velocidade sônica bifásica comparada à de gás seco. A Figura 87 apresenta o perfil de diâmetro no 3S, sendo evidentes os comprimentos das seções e total (próximo de 0.5m) do 3S e o respectivo diâmetro de garganta de 0.044m. O ponto de máxima geração de condensado e mínimo de HCDP é alcançado justo a montante do choque normal (Figura 88 e Figura 89), sendo este o ponto ótimo para remoção de líquido.

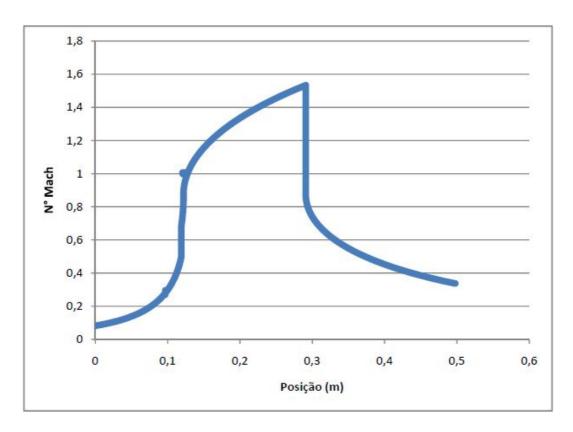


Figura 82: Perfil de número de Mach ao longo do separador para o Gás A com 60% de eficiência adiabática

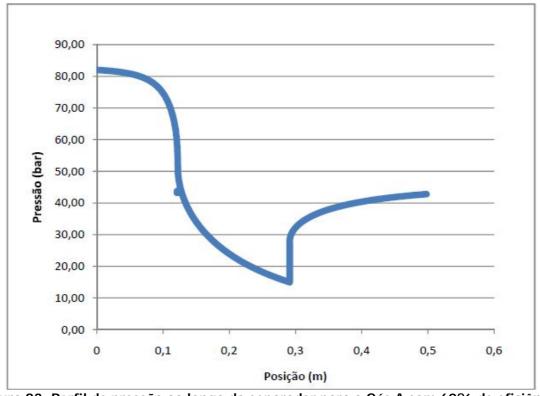


Figura 83: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás A com 60% de eficiência adiabática

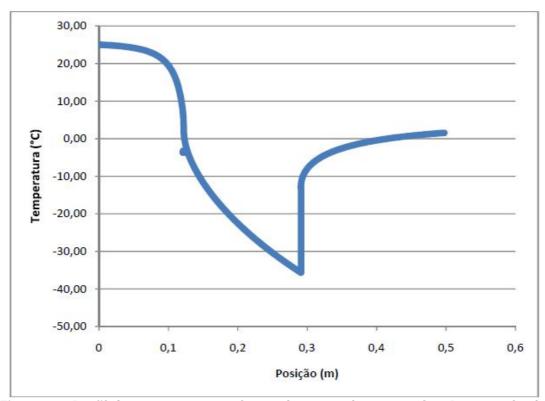


Figura 84: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás A com 60% de eficiência adiabática

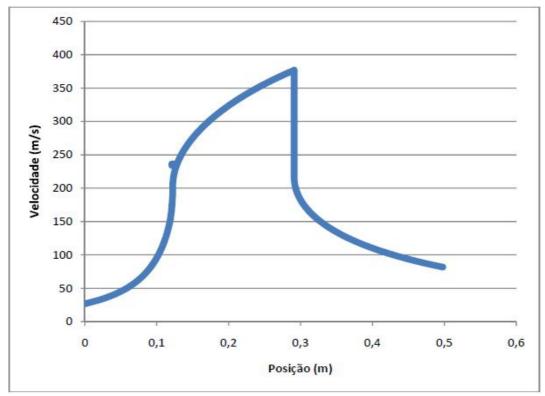


Figura 85: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás A com 60% de eficiência adiabática

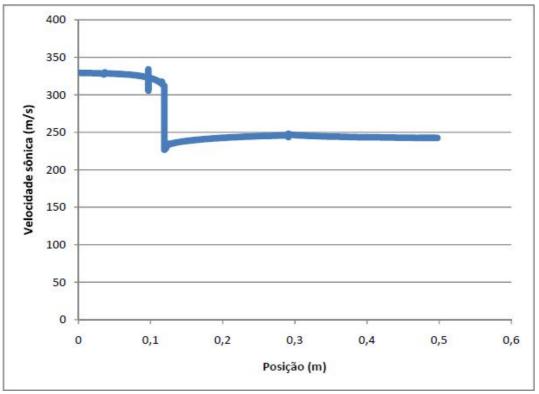


Figura 86: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o Gás A com 60% de eficiência adiabática

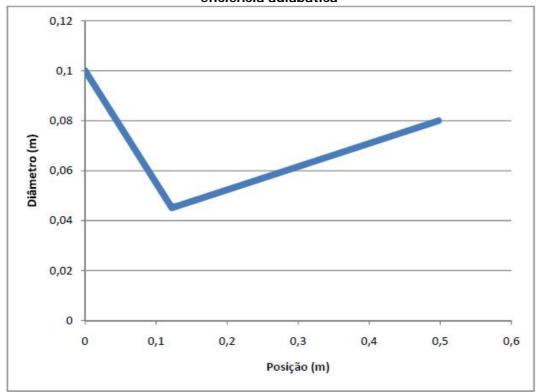


Figura 87: Diâmetro ao longo do separador para o Gás A com 60% de eficiência adiabática

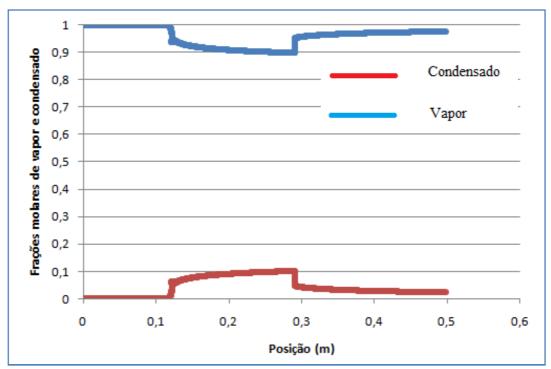


Figura 88: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás A com 60% de eficiência adiabática

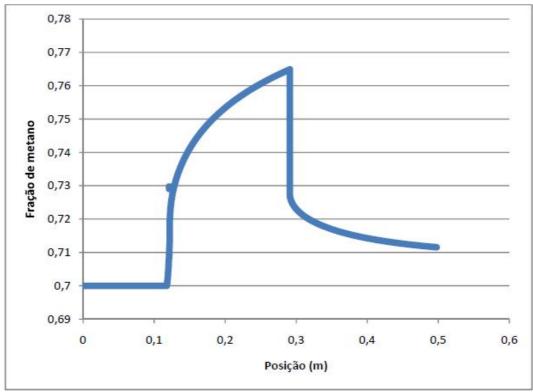


Figura 89: Perfil de fração de metano na fase gás ao longo do separador para o Gás A com 60% de eficiência adiabática

5.1.1.6 Comparação entre as diferentes eficiências

Na**Figura 90** observam-se as diferentes trajetórias obtidas para cada escoamento EC-1D-E com sua respectiva eficiência adiabática, projetadas sobre o Locus *P X T* de ELV para o Gás A. O Locus *P X T* de ELV é o domínio de todos os estados bifásicos em ELV para Gás A, sendo 2-Dimensional *sob composição total constante* pelo Teorema de Duhem. O Locus *P X T* de ELV é limitado por três loci: o Locus de Bolha de Gás A, o Locus de Orvalho de Gás A e o Ponto Crítico de Gás A. Pela Regra das Fases o Ponto Crítico é único (invariante), enquanto os loci de bolha e orvalho são 1-Dimensionais (i.e. curvas) sob composição total constante. O Locus *P X T* de ELV foi traçado por HYSYS.

Com teor de H₂O no gás, haveria agora a presença do Locus *P X T* de ELLV que também é 2-Dimensional *sob composição total constante* pelo Teorema de Duhem e que superpõe com o Locus *P X T* de ELV, tornando-o metaestável nestas superposições. Isto é, um mesmo ponto (*P*,*T*) *sob composição total constante* corresponde a duas soluções de equilíbrio, uma ELV e outra ELLV, tendo a segunda menor valor de Energia Livre de Gibbs e sendo globalmente estável. No caso do Gás A não há H₂O e, portanto, restringimo-nos ao Locus *P X T* de ELV de hidrocarbonetos.

Em uma determinada trajetória EC-1D-E *P X T*, a condensação se inicia quando a trajetória toca o Locus de Orvalho do Gás A na curva vermelha. Todas as trajetórias EC-1D-E *P X T* iniciam-se no mesmo ponto e têm diferentes pontos de término. O ponto onde todas as trajetórias se iniciam é o mesmo estado de Gás A superaquecido na Tabela 3 a 82 bar e 25°C. As curvas de escoamento EC-1D-E *P X T* mergulham no Locus de ELV penetrando-o em certa extensão da direita para esquerda e de cima para baixo. O ponto mais frio das curvas EC-1D-E (mais à esquerda e mais abaixo) corresponde à temperatura pré-choque e pressão pré-choque (15bar). Quanto mais resfriamento é gerado no EC-1D-E mais à esquerda as curvas EC-1D-E alcançam, e, portanto, mais profundamente no Locus *P X T* de ELV elas penetram e mais líquido é formado no âmago do 3S no frontal pré-choque. A **Figura 90** e **Figura 91** comprovam que HYSYS está resolvendo a TCD 3S com total rigor ao respeitar a segregação de fases condensadas. Pode ser observado, especialmente na ampliação **Figura 91**, que cada trajetória EC-1D-E contém *03 trechos distintos* em cujas emendas há descontinuidade de inclinação, sendo a mais perceptível a emenda dos Trechos 1 e 2 onde há o frontal de choque normal:

• Trecho 1: Expansão e profundo resfriamento com condensação até atingir o préchoque. Corresponde à descida EC-1D-E desde o Gás A de entrada superaquecido passando por descontinuidade no coeficiente $\frac{dT}{dP}\Big|_{EC-1D-E}$ ao cruzar a fronteira de orvalho, onde *se inicia a condensação com liberação de calor latente* que amortece o resfriamento gerado pela aceleração; i.e. agora é necessário maior redução de pressão por grau °C reduzido. O término do Trecho 1 é o ponto EC-1D-E mais interior do Locus *P X T* de ELV, onde a fração de líquido produzido é máxima.

- Trecho 2: Ocorre o súbito aquecimento e recompressão do choque. Este trecho é retilíneo e contém apenas dois pontos: o pré-choque e o pós-choque. No Trecho 2 o deslocamento ocorre em busca de maior temperatura e maior pressão, retornando bruscamente em direção ao bordo de orvalho mais acima e à direita, porém sem atingilo. Ou seja, no choque, não havendo retirada dos condensados no pré-choque, haverá grande redução da fração liquefeita pela evaporação do condensado, mas ainda restará algum material liquefeito ao final do choque.
- Trecho 3: Com compressão e aquecimento suaves na saída da seção divergente do 3S, a trajetória EC-1D-E prossegue do choque rumo ao bordo de orvalho mais acima, eventualmente cruzando-o em alguns casos, situação em que o gás emerge da TCD seco. Em outros casos, o Trecho 3 termina no interior do Locus P X T de ELV, ou seja, o gás emerge da TCD úmido e com condensado.

Conforme a eficiência adiabática cresce, maior é a condensação alcançada ao atingir-se o pré-choque. Ou seja, mais eficiente é o resfriamento e formação de condensado. O motivo disto é que a eficiência adiabática traduz inversamente o grau de atrito no EC-1D-E. Quanto menor a eficiência adiabática, maior a fração da perda entálpica que seria transformada em energia cinética que retorna ao fluido por fricção, aquecendo-o. Isto é, o EC-1D-E é adiabático, assim a energia liberada por atrito retorna ao fluido como entalpia aquecendo-o.

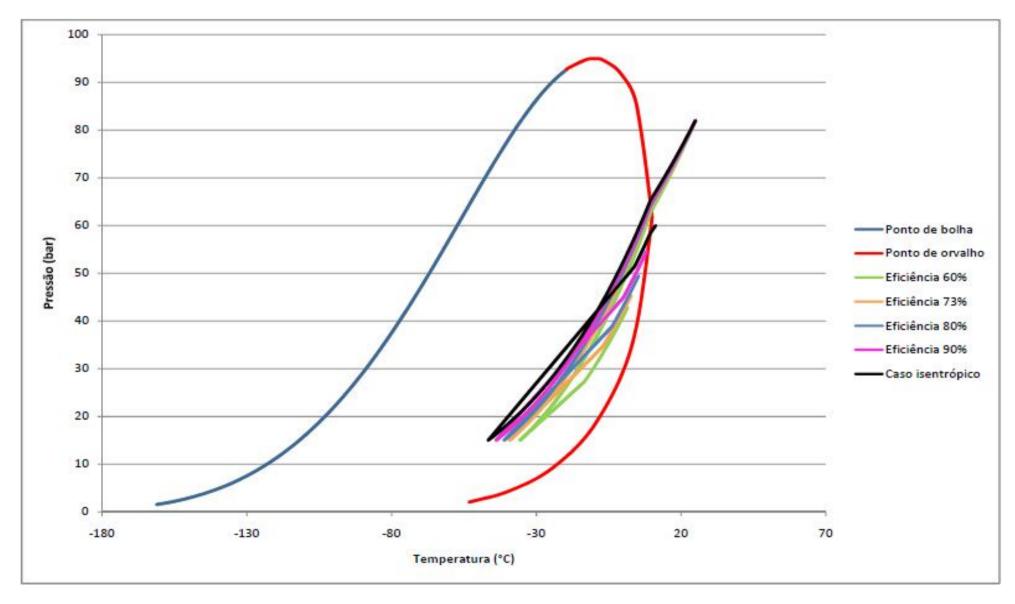


Figura 90: Comparação do desempenho 3S para diferentes eficiências adiabáticas com o Gás A

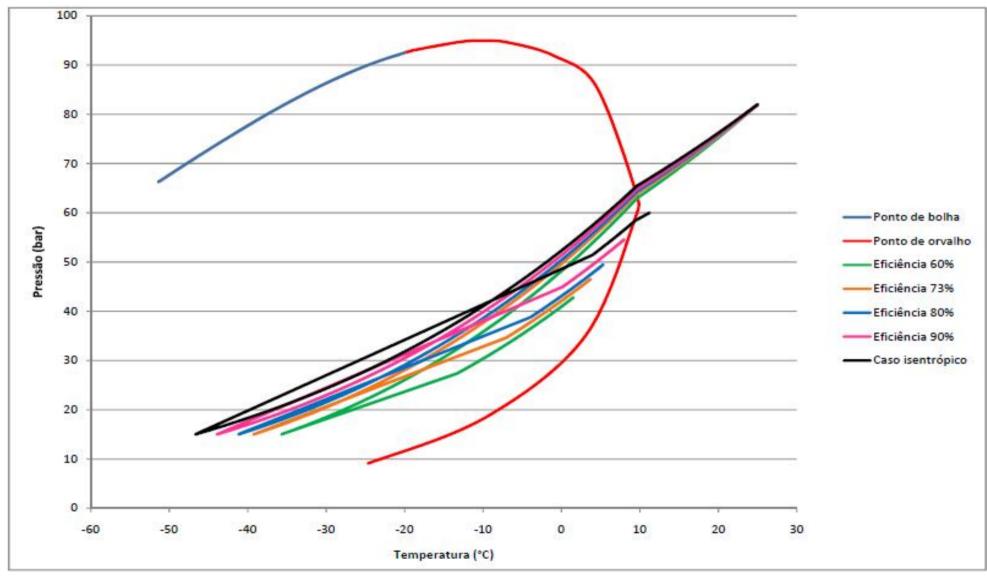


Figura 91: Comparação do desempenho 3S para diferentes eficiências adiabáticas com o Gás A

5.1.2 Análise de sensibilidade do modelo à eficiência adiabática para o Gás B

São considerados os mesmos casos de escoamento compressível adiabático com condensação no 3S: escoamento compressível isentrópico e escoamentos compressíveis adiabáticos com 90%, 80%, 73% e 60% de eficiência adiabática. Em cada um dos casos são apresentados os perfis Mach, pressão, temperatura, velocidade, velocidade sônica e diâmetro versus posição no 3S. Nesta última figura fica evidente o comprimento das seções do 3S (L_C , L_D), o comprimento total do separador (L), e o diâmetro da garganta (D_T).

Ao final as trajetórias de estado dos casos são locadas sobre o Locus *P X T* de ELV do Gás B, identificando extensões de condensação em cada caso.

O caso chamado "isentrópico", na verdade não é estritamente isentrópico porque o choque normal adiabático e irreversível faz criação positiva de entropia. Apenas no escoamento aplica-se o termo "isentrópico".

Como as análises aqui executadas para o Gás B são análogas às apresentadas anteriormente para Gás A, os resultados serão sumariamente discutidos. A diferença principal a ser observada é que Gás B é mais rico em condensáveis que Gás A. Assim, haverá maior condensação com maior liberação de calor latente e, portanto, maiores temperaturas resultarão no ponto mais frio situado no pré-choque comparativamente aos casos do Gás A.

Outro aspecto é que todos os resultados do Gás B, nas várias eficiências adiabáticas, desenvolvem perfis Ma(x), T(x), P(x), v(x) e c(x) que apresentam resultados qualitativamente similares às **Figuras 24, 25, 26, 27, 28** geradas na Sec. 2.4.8 para GI. Por exemplo, as singularidades $\pm \infty$ para as inclinações dos perfis T(x), P(x), Ma(x), v(x), c(x) na garganta com Ma=1, previstas pelas Eqs. (2.29a) e (2.29b), e os comportamentos destas inclinações fora da garganta, previstas pelas Eqs. (2.29c), são cumpridas sem exceção em todos os casos Gás B.

5.1.2.1 Escoamento isentrópico

O Gás B gera maior velocidade no 3S porque não há atrito, havendo maior resfriamento e maior condensação. Tem-se Mach 2.094 no pré-choque e 0.609 no pós-choque. Devido à ausência de atrito, o Mach pré-choque é máximo comparativamente aos demais (Figura 92) e o fluido atinge a pressão de choque (15 bar) com máxima energia cinética dentre todos os casos do Gás B. Como a pressão pós-choque cresce com Mach pré-choque, este é o caso em que há a maior recuperação de pressão na descarga a 62.09% da inicial (Figura 93). O resfriamento pela maior aceleração do fluido é máximo comparativamente aos demais dando -26.88°C no pré-choque, havendo também o maior aquecimento no choque pela maior razão de compressão com temperatura pós-choque de 21.88°C (Figura 94). O fluido alcança 457.4 m/s no pré-choque, com máxima desaceleração de 308.9 m/s no choque, resultando 148.5 m/s pós-choque (**Figura 95**). A velocidade sônica cresce com o conteúdo entálpico (temperatura) do gás, de modo que, como o resfriamento é máximo aqui, resultam menores valores de velocidade sônica no perfil da Figura 96. Também é perceptível um aumento da velocidade sônica com o início da condensação (efeito este superior ao observado no Gás A na situação análoga), já que a velocidade sônica multifásica é maior do que em um gás monofásico devido à presença de líquido. A Figura 97 apresenta o perfil de diâmetros no 3S, sendo evidentes os comprimentos das seções e total (pouco acima de 0.55m) e o diâmetro de garganta de 0.04m. O ponto de máxima geração de condensado e mínimo ponto de orvalho é alcançado justo a montante do choque normal (Figura 98 e Figura 99), sendo este o ponto ótimo para remoção de líquido

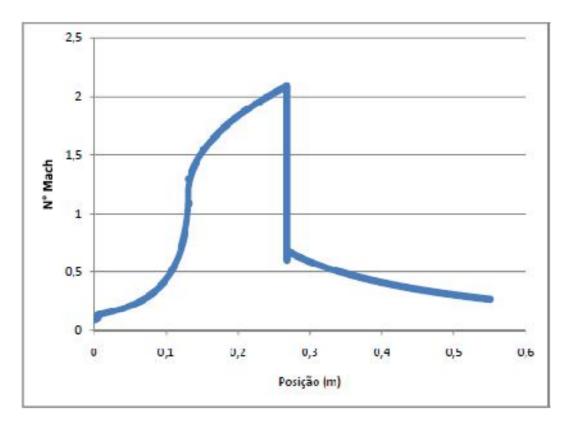


Figura 92: Perfil do número de Mach ao longo do separador para o Gás B em escoamento isentrópico

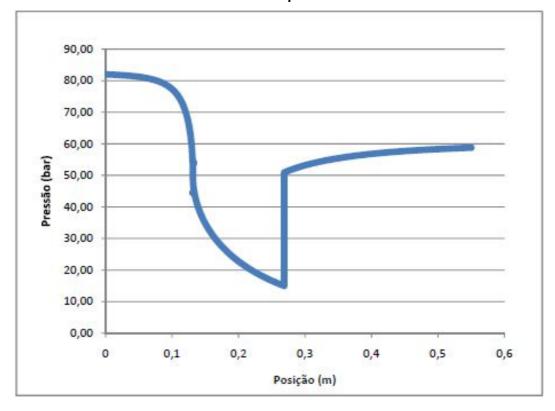


Figura 93: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás B em escoamento isentrópico

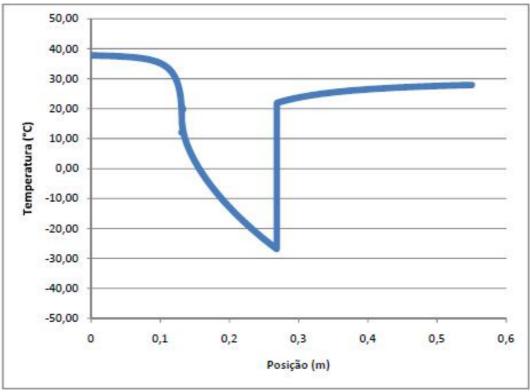


Figura 94: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás B em escoamento isentrópico

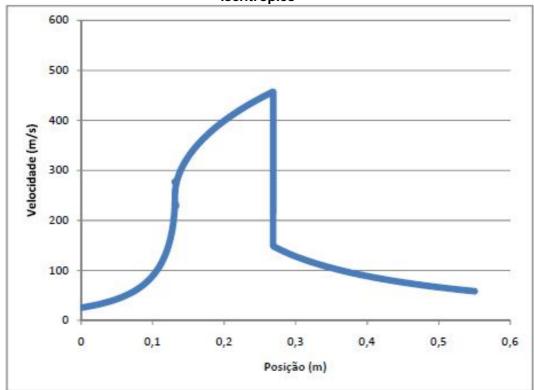


Figura 95: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás B em escoamento isentrópico

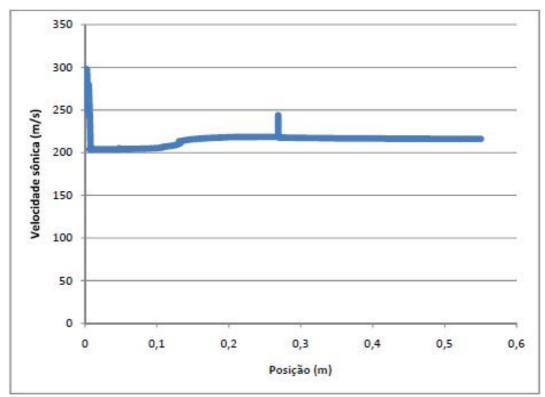


Figura 96: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o Gás B em escoamento isentrópico

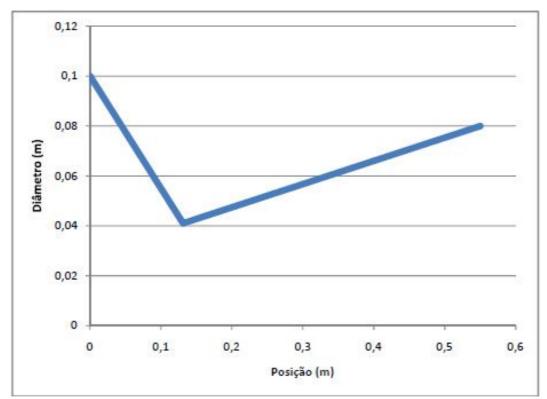


Figura 97: Diâmetro ao longo do separador para o Gás B em escoamento isentrópico

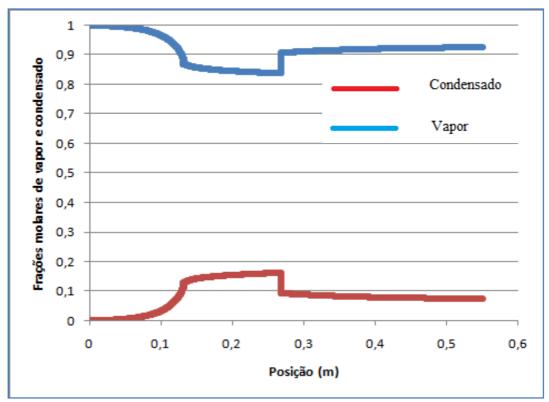


Figura 98: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás B em escoamento isentrópico

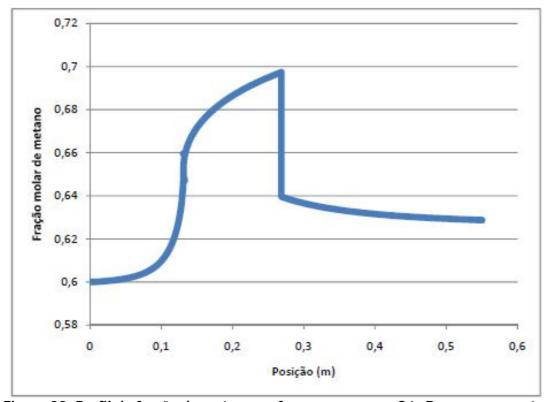


Figura 99: Perfil de fração de metano na fase vapor para o Gás B em escoamento isentrópico

5.1.2.2 Escoamento com 90% de eficiência adiabática

O Gás B alcança velocidades menores do que o caso anterior devido às maiores perdas mecânicas por atrito pela menor eficiência, que causam aquecimento e reduzem o resfriamento. O fluido chega à pressão pré-choque (15 bar) com menor energia cinética do que no caso anterior, atingindo Mach 1.959 pré-choque e Mach 0.652 pós-choque (Figura 100). Como a pressão pós-choque cresce com o Mach pré-choque, a recuperação de pressão é de 55.67% da inicial e inferior à do caso anterior (Figura 101). Como há menor Mach pré-choque, há menor resfriamento pela aceleração do fluido dando -24.5°C no pré-choque e menor aquecimento no choque com 18.11°C pós-choque (Figura 102). O fluido alcançou 434m/s pré-choque e 172.69 m/s pós-choque (Figura 103). A velocidade sônica cresce com a temperatura do gás, de modo que, sendo o resfriamento inferior ao caso anterior, resultam maiores velocidades sônicas na Figura 104. Também é visível que c cresce após o início da condensação a jusante da garganta. A Figura 105 traz o perfil de diâmetros no 3S com os comprimentos das seções e total (≈0.55m) e o diâmetro de garganta de 0.042m. O ponto de máxima geração de condensado e mínimo ponto de orvalho é alcançado justo a montante do choque normal (Figura 106 e Figura 107), sendo este o ponto ótimo para remoção de líquido

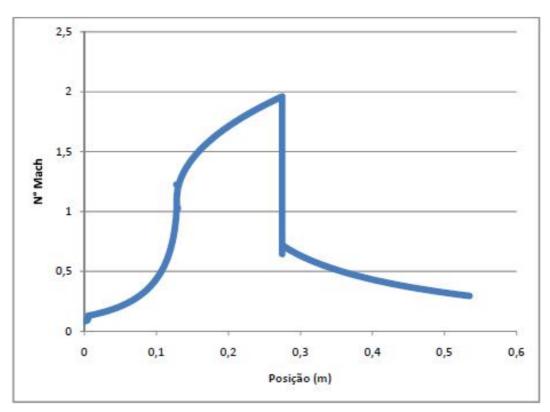


Figura 100: Perfil do número de Mach ao longo do separador para o Gás B com 90% de eficiência adiabática

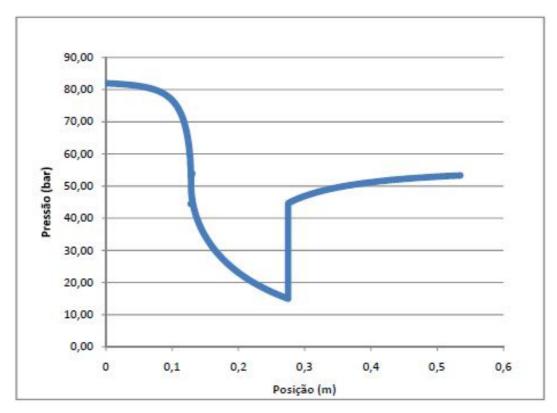


Figura 101: Perfil de pressão ao longo do separador para o Gás B com 90% de eficiência adiabática

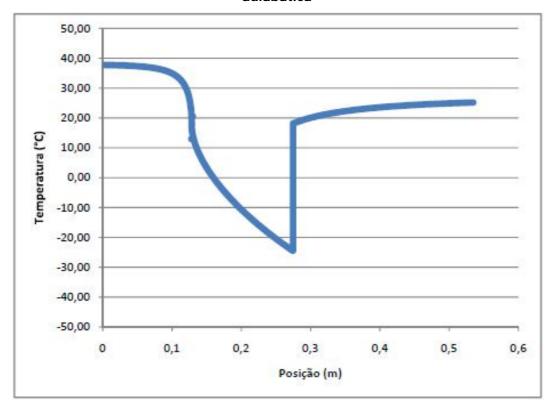


Figura 102: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás B com 90% de eficiência adiabática

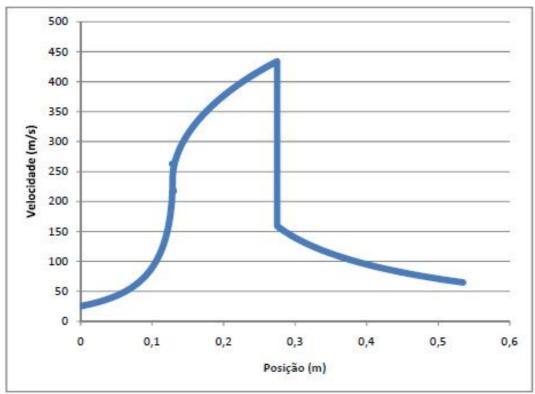


Figura 103: Perfil de velocidade ao longo do separador para o Gás B com 90% de eficiência adiabática

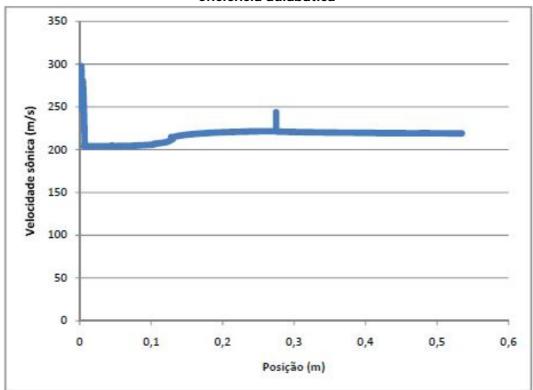


Figura 104: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o Gás B com 90% de eficiência adiabática

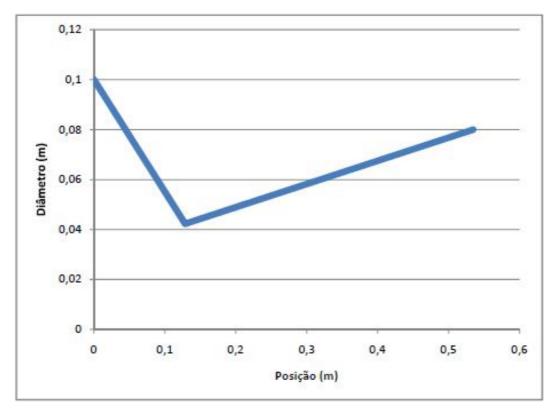


Figura 105: Diâmetro ao longo do separador para o Gás B com 90% de eficiência adiabática

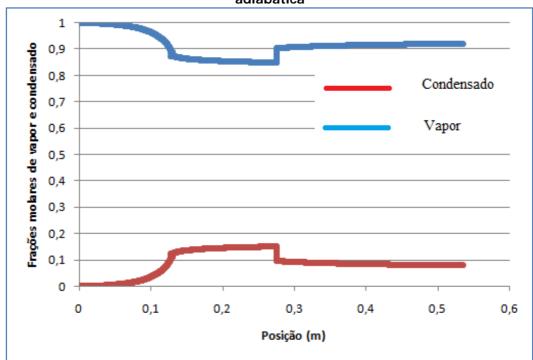


Figura 106: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás B com 90% de eficiência adiabática

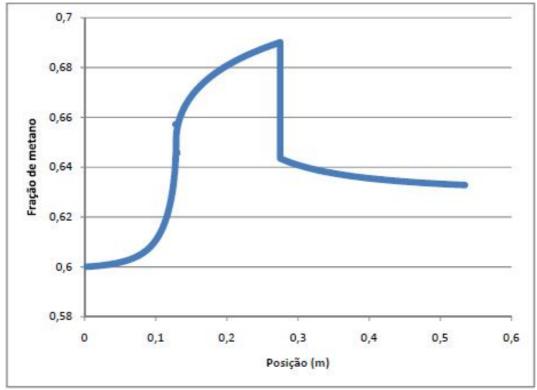


Figura 107: Perfil de fração de metano na fase vapor para o Gás B com 90% de eficiência adiabática

5.1.2.3 Escoamento com 80% de eficiência adiabática

O Gás B alcança velocidades ainda menores que no caso anterior devido às maiores perdas mecânicas pelo atrito, dada a menor eficiência, resultando em aquecimento e menor resfriamento pelo efeito cinético. O fluido chega à pressão de pré-choque (15 bar) com menor energia cinética que no caso anterior, alcançando menor Mach 1.823 pré-choque e menor desaceleração com Mach 0.703 pós-choque (**Figura 108**). O menor Mach pré-choque resulta em menor pressão pós-choque, acarretando recuperação de pressão de 47.15% da inicial e inferior à do caso anterior (**Figura 109**). O menor resfriamento devido à menor aceleração do fluido implica em -22.16°C pré-choque e menor aquecimento no choque dando 14.05°C pós-choque (**Figura 110**). O fluido alcançou 409.27 m/s pré-choque e 171.31 m/s pós-choque (**Figura 111**). A velocidade sônica cresce com o conteúdo entálpico (temperatura) do gás, de modo que, como o resfriamento é inferior relativamente ao caso anterior, resultam maiores velocidades sônicas no perfil da **Figura 112**. Também é visível o crescimento de *c* por contribuição da entrada de líquido na corrente devido à condensação a jusante da garganta. Por fim, a **Figura 113** apresenta o perfil de diâmetros no 3S sendo evidentes os comprimentos das seções e total (0.53m) e o diâmetro de garganta de 0.044m. O ponto de máxima geração

de condensado e mínimo ponto de orvalho é alcançado justo a montante do choque normal (**Figura 114** e **Figura 115**), sendo este o ponto ótimo para remoção de líquido

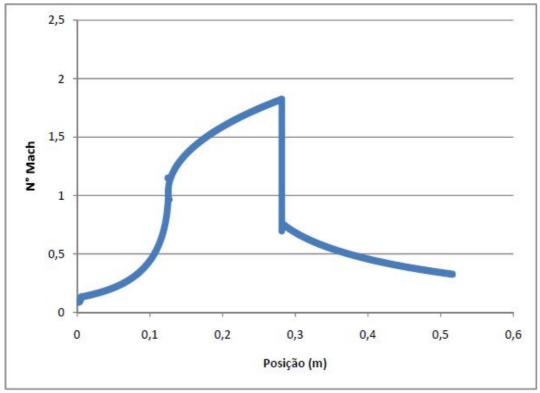


Figura 108: Perfil do número de Mach ao longo do separador para o gás B com 80% de eficiência adiabática

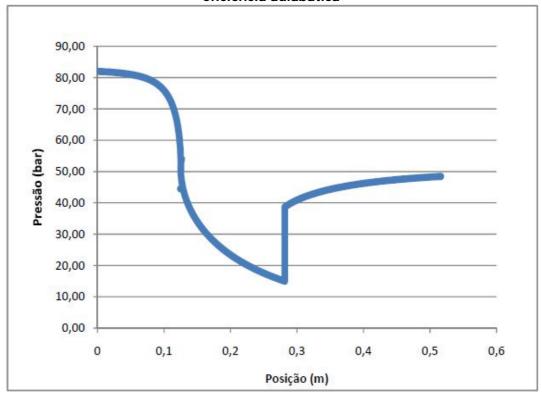


Figura 109: Perfil de pressão ao longo do separador para o gás B com 80% de eficiência adiabática

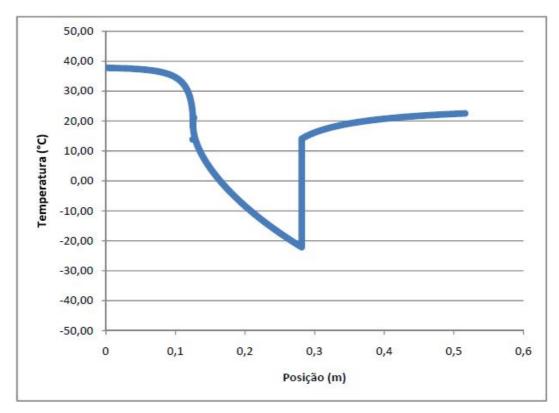


Figura 110: Perfil de temperatura ao longo do separador para o gás B com 80% de eficiência adiabática

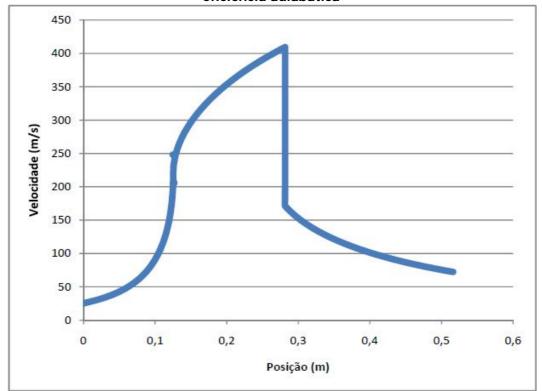


Figura 111: Perfil de velocidade ao longo do separador para o gás B com 80% de eficiência adiabática

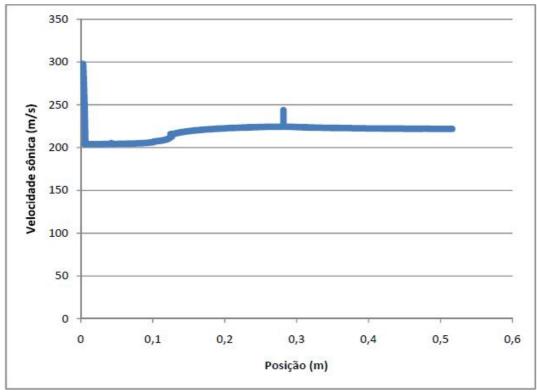


Figura 112: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o gás B com 80% de eficiência adiabática

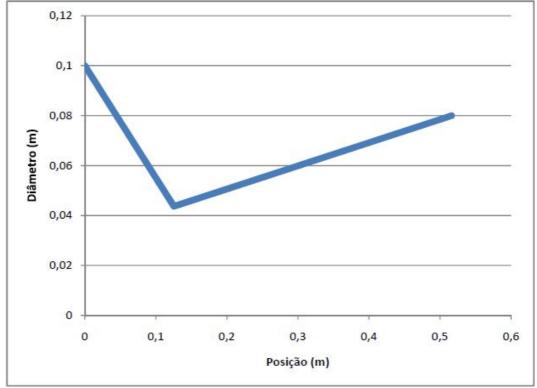


Figura 113: Diâmetro ao longo do separador para o gás B com 80% de eficiência adiabática

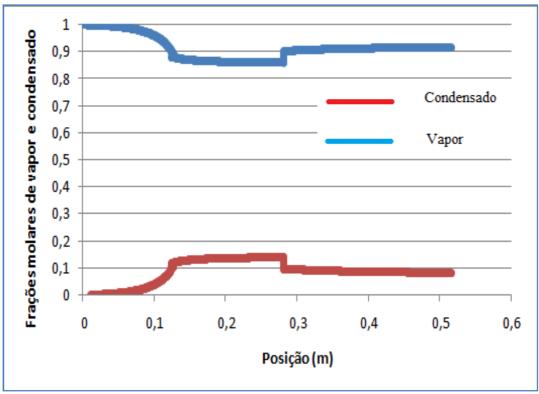


Figura 114: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás B com 80% de eficiência adiabática

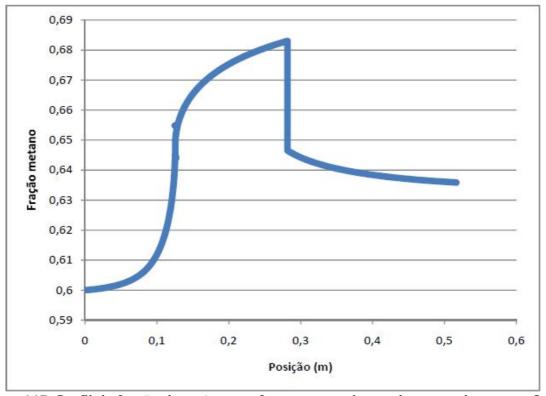


Figura 115: Perfil de fração de metano na fase vapor ao longo do separador para o Gás B com 80% de eficiência adiabática

5.1.2.4 Escoamento com 73% de eficiência adiabática

O Gás B alcança velocidades ainda menores do que o caso anterior devido à maior presença de perdas mecânicas pelo maior atrito associado à menor eficiência adiabática. Portanto, há maior aquecimento por atrito e menor resfriamento por efeito cinético e a eficiência de separação também cai. O fluido chega à pressão pré-choque (15 bar) com menor energia cinética do que no caso anterior, alcançando Mach 1.726 pré-choque e menor desaceleração que resulta em Mach 0.744 pós-choque (Figura 116). O menor Mach préchoque resulta em menor pressão pós-choque, levando a recuperação de pressão a 42.23% da inicial e inferior à do caso anterior (Figura 117). Devido à menor aceleração do fluido há menor resfriamento no pré-choque com -20.5°C e menor aquecimento no choque, com 10.995°C pós-choque (**Figura 118**). A velocidade é de 391.03 m/s no pré-choque, com menor desaceleração no choque, resultando 181.24 m/s no pós-choque (Figura 119). A velocidade sônica cresce com o conteúdo entálpico (temperatura) do gás, de modo que, como o resfriamento é inferior que no caso anterior, resultam maiores velocidades sônicas no perfil da Figura 120 comparativamente. Também se percebe o aumento de c por contribuição do ingresso de líquido na corrente devido à condensação a jusante da garganta. A Figura 121 apresenta o perfil de diâmetros no 3S sendo evidentes os comprimentos das seções e total (0.51m) e o diâmetro de garganta de 0.045m. O ponto de máxima geração de condensado e mínimo ponto de orvalho é alcançado justo a montante do choque normal (Figura 122 e Figura 123), sendo este o ponto ótimo para remoção de líquido.

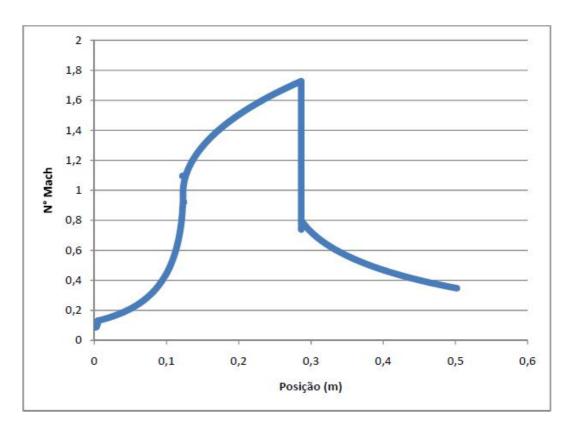


Figura 116: Perfil de número de Mach ao longo do separador para o Gás B com 73% de eficiência adiabática

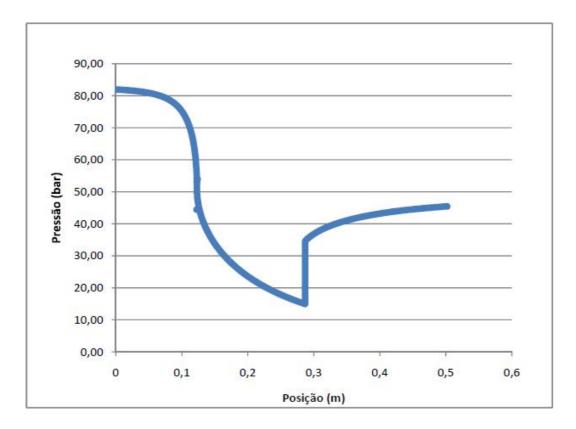


Figura 117: Perfil de pressão ao longo do separador para o gás B com 73% de eficiência adiabática

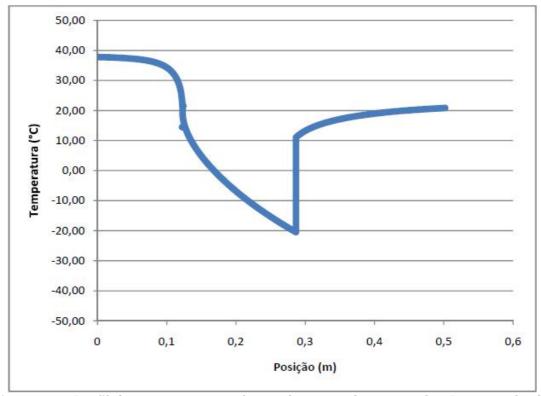


Figura 118: Perfil de temperatura ao longo do separador para o Gás B com 73% de eficiência adiabática

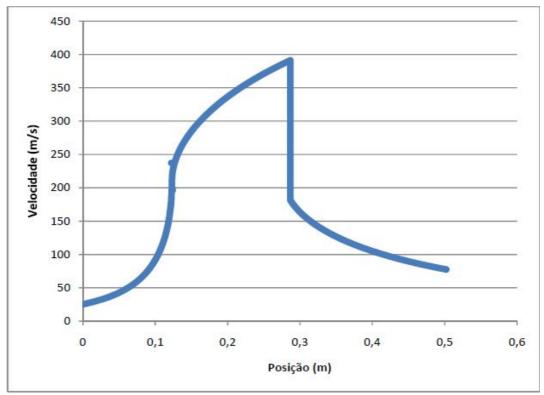


Figura 119: Perfil de velocidade ao longo do separador para o gás B com 73% de eficiência adiabática

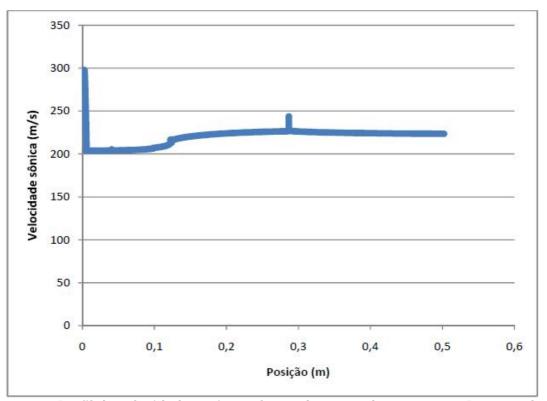


Figura 120: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o gás B com 73% de eficiência adiabática

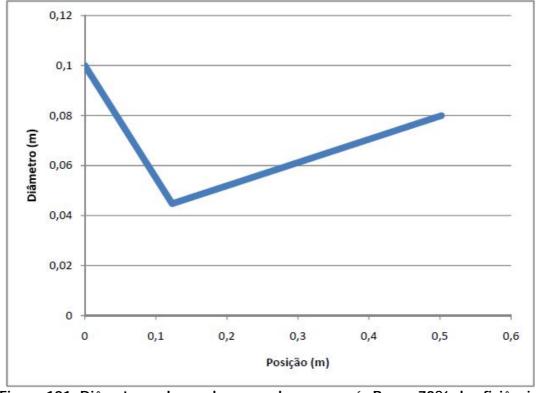


Figura 121: Diâmetro ao longo do separador para o gás B com 73% de eficiência adiabática

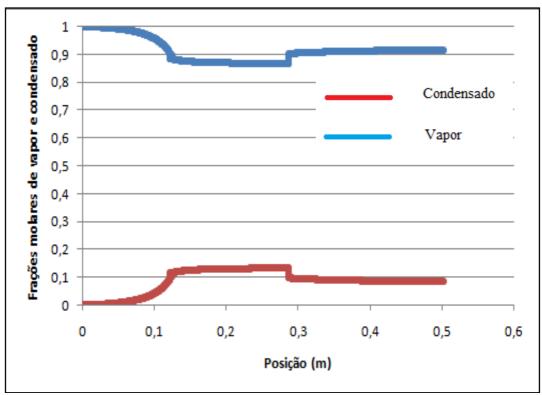


Figura 122: Perfil de frações molares de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás B com 73% de eficiência adiabática

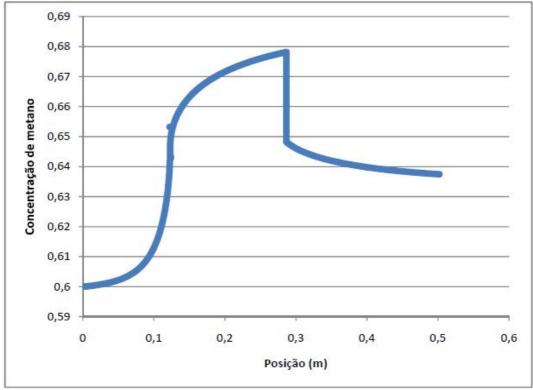


Figura 123: Perfil de fração de metano ao longo do separador para o Gás B com 73% de eficiência adiabática

5.1.2.5 Escoamento com 60% de eficiência adiabática

O Gás B alcança velocidades ainda menores que o caso anterior devido às ainda maiores perdas mecânicas pelo maior atrito associado à menor eficiência adiabática, havendo máximo aquecimento do gás por atrito e mínimo resfriamento por efeito cinético. A geração de condensado cai ainda mais. O fluido chega à pressão pré-choque (15 bar) com menor energia cinética do que no caso anterior, alcançando Mach 1.540 no pré-choque e menor desaceleração com Mach 0.836 no pós-choque (Figura 124). Com menor Mach pré-choque a pressão pós-choque também é menor, sendo menor a recuperação de pressão de 33.48% da inicial e inferior à anterior (Figura 125). O menor Mach pré-choque acarreta menor resfriamento devido à aceleração, com -17.45°C no pré-choque e menor aquecimento no choque dando 4.65°C no pós-choque (Figura 126). O fluido alcança 354.67 m/s no préchoque e 203.76 m/s no pós-choque (Figura 127). A velocidade sônica cresce com o conteúdo entálpico (temperatura) do gás, de modo que, como o resfriamento é mínimo neste caso, o perfil de velocidades sônicas da Figura 128 é o mais elevado de todos os casos Gás B, havendo também a contribuição para o aumento de c via condensação. A Figura 129 apresenta o perfil de diâmetros no 3S sendo evidentes os comprimentos das seções e total (0.48m) e o diâmetro de garganta de 0.047m. O ponto de máxima geração de condensado e mínimo ponto de orvalho é alcançado justo a montante do choque normal (Figura 130 e Figura 131), sendo este o ponto ótimo para remoção de líquido

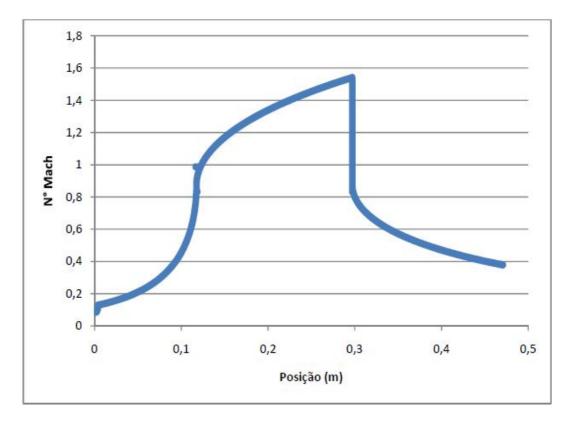


Figura 124: Perfil de número de Mach ao longo do separador para o gás B com 60% de eficiência adiabática

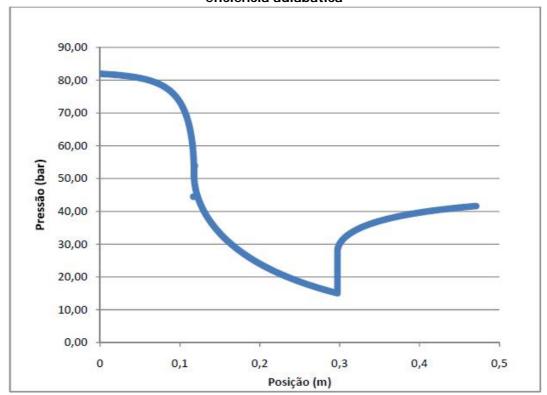


Figura 125: Perfil de pressão ao longo do separador para o gás B com 60% de eficiência adiabática

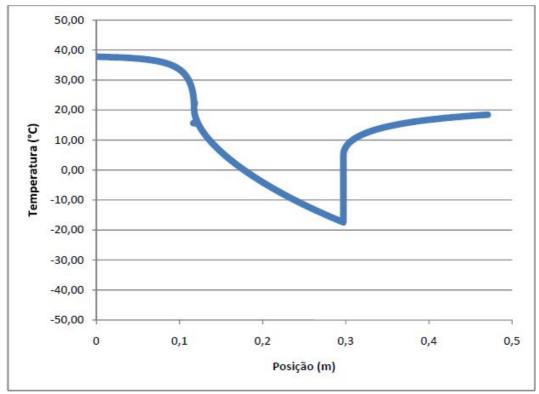


Figura 126: Perfil de temperatura ao longo do separador para o gás B com 60% de eficiência adiabática

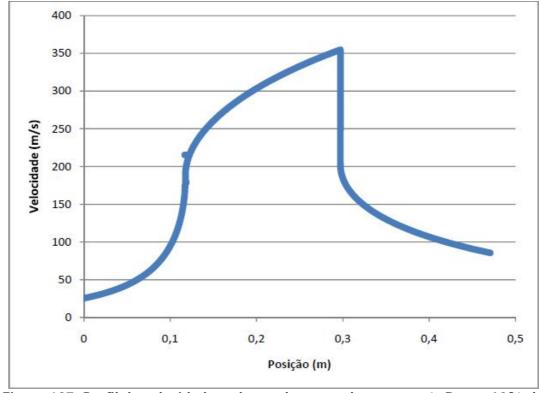


Figura 127: Perfil de velocidade ao longo do separador para o gás B com 60% de eficiência adiabática

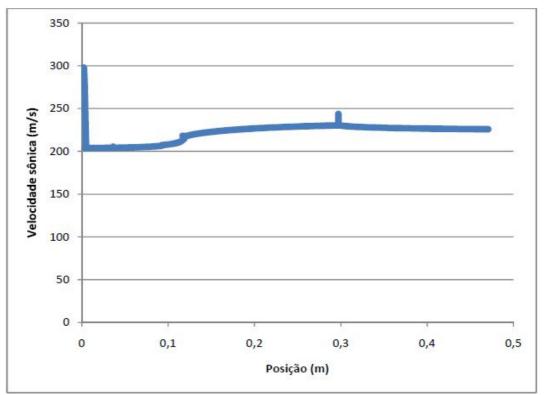


Figura 128: Perfil de velocidade sônica ao longo do separador para o gás B com 60% de eficiência adiabática

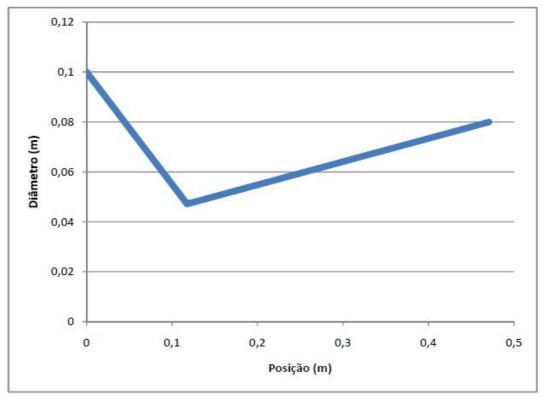


Figura 129: Diâmetro ao longo do separador para o gás B com 60% de eficiência adiabática

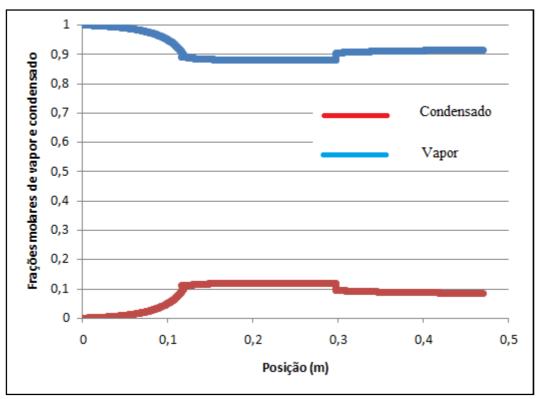


Figura 130: Perfil de frações de vapor e condensado ao longo do separador para o Gás B com 60% de eficiência adiabática

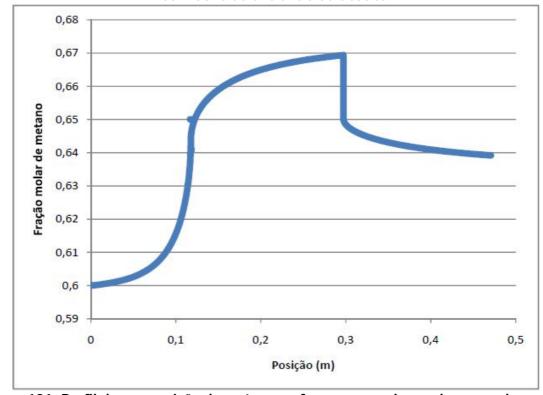


Figura 131: Perfil de composição de metano na fase vapor ao longo do separador para o Gás B com 60% de eficiência adiabática

5.1.2.6 Comparação entre as diferentes eficiências

A **Figura 132** mostra as diferentes trajetórias para cada escoamento EC-1D-E com sua respectiva eficiência adiabática, projetadas sobre o Locus *P X T* de ELV para Gás B. O Locus *P X T* de ELV é o domínio de todos os estados bifásicos em ELV para Gás B, sendo 2-Dimensional *sob composição total constante* pelo Teorema de Duhem. A **Figura 133** é apenas uma ampliação da **Figura 132**. O Locus *P X T* de ELV foi traçado por HYSYS.

Com teor de H₂O no gás (que é o caso do Gás B, embora seja este teor pequeno, mesmo sendo de saturação), haveria agora a presença do Locus P X T de ELLV que também é 2-Dimensional sob composição total constante pelo Teorema de Duhem e que superpõe com o Locus P X T de ELV, tornando-o metaestável nestas superposições. Isto é, um mesmo ponto (P,T) sob composição total constante corresponde a duas soluções de equilíbrio, uma ELV e outra ELLV, tendo a segunda menor valor de Energia Livre de Gibbs e sendo globalmente estável. Com teor de H₂O a borda de orvalho ELV tradicional seria comparada por HYSYS com a borda de orvalho ELV com H₂O líquida e com ponto de orvalho ELLV, permanecendo em vigor o orvalho ELLV se estiver no exterior do Locus P X T de ELV, o mesmo raciocínio valendo para a borda de bolha. Pela Regra das Fases, tanto os pontos de orvalho ELLV quanto os pontos de bolha ELLV são invariantes no plano P X T sob composição total constante; i.e. são únicos como o Ponto Crítico citado. Assim, HYSYS sempre apresentará a união entre todos os loci possíveis: o Locus P X T de ELV (com hidrocarbonetos), o Locus P X T de ELV (com H₂O líquida) e o Locus P X T de ELLV. Como o Gás B está saturado em H₂O, a sua localização sobre o bordo de orvalho nas Figuras 132 e 133 indica que HYSYS executou a citada união de soluções ELV e ELLV ao traçar o locus de orvalho (i.e. a união de todos os pontos de orvalho ELV, ELV^{H2O} e ELLV) e o locus de bolha.

Em uma determinada trajetória EC-1D-E *P X T*, a condensação se inicia quando a trajetória toca o Locus de Orvalho do Gás B na curva vermelha. Todas as trajetórias EC-1D-E *P X T* iniciam-se no mesmo ponto e têm diferentes pontos de término. O ponto onde todas as trajetórias se iniciam é o mesmo estado de Gás B na Tabela 3 a 82 bar e 37.77°C que corresponde a um vapor saturado como visto nas **Figuras 132 e 133**. Isto ocorre, provavelmente, porque o teor de água do Gás B é de saturação, ou seja, *o Gás B já está sobre a fronteira de orvalho* nas condições da Tabela 3. As curvas de escoamento EC-1D-E *P X T* mergulham no Locus de ELV penetrando-o em certa extensão da direita para esquerda e de cima para baixo. O ponto mais frio das curvas EC-1D-E corresponde à temperatura pré-

choque e pressão pré-choque (15bar). Quanto mais resfriamento é gerado no EC-1D-E mais à esquerda as curvas EC-1D-E alcançam, e, portanto, mais profundamente no Locus *P X T* de ELV elas penetram e mais líquido é formado no âmago do 3S no frontal pré-choque. No presente caso, o Gás B é mais rico em condensáveis que o Gás A. Desta forma haverá mais condensação com Gás B e o *resfriamento obtido no 3S será menor comparativamente ao Gás A* devido à liberação do calor latente destes condensados que aquece o fluido em expansão "freando" a progressão do resfriamento. Isto é exatamente o que se observa nas trajetórias 3S nas **Figuras 132 e 133** do Gás B em comparação com as **Figuras 90 e 91** do Gás A. Com Gás A os resfriamentos facilmente chegam abaixo de -46°C enquanto com Gás B todos permanecem acima de -28°C.

Pode ser observado que cada trajetória EC-1D-E contém *03 trechos distintos* em cujas emendas há descontinuidade de inclinação, sendo a mais perceptível a emenda dos Trechos 1 e 2 onde há o frontal de choque normal:

- Trecho 1: Expansão e profundo resfriamento com condensação até atingir o préchoque. Corresponde à descida EC-1D-E desde o Gás B de entrada passando por descontinuidade no coeficiente $\frac{dT}{dP}\Big|_{EC-1D-E}$ ao cruzar a fronteira de orvalho, onde se
 - *inicia a condensação com liberação de calor latente* que amortece o resfriamento gerado pela aceleração. O término do Trecho 1 é o ponto EC-1D-E mais interior do Locus *P X T* de ELV, onde a fração de líquido produzido é máxima.
- Trecho 2: Ocorre o súbito aquecimento e recompressão do choque. Este trecho é retilíneo e contém apenas dois pontos: o pré-choque e o pós-choque. No Trecho 2 o deslocamento ocorre em busca de maior temperatura e maior pressão, retornando bruscamente em direção ao bordo de orvalho quente mais acima e à direita, porém sem atingi-lo. Ou seja, no choque, não havendo retirada dos condensados no pré-choque, haverá grande redução da fração liquefeita pela evaporação do condensado, mas ainda restará algum material liquefeito ao final do choque.
- Trecho 3: Com compressão e aquecimento suaves na saída da seção divergente do 3S, a trajetória EC-1D-E prossegue do choque rumo ao bordo de orvalho mais acima, sem cruzá-la em nenhum caso; i.e. o Trecho 3 termina no interior do Locus P X T de ELV e o gás emerge da TCD úmido e com condensado.

Verifica-se que conforme a eficiência adiabática aumenta, maior a condensação alcançada ao longo do 3S e mais efetiva é a separação de condensáveis. O motivo disto ocorrer é que a eficiência adiabática está inversamente associada com irreversibilidades como o atrito ocorrido durante o escoamento; isto é, quanto maior a eficiência adiabática menor o atrito e vice-versa.

Sabe-se que este atrito é não desprezível a velocidades supersônicas, pois o fenômeno de arrasto em aviões supersônicos com Ma=2 é de alta intensidade, causando altíssimos consumos de combustível nos motores e caracterizado por manter as asas em temperaturas acima de 125° C próximo da tolerância mecânica-estrutural de metais comuns da industria aeronáutica como o duralumínio (http://en.wikipedia.org/wiki/Supersonic_transport). Note-se que este aquecimento anormal de superfícies metálicas em vôos supersônicos ocorre mesmo estando o ar exterior, na altitude frequentada por estes aviões, abaixo de -50°C! Portanto, uma boa parte da energia do fluido que seria transformada em energia cinética é perdida por fricção, aquecendo o fluido, reduzindo o resfriamento e a captura de condensáveis. A lição que se pretende aqui é que ignorar a intensidade deste atrito é temerário no projeto de equipamentos supersônicos como o 3S.

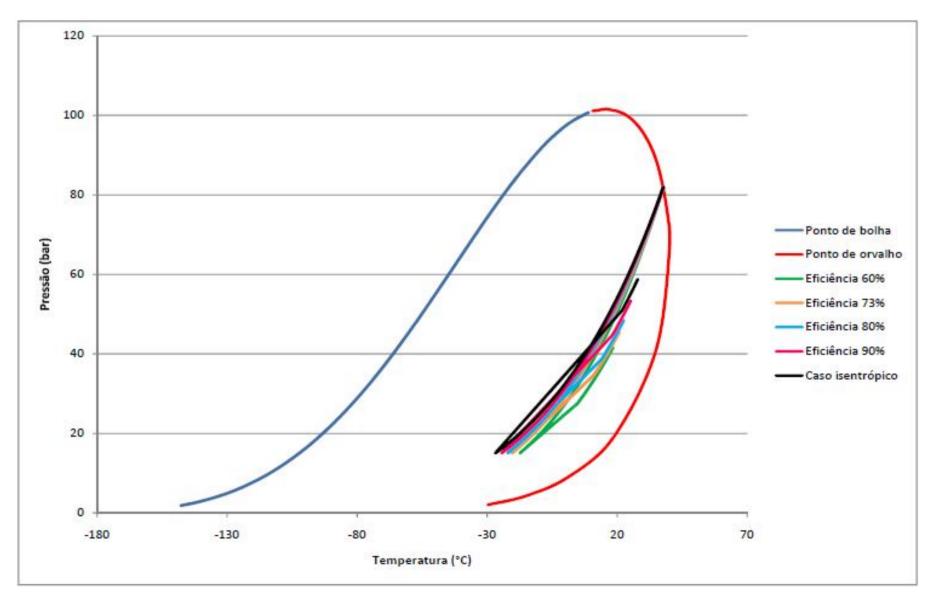


Figura 132: Comparação do desempenho 3S para diferentes eficiências adiabáticas com o Gás B

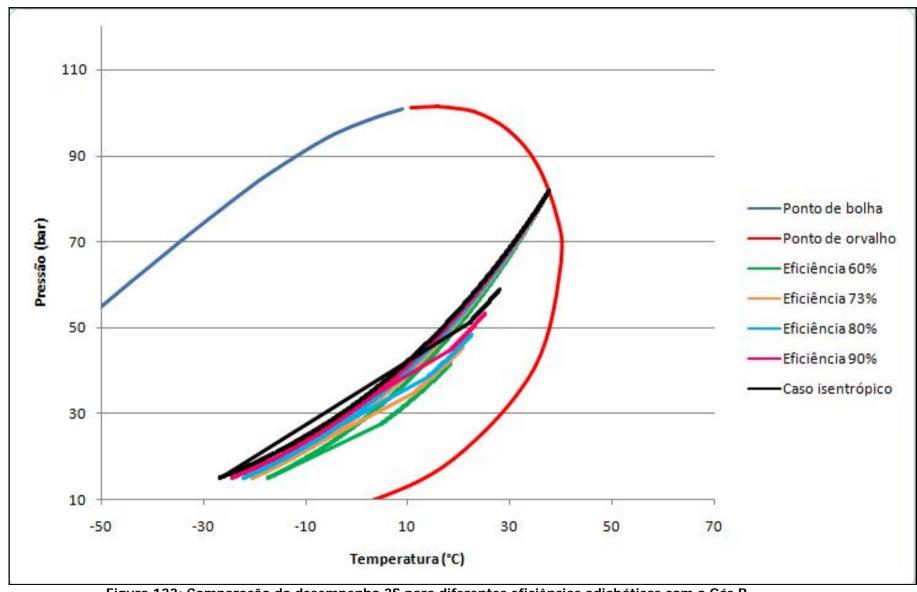


Figura 133: Comparação do desempenho 3S para diferentes eficiências adiabáticas com o Gás B

6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

O presente estudo propõe um modelo em regime estacionário para projeto do separador supersônico 3S, determinando os comprimentos axiais e o diâmetro de garganta do 3S apropriados a um dado processamento de gás natural conhecido a partir da escolha da eficiência adiabática do escoamento e dos diâmetros de entrada e saída e dos ângulos das seções convergente e divergente. O modelo, além de determinar os itens de dimensionamento mencionados, é também capaz de prever todas as características de escoamento compressível multifásico do 3S, o equilíbrio e segregação de fases condensadas, e calcular as propriedades do fluido multifásico ponto a ponto ao longo do separador. Este modelo estático foi definido de modo a respeitar a Termodinâmica e as equações de continuidade de massa, energia e momentum do escoamento no 3S, calculando corretamente os fenômenos típicos de escoamento compressível EC-1D-E de área de seção variável nas três fases que caracterizam o EC-1D-E em TCDs, a saber: (i) fase de aceleração, expansão e resfriamento até o frontal de choque normal; (ii) fase de cruzamento do frontal com recompressão, aquecimento e perda de velocidade; e (iii) fase subsônica no restante da seção divergente em EC-1D-E subsônico de compressão, aquecimento e mais redução de velocidade. Este estudo considerou apenas os principais componentes do gás natural: hidrocarbonetos leves, água e gás carbônico. No entanto, outros componentes podem ser encontrados a depender da origem do gás analisado.

As informações essenciais para projetar o equipamento 3S aqui testado como, diâmetro de entrada, diâmetro de saída, ângulos de convergência e divergência, e os dados da carga de gás processada, como vazão, temperatura, pressão e composição, foram estimados para esta finalidade, tendo em vista que a literatura especializada em 3S é predominantemente obtida de fornecedores e não contém informações detalhadas sobre o equipamento.

Este estudo foi capaz de prever em detalhes o escoamento e equilíbrio de fases ao longo do separador 3S. O modelo proposto discretiza um TCD 3S geral via sucessão de *Adiabatic Expanders* e *Adiabatic Compressors* de seção constante do HYSYS atuando sob pequenos passos de pressão com eficiência adiabática pré-especificada pela aplicação. Todos os fenômenos observados com a utilização do modelo aqui proposto com fluido gás natural real modelado por PR-EOS – incluindo perfis de Número de Mach, pressão, temperatura, velocidade, velocidade sônica, etc – são qualitativamente e/ou quantitativamente similares aos obtidos *analiticamente com Gás Ideal* na Sec. 2.4, seção esta que foi introduzida justamente para servir de baliza e referência na avaliação dos resultados obtidos com 3S sobre fluidos

reais. Uma das características mais marcantes, identificada nas soluções analíticas com Gás Ideal e *reproduzidas nos casos de fluido real simulados no modelo*, tem a ver com as singularidades $\pm \infty$ descritas nas Eqs. (2.29a) e (2.29b) que fazem referência às inclinações limites dos perfis Ma(x), T(x), P(x), v(x) e c(x) quando o escoamento cruza a garganta da TCD em questão com $Ma=Ma^*=1$. Os resultados obtidos também são compatíveis com os perfis obtidos analiticamente para Gás Ideal no que diz respeito às previsões da Eq. (2.29c) acerca do comportamento das inclinações dos perfis Ma(x), T(x), P(x), v(x) e c(x) fora da zona de influência da garganta e fora da zona de influência do frontal de choque normal. Por fim, os resultados obtidos para fluido real também são compatíveis com os obtidos analiticamente para Gás Ideal no que diz respeito à resolução do frontal de choque normal para a determinação dos saltos dos perfis Ma(x), T(x), P(x), v(x) e c(x).

Na seção convergente e até a condição pré-choque, verificou-se a queda de pressão e temperatura devido à aceleração e a resultante condensação parcial do fluido. Neste ponto, em um equipamento 3S real, haveria a retirada da fração condensada antes do escoamento cruzar o frontal de choque normal. Todavia, embora seja um item simples de alterar no modelo proposto, foi deixada intacta toda a corrente bifásica na entrada do choque normal sendo observada a quase integral re-vaporização do condensado na recuperação de pressão final do 3S.

Ao realizar o estudo abordando duas composições diferentes, foi também possível verificar a influência das propriedades do fluido processado sobre o desempenho do separador e do Modelo aqui proposto. Gás A e Gás B definidos na Tabela 3, foram usados em conexão com este aspecto. Gás A é um gás natural a 82 bar e 25°C com menor teor de condensáveis e sem água, enquanto Gás B tem grande teor de condensáveis e teor de água de saturação (umidade de saturação) estando a 82 bar e 37.77°C. Ao submeter Gás A e Gás B ao 3S, observa-se que a extensão de resfriamento obtido é diferente em cada caso, pois quanto maior o teor de material condensável, menor é o resfriamento obtido devido à liberação no fluido do calor latente dos condensados. Isto é, cargas com alto teor de condensáveis deixaram um "rastro" de condensação mais ponderável à medida que avançam no 3S e terão menores graus de resfriamento desenvolvido; i.e. a temperatura terá caído menos ao atingir-se o pré-choque. A situação é totalmente oposta para cargas com baixo teor de condensáveis que avançarão no 3S com pequena produção de condensado e maiores graus de resfriamento final, ou seja, atingirão menores temperaturas no pré-choque. Não é de admirar que os testes feitos com GI na Sec. 2.4.8 — que é absolutamente não condensável — são os que promovem maior

intensidade de resfriamento no pré-choque para Ma_{AC} de magnitude similar, obtendo-se quase -90°C no escoamento SS em Ma_{AC} =2 no pré-choque como visto na Figura 25. Enquanto isto, os testes 3S com Gás A nas **Figuras 90 e 91** apontam temperaturas mínimas atingidas pouco acima de -48°C no pré-choque, ao passo que os testes com Gás B nas **Figuras 132 e 133** geram temperaturas mínimas pouco acima de -28°C no pré-choque. Em outras palavras, em termos da extensão de resfriamento produzido no pré-choque, com similares condições de carga e de Mach de pré-choque, pode-se escrever $T_{Pr\,\acute{e}-choque}^{Gl} < T_{Pr\,\acute{e}-choque}^{G\acute{a}\acute{b}} < T_{Pr\,\acute{e}-choque}^{G\acute{a}\acute{b}}$.

O modelo proposto tem como parâmetro crítico a eficiência adiabática do escoamento EC-1D-E que afeta bastante os resultados obtidos. Esta eficiência deve ser usada para calibração do modelo frente a resultados experimentais. A eficiência adiabática, conforme demonstrado no Cap. 5, influencia o grau de resfriamento do fluido pela aceleração e a recuperação de pressão devido ao fenômeno de recompressão no frontal de choque normal. Maiores eficiências adiabáticas acarretarão menores temperaturas e maiores velocidades no pré-choque e maiores recuperações de pressão no pós-choque.

Embora seja um fenômeno totalmente irreversível, o choque normal na seção SS do 3S é o responsável pela recuperação de pressão do fluido na saída do 3S, o que justifica a utilização deste equipamento como alternativa tecnológica, dado que reduziria a capacidade necessária ao compressor de exportação do gás natural. O choque normal também foi modelado corretamente nesta metodologia, apresentando resultados que, em altos valores de eficiência adiabática, alcançaram frações de recuperação de pressão similares aos encontrados na literatura da ordem de 2/3. Este coeficiente de recuperação de pressão é aproximadamente corroborado com os testes com Gás A e com Gás B aqui conduzidos (aproximadamente de 2/3 nas maiores eficiências adiabáticas) e com os cálculos analíticos com Gás Ideal na Sec. $2.4.8 \text{ com } Ma_{AC}=2 \text{ mostrados na Figura 25 que indicam recuperação de 69% da pressão de carga.}$

Confrontando os resultados 3S deste estudo com os perfis 3S encontrados na literatura e apresentados na Sec. 2.5, verifica-se que o modelo proposto foi capaz de representar adequadamente o escoamento ao longo do separador 3S em todas as três fases do escoamento 3S, a saber: (i) aceleração desde a entrada até o pré-choque normal; (ii) no salto do pré-choque ao pós-choque; e (iii) do pós-choque normal até a saída 3S.

Por fim, são apresentadas algumas sugestões para prosseguimento desta linha de pesquisa em trabalhos futuros.

- a) Testes com outras composições de gás natural, com maior teor de frações pesadas e com maior teor de contaminantes (água e gases ácidos), buscando-se a garantia de que a separação de água ocorrerá sob a forma de gelo e/ou hidratos como ocorre na realidade, diferentemente dos resultados aqui apresentados para o Gás B nos quais HYSYS modelou a água removida como água líquida livre em temperaturas da ordem de -28°C;
- b) Análise de sensibilidade da resposta 3S a parâmetros geométricos do equipamento como diâmetros de entrada e saída do 3S, ângulos das seções convergente e divergente da TCD 3S, etc;
- c) Transformar o aplicativo MS-EXCEL aqui desenvolvido para simulação 3S, a saber *3SHY.xls*, em um *plug-in User Operation* para inserção como operação unitária em fluxogramas HYSYS, o que permitiria utilizar o modelo 3S no interior do ambiente HYSYS integrado a outros itens de processo típicos do processamento de gás natural levantados nas Secs. 2.1, 2.2 e 2.3.
- d) Criação de um simulador 3S amigável para usuários não familiarizados com códigos computacionais;
- e) Validação deste modelo frente a um separador 3S real.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALFYOROV, V.; BAGIROV, L.; DMITRIEV, L.; FEYGIN, V.; IMAYEV, S.; LACEY, J.R. Supersonic nozzle efficiently separates natural gas components. Oil & gas journal, p. 53, 2005.

ANDERSON, J.D. Modern Compressible Flow. 2nd Edition. McGraw-Hill International Editions, New York, USA, 1990.

Boletim da produção de petróleo e gás natural. 2012. Agência nacional do petróleo, gás natural e biocombustíveis. Disponível em: < www.anp.gov.br/?dw=60889>. Acessado em: 01/04/2013.

BRASIL. Decreto-Lei brasileira nº 9.478, de 6 de agosto de 1997. Disponível em: < www.planalto.gov.br/ccivil_03/leis/L9478.htm>. Acessado em: 01/04/2013.

BROUWER, J.M.; EPSOM, H.D. Twister Supersonic Gas Conditioning for Unmanned Platforms and Subsea Gas Processing. In: Offshore Europe, 2003.

CHEBBI, R.,; Al-AMOODI, N.S.; ABDEL JABBAR, N.M.; HUSSEINI, G.A.; Al MAZROUI, K.A. Optimum ethane recovery in conventional turboexpander process. Chemical Engineering Research and Design, v. 88, n. 5, p. 779-787, 2010.

DENGYU, J.; ERI, Q.; WANG, C.; LIU, H.; YUAN, Y. A fast and efficiency numerical simulation method for supersonic gas processing. In: International Oil and Gas Conference and Exhibition in China. Society of Petroleum Engineers, 2010.

DE MEDEIROS, J.L., BARBOSA, L.C., ARAÚJO, O.Q.F.; Equilibrium Approach for CO_2 and H_2S Absorption with Aqueous Solutions of Alkanolamines: Theory and Parameter Estimation. Industrial & Engineering Chemistry Research, v. 52, p. 9203-9226, 2013.

DE OLIVEIRA, A.P.; Uma Metodologia Monte Carlo para Projeto de Gasodutos e Carbodutos. Dissertação MSc. Programa de Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos. Escola de Química da UFRJ, 2011.

FOGLIETTA, J.; Production of LNG using dual independent expander refrigeration cycles. In: AIChE Spring Meeting 2002, New Orleans, March 2002. 2002.

FOX, R.W.; MACDONALD, A.T.; PRITCHARD, P.J.; Introduction to Fluid Mechanics. 6th Edition. John Wiley & Sons, N.J., USA, 2006.

GANDHIDASAN, P.; AL-FARAYEDHI, A.A.; AL-MUBARAK, A.A. Dehydration of natural gas using solid desiccants. Energy, v. 26, n. 9, p. 855-868, 2001.

GHORBANI, B.; SALEHI, G.R.; GHAEMALEKI, H.; AMIDPOUR, M.; HAMEDI, M.H. Simulation and optimization of refrigeration cycle in NGL recovery plants with exergy-pinch analysis. Journal of Natural Gas Science and Engineering, v. 7, p. 35-43, 2012a.

GHORBANI, B.; SALEHI, G.R.; GHAEMALEKI, H.; AMIDPOUR, M.; HAMEDI, M.H. Exergy and exergoeconomic evaluation of gas separation process. Journal of Natural Gas Science and Engineering, v. 9, p. 86-93, 2012b.

GPSA – GAS PROCESSORS SUPPLIERS ASSOCIATION. Engineering Data Book. Gas Processors and Suppliers Association, Tulsa, OK, USA, 2004.

KARIMI, A.; MAJID, A.A. "Selective dehydration of high-pressure natural gas using supersonic nozzles." Chemical Engineering and Processing: Process Intensification 48.1 (2009): 560-568.

MACHADO, P.B.; MONTEIRO, J. G.; MEDEIROS, J.L.; EPSOM, H.D.; ARAUJO, O.Q. Supersonic separation in onshore natural gas dew point plant. Journal of Natural Gas Science and Engineering, v. 6, p. 43-49, 2012.

MALYSHKINA, M.M. The procedure for investigation of the efficiency of purification of natural gases in a supersonic separator. High Temperature, v. 48, n. 2, p. 244-250, 2010.

MEHRPOOYA, M.; VATANI, A.; MOUSAVIAN, S.M. Introducing a novel integrated NGL recovery process configuration (with a self-refrigeration system (open–closed cycle)) with minimum energy requirement. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, v. 49, n. 4, p. 376-388, 2010.

MEHRPOOYA, M.; GHARAGHEIZI, F.; VATANI, A. An optimization of capital and operating alternatives in a NGL recovery unit. Chemical engineering & technology, v. 29, n. 12, p. 1469-1480, 2006.

MOKHATAB, S.; POE, W.A. Handbook of natural gas transmission and processing. Gulf Professional Publishing, 2012.

OOSTHUIZEN, P.H.; CARSCALLEN, W.E.; Compressible Fluid Flow. McGraw-Hill International Editions, New York, USA, 1997.

PRAST, B.; LAMMERS, B.; BETTING, M. CFD for supersonic gas processing. In: NEL Multiphase Separation and Multiphase Pumping Technologies Conference. 2005. p. 53-58

SCHINKELSHOEK, P.; EPSOM, H.D. Supersonic gas conditioning–commercialization of twister technology. In: 87th Gas Processors Association Annual convention, Grapevine, USA. 2008.

SCHINKELSHOEK, P.; EPSOM, H.D. Supersonic Gas Conditioning-Low Pressure Drop TWISTER for NGL Recovery. In: Offshore Technology Conference. Offshore Technology Conference, 2006.

MAHMOODZADEH VAZIRI, B.; SHAHSAVAND, A.; RASHIDI, H.R.; GHANBARI, M. Non isentropic performance in supersonic separators. In: 13th Iranian National Chemical Engineering Congress & 1st International Regional Chemical and Petroleum Engineering, 2010

SLOAN, D., KOH, C.A.; Clathrate Hydrates of Natural Gases, 3rd Ed., CRC Press, 2008

VAN NESS, H.C.; SMITH, J.M.; ABBOT, M.M. Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química. LTC Ltda, 2007.

VAZ, C.E.M.; MAIA, J.L.P.; DOS SANTOS, W.G. Tecnologia da indústria de gás natural. Edgard Blucher, 2008.

WEN, C.; CAO, X.; ZHANG, J.; WU, L. Three-dimensional numerical simulation of the supersonic swirling separator. In: Twentieth International Offshore and Polar Engineering Conference, Beijing. 2010.

World Energy Resources: 2013 Survey, World Energy Council, 2013.

YOUNGER, A.H.; ENG, P. Natural Gas Processing Principles and Technology-part 2. Gas Processors Association, Tulsa Oklahoma, 2004.