

3 Modelagem Matemática

Escoamento multifásico é uma importante área da mecânica dos fluidos que inclui escoamentos de duas ou mais fases, como gás-líquido-sólido, gás-líquido, gás-sólido, sólido-líquido e líquido-líquido. É evidente, portanto, que tenha ganhado grande destaque no setor do petróleo devido à presença deste tipo de escoamento no interior de tubulações, que podem se estender por muitos quilômetros, para o escoamento da produção.

Na engenharia de dutos é prática comum abordar o escoamento de forma unidimensional visto que as dimensões axiais são muito maiores do que os diâmetros das tubulações, viabilizando as simulações numéricas e fornecendo dados importantes, como queda de pressão, perda de calor para o ambiente, além das variações dos padrões de escoamento ao longo da direção axial. A formulação unidimensional é obtida através de um processo de média na seção transversal da tubulação. Modelos mais sofisticados como bi ou tridimensionais apresentam um esforço computacional muito elevado, porém fornecem detalhes do escoamento, permitindo uma melhor compreensão dos fenômenos físicos envolvidos, podendo auxiliar no desenvolvimento dos modelos unidimensionais

O modelo matemático utilizado neste trabalho para representar o escoamento bifásico é o Modelo de Dois Fluidos, cujas equações foram derivadas primeiramente por Ishii (1975). Este modelo é expresso em termos de dois conjuntos de equações de conservação (para a fase gasosa e fase líquida) que governam o escoamento: balanço de massa, de quantidade de movimento linear e de energia. Como as fases não são independentes uma da outra, existem termos de interação nas equações de conservação. Portanto, de acordo com o Modelo de Dois Fluidos, existem seis equações diferenciais com três condições de transferência interfacial governando o esquema de escoamento bifásico. Sua formulação é obtida através de um processo de média temporal das equações locais e instantâneas, considerando as equações de salto nas interfaces.

Nas seções a seguir, inicialmente são apresentadas as equações de conservação que governam o escoamento ao longo de uma tubulação horizontal

ou levemente inclinada, com as necessárias equações de fechamento e condições de contorno. Dando continuidade ao tema, as propriedades termodinâmicas são então detalhadas.

3.1 Equações Governantes

As equações de conservação correspondentes ao Modelo de Dois Fluidos unidimensional são apresentadas a seguir. De acordo com a formulação de Issa e Kempft (2003), Nieckele et al. (2013) e Simões et al. (2014), o escoamento unidimensional é aproximado considerando-se um escoamento base. Este escoamento base pode ser estratificado ou anular, conforme ilustrado nas Figs. 3.1 e 3.2, respectivamente, dependendo do regime de escoamento e/ou do tipo de transição entre escoamentos que se deseja investigar.

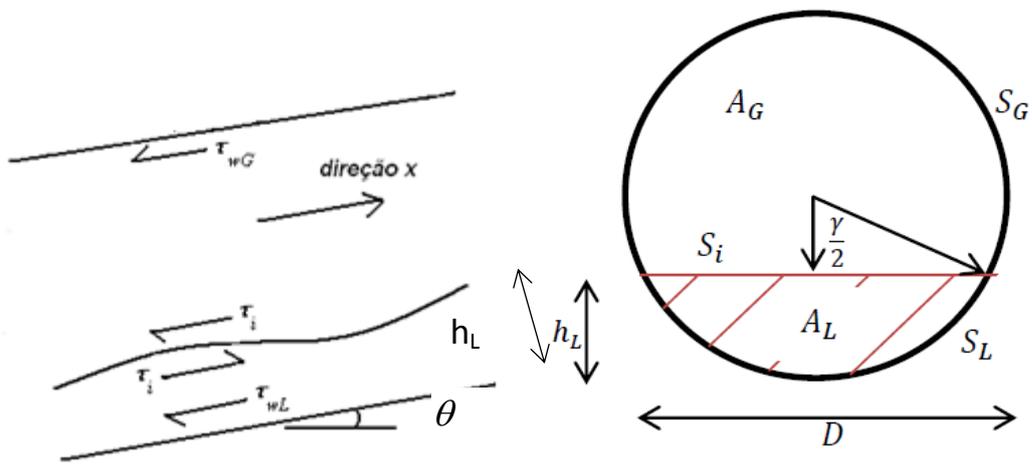


Figura 3.1 - Esquema de escoamento base estratificado.

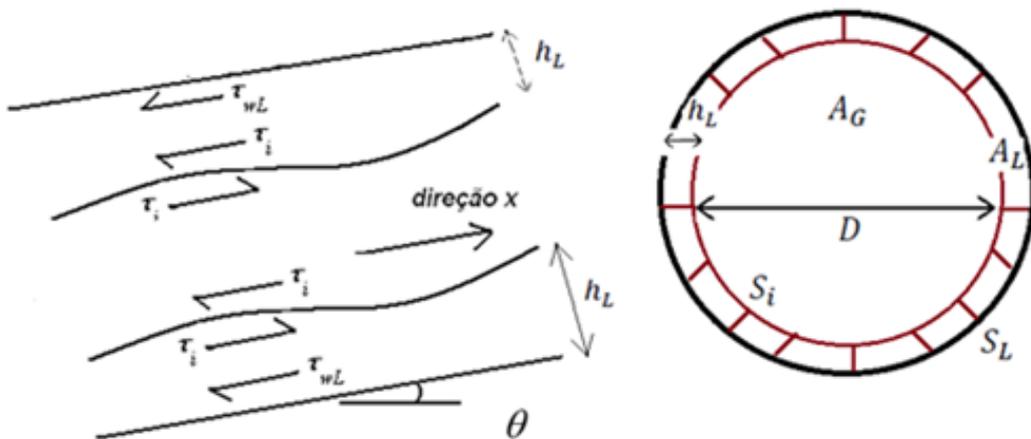


Figura 3.2 - Esquema de escoamento base anular.

Cada uma das fases é identificada pela fração volumétrica, definida pela razão do volume ocupado pela fase k (G para o gás e L para o líquido) e o volume total. Para um volume com comprimento axial Δx , tem-se

$$\alpha_G = \frac{A_G}{A} \quad ; \quad \alpha_L = \frac{A_L}{A} \quad (3.1)$$

onde A e A_k correspondem, respectivamente, a área da seção transversal total e a área da fase k . As frações volumétricas do gás e do líquido estão relacionadas através de

$$\alpha_G + \alpha_L = 1 \quad (3.2)$$

Os parâmetros relativos à geometria da seção da área transversal do tubo ilustrados na Fig. (3.1) se referem a um escoamento estratificado, os quais podem ser obtidos do meio ângulo $\left(\frac{\gamma}{2}\right)$ que define o nível do líquido, h_L , de acordo

$$S_G = D \left[\pi - \left(\frac{\gamma}{2}\right) \right]; \quad S_L = S_L = \pi \left(\frac{\gamma}{2}\right) \quad ; \quad S_i = D \sin\left(\frac{\gamma}{2}\right) \quad (3.3)$$

$$A_L = \frac{D^2}{4} \left[\left(\frac{\gamma}{2}\right) - \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma}{2}\right) \right]; \quad A_G = \frac{\pi D^2}{4} - A_L \quad (3.4)$$

$$\cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) = \left(1 - 2 \frac{h_L}{D}\right) \quad ; \quad (3.5)$$

onde D é o diâmetro da tubulação. O meio ângulo $\left(\frac{\gamma}{2}\right)$ pode ser determinado em função da fração de líquido, de acordo com

$$\alpha_L = 1 - \frac{1}{\pi} \left[\left(\pi - \left(\frac{\gamma}{2}\right)\right) + \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) \sin\left(\frac{\gamma}{2}\right) \right] \quad (3.6)$$

A determinação da espessura do filme (ou meio ângulo) a partir da fração de líquido precisa de um procedimento iterativo, tornando o processo numericamente caro e lento. Visando reduzir o tempo de execução das simulações, Biberg (1999) propôs a seguinte aproximação explícita para o ângulo $\left(\frac{\gamma}{2}\right)$ em função do α_L .

$$\frac{\gamma}{2}(\alpha_L) = \pi \alpha_L + \left(\frac{3\pi}{2}\right)^{1/3} \left[1 - 2\alpha_L + \alpha_L^{1/3} - (1 - \alpha_L)^{1/3} \right] + \theta(\alpha_L^5) \quad (3.7)$$

Pasqualetto et al. (2014) demonstraram que a expressão aproximada dada

pela Eq. (3.7) apresenta uma redução significativa no tempo de computação com boa precisão.

No caso de um escoamento no padrão anular, Fig. 3.2, os parâmetros geométricos são

$$S_L = \pi D \quad ; \quad S_i = \pi(D - 2h_L) \quad ; \quad S_G = 0 \quad (3.8)$$

$$A_G = \frac{\pi}{4}(D - 2h_L)^2 \quad ; \quad A_L = \frac{\pi D^2}{4} - A_G \quad (3.9)$$

$$h_L = \frac{D}{2}(1 - \sqrt{\alpha_G}) \quad (3.10)$$

As seguintes hipóteses simplificadoras foram consideradas neste estudo:

- (i) Tubulação horizontal ou levemente inclinada de θ com a horizontal;
- (ii) Fase gasosa pode se comportar como gás real ou gás ideal, com massa específica ρ_G variável;
- (iii) Calor específico à pressão constante da fase gasosa cp_G pode depender da temperatura do gás T_G ;
- (iv) Massa específica e calor específico à pressão constante para a fase líquida, ρ_L e cp_L , respectivamente são constantes;
- (v) Viscosidade dinâmica μ_k e condutividade térmica K_k são constantes para cada fase k ;
- (vi) Velocidade U_k e temperatura T_k de cada fase uniformes na seção transversal;
- (vii) Pressão do gás P_G uniforme na seção transversal; e função da pressão do gás na interface P_{Gi} ;
- (viii) Salto de pressão na interface somente na equação conservação de quantidade de movimento, i.e, seu efeito na equação da energia foi desprezado;
- (ix) Não há transferência de massa entre as fases;
- (x) Fluxo de calor axial desprezível;
- (xi) Fluxo difusivo viscoso axial desprezível;
- (xii) Energia cinética turbulenta desprezível;
- (xiii) Não há geração de calor;

(xiv) Espessura do filme de líquido constate.

As equações governantes são apresentadas a seguir.

- *Conservação de Massa para o Gás*

$$\frac{\partial(\alpha_G \rho_G)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_G \rho_G U_G)}{\partial x} = 0 \quad (3.11)$$

- *Conservação de Massa para o Líquido*

$$\frac{\partial(\alpha_L \rho_L)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_L \rho_L U_L)}{\partial x} = 0 \quad (3.12)$$

- *Conservação de Quantidade de Movimento Linear para o Gás:*

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_G \rho_G U_G)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_G \rho_G U_G^2)}{\partial x} = \\ -\alpha_G \frac{\partial P}{\partial x} - \alpha_G \rho_G g \cos \theta \frac{\partial h_L}{\partial x} - \tau_{wG} \frac{S_G}{A} - \tau_i \frac{S_i}{A} - \alpha_G \rho_G g \sin \theta \end{aligned} \quad (3.13)$$

- *Conservação de Quantidade de Movimento Linear para o Líquido:*

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_L \rho_L U_L)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_L \rho_L U_L^2)}{\partial x} = \\ -\alpha_L \frac{\partial P}{\partial x} - \alpha_L \rho_L g \cos \theta \frac{\partial h_L}{\partial x} + \alpha_L \sigma \frac{\partial \kappa}{\partial x} - \tau_{wL} \frac{S_L}{A} + \tau_i \frac{S_i}{A} - \alpha_L \rho_L g \sin \theta \end{aligned} \quad (3.14)$$

- *Equação de Conservação de Energia para o Gás*

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_G \rho_G T_G)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_G \rho_G U_G T_G)}{\partial x} = \frac{1}{c_{pG}} \left[\frac{S_G}{A} q_{wG}'' - \frac{S_i}{A} q_i'' + \tau_{wG} \frac{S_G}{A} U_G + \tau_i \frac{S_i}{A} (U_G - U_L) \right. \\ \left. + \alpha_G \beta_G T_G \left[\left(\frac{\partial P}{\partial t} + U_G \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \rho_G g \cos \theta \left(\frac{\partial h_L}{\partial t} + U_G \frac{\partial h_L}{\partial x} \right) \right] \right] \end{aligned} \quad (3.15)$$

- *Equação de Conservação de Energia para o Líquido*

$$\frac{\partial(\alpha_L \rho_L T_L)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_L \rho_L U_L T_L)}{\partial x} = \frac{1}{c_{pL}} \left[\frac{S_L}{A} q_{wL}'' + \frac{S_i}{A} q_i'' + \tau_{wL} \frac{S_L}{A} U_L + \tau_i \frac{S_i}{A} (U_G - U_L) \right] \quad (3.16)$$

Nas equações acima, as coordenadas axiais e temporais são representadas, respectivamente, por x e t . A aceleração da gravidade é g , h_L é o nível ou espessura de líquido na seção transversal, σ é a tensão superficial gás/líquido. τ_{wk} é a tensão cisalhante da fase k na parede e τ_i é a tensão na interface. Note que conforme ilustrado nas Figs. 3.1 e 3.2, τ_i apresenta sinal oposto para cada fase. O perímetro molhado da fase k é S_k e o da interface gás-líquido S_i . No caso de

escoamento no padrão anular, o gás escoo na região central, e o seu perímetro molhado S_G é nulo. O segundo termo do lado direito de cada equação de quantidade de movimento corresponde à variação da pressão hidrostática na seção transversal. Na Eq. (3.14), o terceiro termo do lado direito representa o salto de pressão na interface, devido à curvatura κ da mesma. Nas Eqs. (3.15) e (3.16), β_k é o coeficiente de expansão térmica da fase k , o fluxo de calor adicionado à fase k através da parede é q_{wk}'' e o fluxo de calor através da interface gás-líquido é q_i'' . Os termos que envolvem a tensão cisalhante correspondem à dissipação viscosa de cada fase e na interface.

É importante mencionar aqui, que uma aproximação adicional foi introduzida na equação da energia do gás, Eq. (3.14), a qual consistiu em considerar o calor específico à pressão constante Cp_G localmente constante, isto é, sua variação espacial e temporal foi desprezada, porém localmente seu valor foi obtido em função da temperatura local do gás.

Nos trabalhos desenvolvidos por Issa e Kempf (2003), Carneiro (2006) e Simões (2012), a fase gasosa foi considerada como um gás ideal. No entanto, esta aproximação falha para o caso de escoamentos de hidrocarbonetos, onde o fator de compressibilidade pode se distanciar significativamente de um. De acordo com Issa e Kempf (2003) os efeitos da compressibilidade devem ser importantes para escoamento intermitente pois uma vez formadas, as golfadas podem induzir a variações temporais e espaciais da pressão de até 40%. As duas equações de estado de gás real encontradas com maior frequência na literatura são as equações de Peng-Robinson e Soave-Redlich-Kwong (Pratt, 2002). Neste trabalho a equação de estado de Peng-Robinson foi utilizada para modelar a fase gasosa. Para a fase líquida, entretanto, manteve-se a hipótese de incompressibilidade.

Para completar o modelo é necessário introduzir equações de fechamento, para determinar o salto de pressão na interface (raio de curvatura), as tensões cisalhantes e os fluxos de calor trocados, tanto nas paredes quanto na interface. É preciso também definir as propriedades termodinâmicas.

3.2 Equações de Fechamento

Uma vez, que a formulação do problema é unidimensional, torna-se necessário definir tanto as tensões cisalhantes como os fluxos de calor das fases

com as paredes e na interface. A aproximação utilizada para estimar o raio de curvatura também deve ser definida.

3.2.1 Salto de Pressão

O salto de pressão na interface é dado por

$$(P_{Gi} - P_{Li}) = \sigma \kappa \quad (3.17)$$

sendo que o raio de curvatura da interface κ pode ser estimado em função da variação do nível do líquido (Inácio, 2012). No caso estratificado, considera-se a curvatura de ondas longitudinais,

$$\kappa = \frac{\partial^2 h_L}{\partial x^2} \quad (3.18)$$

Para geometria anular, existem dois raios de curvatura relevantes, sendo o primeiro na direção axial (conforme escoamento estratificado) e o segundo na direção radial, devido a geometria circular (Kawaji e Barnerjee, 1987). O termo de curvatura da interface para escoamento anular é

$$\kappa = \frac{\partial^2 h_L}{\partial x^2} + \left(\frac{4}{D^2 \alpha_G} \right) \frac{\partial h_L}{\partial x} \quad (3.19)$$

3.2.2 Tensões Cisalhantes

As equações de fechamento para as tensões cisalhantes são baseadas no fator de atrito. Considerando-se escoamento localmente hidrodinamicamente desenvolvido, as tensões podem ser escritas da seguinte forma:

$$\tau_{wk} = \frac{1}{2} f_k \rho_k |U_k| U_k \quad (3.20)$$

$$\tau_i = \frac{1}{2} f_i \rho_G |U_G - U_L| (U_G - U_L) \quad (3.21)$$

onde τ_{wk} é a tensão cisalhante da parede com a fase k e τ_i é a tensão cisalhante na interface.

O fator de atrito f pode ser determinado de diversas maneiras e no presente trabalho foi dada grande atenção para adequar este parâmetro para escoamento anular. Nos trabalhos de Carneiro (2006) e Simões (2012) as

correlações para modelar o fator de atrito para escoamento estratificado e intermitente foram amplamente estudadas.

O fator de atrito depende do número de Reynolds e do regime de escoamento. Os números de Reynolds necessários para a determinação do fator de atrito, foram definidos por Taitel e Dukler (1976), e se referem a cada fase (gasosa- G ou líquida- L) e a interface- i .

$$Re_{sL} = \frac{\rho_L U_{sL} D}{\mu_L} \quad \text{com} \quad U_{sL} = \alpha_L U_L \quad (3.22)$$

$$Re_G = \frac{4A_G \rho_G U_G}{(S_G + S_i) \mu_G} \quad ; \quad Re_L = \frac{4A_L \rho_L U_L}{S_L \mu_L} \quad ; \quad Re_i = \frac{4A_G \rho_G |U_G - U_L|}{(S_G + S_i) \mu_G} \quad (3.23)$$

onde μ_G e μ_L são, respectivamente, as viscosidades dinâmicas do gás e do líquido.

A Tabela 3.1 apresenta as correlações utilizadas para escoamento estratificado, assim como para escoamento anular. Como pode ser observado, o fator de atrito do gás depende de Re_G , baseado na velocidade da fase gasosa, enquanto que o fator de atrito do líquido é baseado na velocidade superficial. Já o fator de atrito da interface, é avaliado com a correlação utilizada para a fase gasosa, mas é baseado no número de Reynolds da interface. Este fator de atrito é multiplicado por um termo de correção ξ , que varia com o padrão de escoamento.

Tabela 3.1 - Correlações para determinação do fator de atrito.

	Regime Laminar ($Re_k < 2000$)	Regime Turbulento ($Re_k > 2200$)
f_G	$\frac{16}{Re_G}$ (Hagen-Poiseuille)	$0,046(Re_G)^{-0,20}$ (Taitel e Dukler, 1976)
f_i	$\xi f_G(Re_i)$	$\xi f_G(Re_i)$
f_L	$\frac{24}{Re_{Ls}}$ (Hand, 1991)	$0,0262(\alpha_L Re_{Ls})^{-0,0139}$ (Spedding e Hand, 1997)

No caso de escoamento estratificado nenhuma correção do fator de atrito interfacial ξ foi incluída, isto é, $\xi = 1$. Já para o caso de escoamento no padrão anular, o parâmetro de correção é introduzido para representar ondulações na interface gás-líquido, quando a velocidade do gás é alta, i.e., $U_{sG} > U_{sGlim} = 4,5$ m/s. A correção proposta por Ottens et al. (2001) é

$$\xi = 1 \quad \text{para } U_{sG} < U_{sGlim} \quad (3.24)$$

$$\xi = C^* + 7,21 \sqrt{\frac{h_L}{D} \left(\frac{U_{sg}}{4,5} - 1 \right)} \quad \text{para } U_{sG} > U_{sGlim} \quad (3.25)$$

onde

$$C^* = 1 + \sqrt{\left(\frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_L + \rho_G} \right) \frac{1}{Fr^2}} \quad (3.26)$$

$$Fr = \frac{U_i}{\sqrt{g h_L}} \quad \text{e} \quad U_i = K_L U_L \quad (3.27)$$

$$K_L = \begin{cases} K_0 + \left(\frac{2100}{Re_L} \right)^{0,15} & \text{para } Re_L < 2100 \\ K_0 + 1 & \text{para } Re_L \gg 2100 \end{cases} \quad (3.28)$$

$$K_0 = \begin{cases} 0,3 & \text{para } Re_G < 34.000 \\ 0,0 & \text{para } Re_G \gg 34.000 \end{cases} \quad (3.29)$$

Para a validação do conjunto de correlações para o fator de atrito proposto para escoamento anular foi realizada comparação com o trabalho numérico de Emamzadeh (2012). A Tabela 3.2 apresenta as correlações utilizadas em seu trabalho, cujo um dos objetivos era propor modelo aplicável para escoamento anular tanto com configuração horizontal quanto vertical e capaz de prever a transição do regime estratificado para anular com configuração horizontal.

Tabela 3.2 - Correlações para determinação do fator de atrito utilizadas no trabalho de Emamzadeh (2012).

f_G	$0,046(Re_G)^{-0,20}$ (Taitel e Dukler, 1976)
f_i	$\xi f_G(Re_i)$ (Ottens et al, 2001)
f_L	$f_i \times 108(Re_{LS})^{-0,726}$ (Hamersma e Hart, 1987)

3.2.3 Fluxos de Calor

Considerando-se escoamento localmente hidrodinamicamente e termicamente desenvolvido, o fluxo de calor na interface entre as fases é

$$q_i'' = h_i(T_G - T_L) \quad (3.30)$$

onde h_i é o coeficiente de transferência de calor por convecção entre as fases. O

fluxo de calor adicionado a cada fase (gasosa e líquida) através da parede pode ser escrito da seguinte forma:

$$q''_{wk} = h_{k,in}(T_{w,in} - T_k) \quad (3.31)$$

onde $h_{w,in}$ é o coeficiente de transferência de calor interno por convecção da fase k com a parede e $T_{w,in}$ é a temperatura interna da parede da tubulação. No entanto, devido à dificuldade de se conhecer esta temperatura, é conveniente avaliar o fluxo de calor em função da temperatura externa da parede da tubulação $T_{w,ext}$ ou em função da temperatura ambiente T_∞ . A Fig. 3.3 ilustra o esquema de temperaturas adotado.

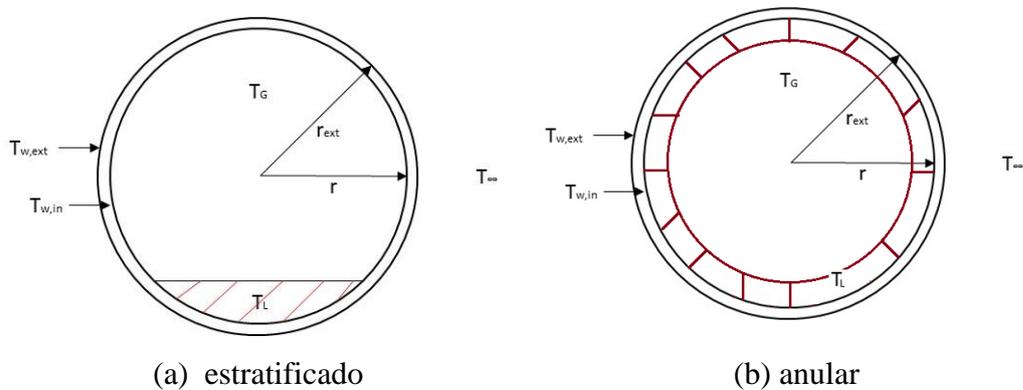


Figura 3.3 - Esquema com as diferentes temperaturas na seção transversal do duto (a) configuração de escoamento estratificado (b) configuração de escoamento anular.

O fluxo de calor pode ser determinado utilizando o conceito de resistências equivalentes. Assim, temos que

$$q''_{wk} = h_{ef,k1}(T_k - T_{w,ext}) \quad \text{ou} \quad q''_{wk} = h_{ef,k2}(T_k - T_\infty) \quad (3.32)$$

dependendo de qual temperatura é conhecida, da parede externa $T_{w,ext}$ ou do ambiente externo T_∞ . Os coeficientes de troca de calor são determinados através das seguintes equações

$$h_{ef,k1} = 1/(R_{wk,in} + R_{cond}) \quad (3.33)$$

$$h_{ef,k2} = 1/(R_{wk,in} + R_{cond} + R_{ext}) \quad (3.34)$$

onde $R_{wk,in}$ é a resistência térmica à convecção interna, R_{cond} é a resistência à condução e R_{ext} é a resistência a convecção externa. Estas resistências são obtidas através das seguintes expressões

$$R_{wk,in} = \frac{1}{h_{k,in}} ; \quad R_{cond} = \frac{\ln(R_{ext}/R)}{K_w} ; \quad R_{ext} = \frac{(R/R_{ext})}{h_{ext}} \quad (3.35)$$

sendo K_w a condutividade térmica da parede e $R=D/2$ e R_{ext} são os raios interno e externo da tubulação. O R_{ext} nada mais é do que o raio interno somado a espessura da parede do duto.

Os coeficientes de calor devido à convecção podem ser obtidos a partir do número de Nusselt para um escoamento localmente termicamente desenvolvido. Temos então para as fases e parede e na interface:

$$Nu_{D_{hk}} = \frac{h_{k,in} D_{hk}}{K_k} ; \quad Nu_i = \frac{h_i D_{hg}}{K_G} \quad (3.36)$$

sendo o diâmetro hidráulico definido como

$$D_{hk} = \frac{4 A_k}{S_k} \quad (3.37)$$

Para regime laminar de escoamento, considerou-se $Nu_{D_{hk}}=3,66$. Que corresponde ao valor para regime laminar com temperatura da parede constante.

De acordo com a análise realizada por Simões (2012), para regime turbulento de escoamento foi considerada a correlação de Gnielinski (1976) para o cálculo do número de Nusselt interno de cada fase e da interface.

$$Nu_{D_{hk}} = \frac{(F_k/8)(Re_k-10^3)Pr_k}{1+12,7\left(\frac{F_k}{8}\right)^{1/2} (Pr_k^{2/3}-1)} \quad (3.38)$$

$$Nu_i = \frac{(F_i/8)(Re_i-10^3)Pr_G}{1+12,7\left(\frac{F_i}{8}\right)^{1/2} (Pr_G^{2/3}-1)} \quad (3.39)$$

sendo Re_k o número de Reynolds (Eqs. 3.22 e 3.23), Pr_k o número de Prandtl,

$$Pr_k = \frac{\mu_k C_{pk}}{K_k} \quad (3.40)$$

F_k é o fator de atrito determinado pela correlação de Petukhov:

$$F_k = (0,790 \ln(Re_k) - 1,64)^{-2} \quad (3.41)$$

3.3 Propriedades Termodinâmicas

Nesta seção são apresentadas as equações de estado e relações termodinâmicas utilizadas para calcular as propriedades termodinâmicas de gases reais, tais como massa específica, calor específico e fator de compressibilidade.

3.3.1 Equações de Estado

As propriedades de um gás real podem ser determinadas através da aplicação de equações de estado que representem o seu comportamento para diferentes condições de pressão, temperatura e volume (ou massa específica). As equações de estado também são chamadas de relação PVT e permitem que, uma vez conhecidas duas variáveis, a terceira variável daquele determinado estado termodinâmico seja obtida.

A lei de gases ideais ou perfeitos é o modelo termodinâmico mais simples, sendo baseada no comportamento de um gás hipotético formado por partículas pontuais, sem interação intermolecular e cujos choques são perfeitamente elásticos (conservação de quantidade de movimento e da energia). Para gases em condições de baixa pressão e altas temperaturas é uma aproximação razoável.

A massa específica de um gás, ideal ou real, pode ser calculada da seguinte forma

$$\rho(P, T) = \frac{P}{Z(P, T) R_G T} \quad \text{com} \quad R_G = \frac{\mathfrak{R}}{M_G} \quad (3.42)$$

onde $\mathfrak{R}=8,314472$ kJ/(kmol K) é a constante universal dos gases perfeitos, R_G é a constante do gás, e M_G é a massa molecular do gás (g/mol ou kg/kmol).

O desvio da idealidade de um gás é medido pelo fator de compressibilidade Z , que varia com pressão e temperatura. Assim, para gases ideais Z é igual a unidade.

O coeficiente de expansão térmica β indica a variação da massa específica com a temperatura em um processo à pressão constante

$$\beta = - \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \quad (3.43)$$

Já o coeficiente de Joule-Thompson indica a dependência da

temperatura com a pressão em um processo adiabático,

$$\mu_{JT} = \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_H = \frac{1}{\rho c_p} (\beta T - 1) \quad (3.44)$$

onde para o caso de gás ideal $\beta = 1/T$ e o coeficiente de Joule-Thomson é nulo.

É interessante mencionar que para um líquido incompressível $\beta=0$, logo o coeficiente de Joule Thompson é sempre negativo, $\mu_{JT} = -1/(\rho C_p)$.

As principais equações de estado empregadas na indústria do petróleo para descrever o comportamento termodinâmico dos gases são as de Soave-Redlich-Kwong, desenvolvida em 1972, e de Peng-Robinson, desenvolvida em 1976 (Pratt, 2002). As zonas mais complicadas para prever o comportamento dos gases são as de alta pressão e baixa temperatura. No entanto, os autores citados acima desenvolveram equações que podem ser aplicadas em qualquer faixa de pressão e temperatura uma vez que consideram as interações intermoleculares em todas as regiões, inclusive nas regiões próximas ao ponto crítico. Sua grande restrição está exatamente no ponto crítico, onde o cálculo de ambas as equações se torna instável (Walas, 1985).

3.3.1.1 Equação de Peng-Robinson

A equação de Peng-Robinson foi desenvolvida em 1976 de maneira a satisfazer os seguintes pontos (Walas, 1985):

- (i) Os parâmetros deveriam ser expressos em termos de propriedades críticas (P_c e T_c) e do fator acêntrico ω ;
- (ii) O modelo deveria produzir boa precisão próxima ao ponto crítico, principalmente para os cálculos do fator de compressibilidade Z e da densidade de líquidos;
- (iii) As regras de mistura não deveriam empregar mais de um único parâmetro de interação binária, que deveria ser independente da pressão, temperatura e composição;
- (iv) A equação deveria ser aplicada aos cálculos de todas as propriedades de fluidos.

A equação de Peng-Robinson é:

$$P = \frac{\Re T}{V-b} - \frac{a}{V^2+2Vb-b^2} \quad (3.45)$$

onde $V = \nu M_G$ é o volume molar, sendo $\nu = 1/\rho$ o volume específico. Os coeficientes a e b podem ser obtidos através das seguintes expressões:

$$a = 0,45724 \frac{(\Re T_c)^2}{P_c} \left[1 + m \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]^2 \quad (3.46)$$

$$b = 0,07780 \frac{\Re T_c}{P_c} \quad (3.47)$$

$$m = 0,37464 + 1,54226\omega - 0,26992\omega^2 \quad (3.48)$$

onde T_c e P_c são as temperaturas e pressões crítica e ω é o fato acêntrico.

O fator de compressibilidade $Z(P,T)$ pode ser obtido ao igualarmos a Eq. 3.42 com a Eq. 3.45. Para sua determinação é necessário achar as raízes do seguinte polinômio cúbico

$$Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A - 3B^2 - 2B)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0 \quad (3.49)$$

onde os parâmetros A e B são definidos como:

$$A = \frac{a P}{(\Re T)^2} \quad (3.50)$$

$$B = \frac{b P}{\Re T} \quad (3.51)$$

Um polinômio cúbico fornece três raízes, podendo ser real ou imaginária. Para a fase gás, o valor correto corresponde à maior raiz real encontrada e, para a fase líquida, à menor raiz real encontrada (Pratt, 2002). No presente caso, utilizou-se somente a equação de Peng-Robinson para a fase gasosa.

3.3.2 Propriedades de Mistura

O gás natural é formado por diferentes componentes químicos. No entanto, como foi visto anteriormente, equações de estado que modelam o comportamento do gás dependem de propriedades da mistura. Por este motivo, é necessário aplicar algumas regras de mistura, cujo objetivo é representar as propriedades da

mistura em termos de sua composição e das propriedades de seus componentes puros.

3.3.2.1 Propriedades de Substância Pura e Mistura

Na Tabela 3.3 são apresentadas propriedades críticas, fator acêntrico e peso molecular dos principais componentes encontrados na composição do gás natural. Estas são as propriedades utilizadas para o cálculo dos coeficientes das equações de estado estudadas no presente trabalho e, são facilmente encontradas na literatura.

Tabela 3.3 - Propriedades termodinâmicas de substâncias puras.

Componente		M_G (kg/kmol)	P_c (kPa)	T_c (K)	ω
CH ₄	Metano	16,042	4599	190,564	0,0115
C ₂ H ₆	Etano	30,069	4872	305,32	0,0995
C ₃ H ₈	Propano	44,096	4248	369,86	0,1523
i-C ₄ H ₁₀	i-Butano	58,122	3796	425,12	0,2002
n-C ₄ H ₁₀	n-Butano	58,122	3796	425,12	0,2002
i-C ₅ H ₁₂	i-Pentano	72,149	3370	469,7	0,2515
n-C ₅ H ₁₂	n-Pentano	72,149	3370	469,7	0,2515
C ₆₊	Hexano	86,175	3025	507,6	0,3013
CO ₂	Dióxido de Carbono	44,01	7383	304,21	0,2236
N ₂	Nitrogênio	28,013	3400	126,2	0,0377
H ₂ S	Ácido Sulfídrico	34,081	8963	373,53	0,0942

Para as propriedades apresentadas acima (M_G , P_c , T_c e ω), a regra de mistura é simples:

$$\varphi_m = \sum_{i=1}^n x_i \varphi_i \quad (3.52)$$

onde φ_m corresponde a propriedade da mistura, φ_i a propriedade de cada componente e x_i o percentual molar deste componente na mistura.

A Eq. 3.52 pode ainda ser utilizada para calcular o coeficiente b da mistura das equações de estado cúbicas e os coeficientes do calor específico à pressão constante.

3.3.2.2 Regra de Combinação Clássica de Van der Waals

O cálculo do coeficiente a da mistura deve utilizar a regra de combinação clássica de Van der Waals (Pratt, 2002). Além do percentual molar de cada componente da mistura, esta regra também considera o potencial de combinação em pares de cada componente através de uma constante empírica de interação binária k_{ij} . A expressão para o cálculo desta propriedade é apresentada a seguir.

$$a_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j \sqrt{a_i a_j} (1 - k_{ij}) \quad (3.53)$$

Para moléculas iguais ($i=j$), a constante de interação binária é zero. Apesar dos valores desta constante serem muito pequenos para o caso da combinação de pares de moléculas de hidrocarbonetos diferentes, os mesmos serão considerados nos cálculos. Os valores de k_{ij} para diferentes pares de combinação são facilmente encontrados na literatura (Walas, 1985). A Tabela 3.4 apresenta a constante de interação binária, para alguns pares de combinação binária.

Tabela 3.4 – Constantes de interação binária.

Pares de combinação		k_{ij}
HC	CO ₂	0,15
	N ₂	0,12
	H ₂ S	0
Metano	Etano	0,01
	Propano	0,01
	i/n-Butano	0,02
	i/n-Pentano	0,02
	Hexano	0,025

3.3.2.3 Calor Específico à Pressão Constante

O calor específico molar à pressão constante varia somente com a temperatura e seu valor é determinado a partir de um polinômio.

$$C_p(T) = c_1 + c_2T + c_3T^2 + c_4T^3 + c_5T^4 \quad (3.54)$$

onde os parâmetros c_1 , c_2 , c_3 , c_4 e c_5 são os coeficientes do polinômio, cuja unidade é $\text{kJ}/(\text{kmol}\cdot\text{K}^{n-1})$, com n variando de 1 à 5, e encontram-se na Tabela 3.5.

Tabela 3.5 – Coeficientes do calor específico à pressão constante.

Componente		c_1	c_2	c_3	c_4	c_5
CH ₄	Metano	36,155	-0,051	$2,21 \times 10^{-4}$	$-1,82 \times 10^{-7}$	$4,90 \times 10^{-11}$
C ₂ H ₆	Etano	33,313	-0,011	$3,57 \times 10^{-4}$	$-3,76 \times 10^{-7}$	$1,20 \times 10^{-10}$
C ₃ H ₈	Propano	29,595	0,084	$3,26 \times 10^{-4}$	$-3,96 \times 10^{-7}$	$1,31 \times 10^{-10}$
i-C ₄ H ₁₀	i-Butano	24,258	0,234	$1,28 \times 10^{-4}$	$-2,44 \times 10^{-7}$	$8,55 \times 10^{-11}$
n-C ₄ H ₁₀	n-Butano	24,258	0,234	$1,28 \times 10^{-4}$	$-2,44 \times 10^{-7}$	$8,55 \times 10^{-11}$
i-C ₅ H ₁₂	i-Pentano	33,781	0,249	$2,53 \times 10^{-4}$	$-3,84 \times 10^{-7}$	$1,30 \times 10^{-10}$
n-C ₅ H ₁₂	n-Pentano	33,781	0,249	$2,53 \times 10^{-4}$	$-3,84 \times 10^{-7}$	$1,30 \times 10^{-10}$
C ₆₊	Hexano	32,366	0,345	$2,03 \times 10^{-4}$	$-3,81 \times 10^{-7}$	$1,33 \times 10^{-10}$
CO ₂	Dióxido de Carbono	29,268	-0,022	$2,65 \times 10^{-4}$	$-4,15 \times 10^{-7}$	$2,01 \times 10^{-10}$
N ₂	Nitrogênio	29,802	-0,007	$1,74 \times 10^{-5}$	$-8,48 \times 10^{-9}$	$9,34 \times 10^{-13}$
H ₂ S	Ácido Sulfídrico	33,9	0,012	$5,38 \times 10^{-5}$	$-3,77 \times 10^{-8}$	$8,60 \times 10^{-12}$

3.4 Condições de Contorno

As velocidades superficiais e as temperaturas de ambas as fases líquida e gasosa foram prescritas na entrada da tubulação. A pressão é especificada na saída da tubulação. A Fig. 3.4 ilustra o esquema de condições de contorno adotado.

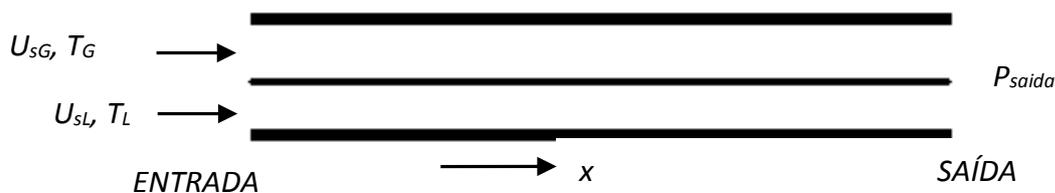


Figura 3.4– Condições de contorno utilizadas.

No escoamento anular e estratificado, a pressão e as velocidades superficiais da fase líquida e da fase gasosa, ambas impostas como condições de contorno, são consideradas uniformes ao longo da tubulação, no instante inicial. A fração volumétrica de equilíbrio do regime de interesse é especificada como uniforme ao longo de toda a tubulação como condição inicial.

No presente trabalho, optou-se por especificar a temperatura ambiente T_∞ externo, sendo o fluxo de calor avaliado em função do coeficiente de transferência de calor efetivo $h_{ef,k2}$.

3.5 Variáveis Auxiliares

Nesta seção, variáveis auxiliares para avaliar o escoamento são definidas. Inicialmente, algumas variáveis utilizadas para avaliar as características do escoamento são apresentadas. A seguir apresenta-se algumas variáveis associadas como a transferência de calor.

3.5.1 Parâmetros Característicos do Escoamento

Cada padrão de escoamento apresenta diferentes parâmetros característicos. Por exemplo, o padrão intermitente de golfadas, é caracterizado pelas velocidades de deslocamento das golfadas e bolhas de gás, seus respectivos comprimentos e frequência das golfadas. No padrão anular, a velocidade de deslocamento das ondas formadas em sua superfície, auxiliam a caracterizar o escoamento.

Estes parâmetros devem ser avaliados após a obtenção do regime estatisticamente permanente. Dessa forma, a fração volumétrica do líquido, assim como sua espessura foi monitorada em diferentes posições axiais durante a solução e após a observação de que este regime estatisticamente estabelecido foi obtido, as grandezas de interesse são armazenadas para a determinação das médias de interesses. O pós-processamento das grandezas características de cada tipo de

padrão de escoamento foi realizado utilizando programas escritos no Matlab.

Para determinação dos parâmetros das golfadas, a fração volumétrica do líquido foi monitorada em duas coordenadas x_1 e x_2 , afastadas de $10 D$. A velocidade da frente de cada golfada n é medida monitorando-se o intervalo de tempo Δt_s levado pela frente da golfada ($\alpha_L > 0,98$) para percorrer esta distância. De forma análoga, a velocidade da bolha ($\alpha_L < 0,02$) é determinada através da identificação do intervalo de tempo Δt_b para a cauda da golfada percorrer a mesma distância

$$U_{s,n} = \frac{x_2 - x_1}{\Delta t_s} \quad ; \quad U_{b,n} = \frac{x_2 - x_1}{\Delta t_b} \quad (3.55)$$

O comprimento da golfada é estimado, considerando-se que esta viaja a velocidade constante e medindo o intervalo de tempo Δt_t que a frente e cauda da golfada passam por uma determinada coordenada.

$$L_{s,n} = U_{s,n} \Delta t_t \quad (3.56)$$

A frequência das golfadas (ν_S) pode ser obtida como o inverso do intervalo que decorre entre a passagem de duas frentes consecutivas de golfadas por uma determinada coordenada

$$\nu_{S,n} = \frac{1}{\Delta t_n} \quad (3.57)$$

Os valores médios de cada um dos parâmetros das golfadas (velocidades da frente e cauda, comprimento e frequência), são determinados através de uma média aritmética, a qual é realizada de acordo com:

$$\langle U_s \rangle = \frac{\sum_{n=1}^N U_{s,n}}{N}, \quad \langle U_b \rangle = \frac{\sum_{n=1}^N U_{b,n}}{N}, \quad (3.58)$$

$$\langle L_S \rangle = \frac{\sum_{n=1}^N L_{S,n}}{N}, \quad \langle \nu_S \rangle = \frac{\sum_{n=1}^N \nu_{S,n}}{N} \quad (3.59)$$

onde N é o número de medidas realizadas.

No caso do padrão anular, a velocidade com que as ondas se propagam no filme de líquido foi avaliada a partir dos dados da altura do filme ao longo do duto no espaço. Para tanto, são consideradas duas sondas cujo objetivo é medir a velocidade de propagação das ondas. A Fig. 3.5 apresenta uma representação

esquemática das sondas de medição.

Uma rotina do Matlab foi utilizada para o cálculo deste parâmetro através do método de correlação cruzada dos sinais da altura do filme de líquido.

$$(f * g) [n] = \sum_{m=-\infty}^{\infty} f^*[m]g [m + n] \quad (3.60)$$

onde f^* é o conjugado complexo de f . O cálculo da correlação cruzada é facilmente realizado utilizando transformada de Fourier. A velocidade da onda é determinada pela razão entre a diferença de posição das duas sondas e o intervalo de tempo correspondente a correlação máxima entre os sinais.

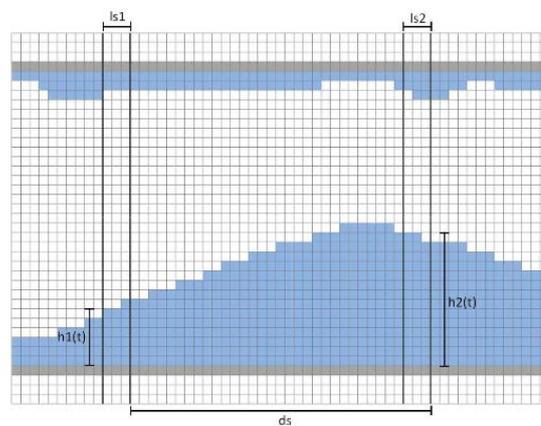


Figura 3.5 – Esquema das sondas de medição da altura do filme de líquido.
Fonte: Farias (2010)

3.5.2 Parâmetros Térmicos

Variáveis referentes a mistura são particularmente interessantes quando se deseja comparar os resultados obtidos numericamente com dados experimentais. Desta forma, apesar da solução numérica ser feita individualmente para cada fase, é interessante criar variáveis de mistura, tais como temperatura, fluxo de calor trocado e coeficiente de troca térmica.

A determinação da temperatura da mistura foi feita através de um modelo que combina as temperaturas, frações volumétricas e velocidades de cada fase. A formulação utilizada é apresentada abaixo.

$$T_m = \frac{T_G \alpha_G U_G + T_L \alpha_L U_L}{\alpha_G U_G + \alpha_L U_L} \quad (3.61)$$

Como mencionado anteriormente, outra variável interessante de se conhecer é o fluxo de calor total local q_{TP}'' , obtido através de uma combinação dos fluxos de

calor de cada fase (q''_{wG} e q''_{wL}). A formulação utilizada é apresentada abaixo.

$$q''_{TP} = \frac{S_G q''_{wG} + S_L q''_{wL}}{S_G + S_L} \quad (3.62)$$

Os fluxos de calor de cada fase k são determinados independentemente, considerando-se a temperatura da parede correspondente a região ocupada pela fase

Podendo-se então calcular o coeficiente local de convecção do escoamento bifásico:

$$h_{TP} = \frac{q''_{TP}}{(T_{ext} - T_m)} \quad (3.63)$$

3.6 Escoamento Estável ou Instável

A modelagem é dita bem posta quando as equações atendem às seguintes condições (Courant e Lax, 1949):

- A solução existe
- A solução é única
- A solução depende continuamente das condições iniciais e de contorno

No caso de um problema mal posto, podem ser obtidas inúmeras soluções para o mesmo problema, sendo todas inválidas. Entretanto, é importante fazermos uma diferenciação entre instabilidades intrínsecas ao escoamento e instabilidades observadas devido ao fato do problema de valor inicial ser mal posto (Inácio, 2012). A estabilidade do escoamento está associada à sua capacidade de restaurar a situação antes da perturbação. Portanto, a estabilidade é uma característica do escoamento, enquanto a classificação do sistema matemático em bem/mal posto é uma característica da modelagem. Carneiro (2006) estudou a estabilidade dos sistemas de equações e recomendou considerar o gás como incompressível. Esta sugestão foi utilizada no trabalho de Inácio (2012), onde foi estudado escoamento anular com configuração vertical

Os critérios para identificar quando o sistema de equações do Modelo de Dois Fluidos é bem posto vem sendo tratado por muitos autores. O trabalho Barnea e Taitel (1994) é uma das principais referências, tendo estabelecido os critérios para o sistema de equações ser bem posto para escoamento sem

viscosidade e com viscosidade. Abaixo o critério que define quando o sistema é bem posto, conforme demonstrado por (Inácio, 2012).

$$-(U_G - U_L)^2 - \left(\frac{\alpha_G}{\rho_G} + \frac{\alpha_L}{\rho_L} \right) \mathcal{D} \left(g \cos \theta (\rho_L - \rho_G) - \wp \sigma \right) \geq 0 \quad (3.64)$$

onde \mathcal{D} e \wp dependem da configuração do escoamento base:

$$\text{estratificado: } \mathcal{D} = -\frac{\pi D}{4 \text{sen}(\gamma/2)} \quad ; \quad \wp = -\kappa_p^2 \quad (3.65)$$

$$\text{anular: } \mathcal{D} = -\frac{D}{4 \sqrt{\alpha_G}} \quad ; \quad \wp = \left(\frac{4}{D^2 \alpha_G} - \kappa_p^2 \right) \quad (3.66)$$

sendo κ_p correspondendo a amplitude da perturbação. O critério “clássico” apresentado por Barnea e Taitel (1994), despreza o efeito da tensão superficial, resultando em

$$-(U_G - U_L)^2 - \left(\frac{\alpha_G}{\rho_G} + \frac{\alpha_L}{\rho_L} \right) \left(g \cos \theta \mathcal{D} (\rho_L - \rho_G) \right) \geq 0 \quad (3.67)$$

Escoamentos em regime anular possuem velocidades de gás tradicionalmente superiores as velocidades de líquido o que torna o critério da desigualdade mais restritivo.

Para configurações verticais ($\theta = 90$), $\cos \theta = 0$, com a formulação “tradicional”, o critério acima nunca será satisfeito. Consequente, o sistema matemático será mal posto, conforme discutido por Inácio (2012) e Emamzadeh (2012).

Para avaliação da região na qual o sistema de equações é bem posto é necessário conhecer a fração de líquido (“holdup”) de equilíbrio. No caso horizontal, considera-se a condição de equilíbrio como sendo a de um escoamento estratificado e para o caso vertical, escoamento anular. Em ambas as situações, considera-se a aceleração nula, e espessura de filme de líquido constante. Assim, combinando-se as Eqs. (3.13) e (3.14), e eliminando-se o gradiente de pressão obtém-se a seguinte expressão:

$$-(\rho_L - \rho_G) g \sin \theta - \tau_{wL} \frac{S_L}{A_L} + \tau_{wG} \frac{S_G}{A_G} + \frac{\tau_i S_i}{A} \left(\frac{1}{\alpha_L} + \frac{1}{\alpha_G} \right) = 0 \quad (3.68)$$

Para determinar os valores do hold-up de através da Eq. (3.68), a partir de valores para as velocidades superficiais de líquido e gás, é necessário utilizar um procedimento iterativo. O procedimento escolhido aqui foi o método da bisseção (Press, 1992).