



**Tuanny Magalhães Cotias Ristow Branco**

**Análise de Deslocamento de PIGs em  
Gasodutos na Presença de Condensados**

**Dissertação de Mestrado**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientadora: Profa. Angela Ourivio Nieckele  
Co-Orientador: Prof. Luis Fernando Golçalves Pires

Rio de Janeiro  
Setembro de 2019



**Tuanny Magalhães Cotias Ristow Branco**

**Análise de Deslocamento de PIGs em  
Gasodutos na Presença de Condensados**

Dissertação apresentada como requisito parcial para  
obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-  
graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio.  
Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo.

**Profa. Angela Ourivio Nieckele, Ph. D.**

Orientadora  
Departamento de Engenharia Mecânica – PUC-Rio

**Prof. Luis Fernando Golçalves Pires, D.Sc.**

Co-Orientador  
Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento – Ctex

**Prof. Frederico Wanderley Tavares, D.Sc.**

Escola de Química – UFRJ

**Prof. Florian Alain Yannick Pradelle, D. Sc.**

Departamento de Engenharia Mecânica – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 27 de setembro de 2019

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização do autor, do orientador e da universidade.

### **Tuanny Magalhães Cotias Ristow Branco**

Gradou-se em Engenharia Química na Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro no ano de 2012, fez Especialização em Engenharia de Dutos e trabalha desde 2012 no SIMDUT PUC-Rio, onde ocupa o cargo de Engenheira de Dutos.

#### Ficha Catalográfica

Branco, Tuanny Magalhães Cotias Ristow

Análise de deslocamento de PIGs em gasodutos na presença de condensados / Tuanny Magalhães Cotias Ristow Branco ; orientadora: Angela Ourivio Nieckele ; co-orientador: Luis Fernando Gonçalves Pires. – 2019.

132 f. : il. color. ; 30 cm

Dissertação (mestrado)–Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica, 2019.

Inclui bibliografia

1. Engenharia Mecânica – Teses. 2. Mudança de fase. 3. Gasoduto. 4. Condensado. 5. PIG. 6. Gás natural. I. Nieckele, Angela Ourivio. II. Pires, Luis Fernando Gonçalves. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. IV. Título.

CDD: 621

Dedico este trabalho ao meu  
filho Arthur, que me fez ver quão forte  
eu posso ser.

## Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento do Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

À PUC-Rio e ao SIMDUT PUC-Rio pela oportunidade.

À Profa. Angela Nieckele pela valiosa orientação.

Ao Dr. Luis Fernando Pires pela valiosa orientação e pelo incentivo e auxílio no projeto.

À COPPE, em especial, ao professor Fred, ao Iuri, ao Rafael Pereira e ao Vinícius pelas infinitas ajudas com o modelo termodinâmico.

Ao parceiro de trabalho Cláudio Veloso pelas valiosas ajudas.

Ao parceiro de trabalho Leonardo Motta pela paciência, compreensão e apoio durante minhas ausências.

Aos amigos Felipe Botelho, Letícia Rodrigues e Max Cordeiro, pela paciência quando eu precisava desabafar.

Ao amigo Bruno Amorim pelas trocas de conhecimento durante as disciplinas.

Ao amigo, Rodrigo Fernandes, pelos inúmeros livros emprestados.

À toda a equipe SIMDUT pelo apoio.

Aos meus pais Gil e Neiva, que sempre me apoiaram na minha formação acadêmica.

A minha irmã Jessica, por todas as caronas e apoio durante a parte de correção e compreensão com minha falta de paciência.

Ao meu amor Adilson, que foi muito paciente e incentivador, não me deixando desistir nas horas difíceis, compreendendo meus surtos e me mostrando que eu era capaz.

## Resumo

Branco, Tuanny Magalhães Cotias Ristow; Nieckele, Angela Ourivio; Pires, Luis Fernando Gonçalves. **Análise de deslocamento de PIGs em gasodutos na presença de condensados**. Rio de Janeiro, 2019. 132p. Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Na exploração de campos *offshore*, é frequente a necessidade transportar óleo e gás por dutos de produção ou de transferência que percorrem grandes distâncias no leito submarino. Em relação aos gasodutos, podem ocorrer a formação de condensado ao longo desses, o que afeta drasticamente a capacidade de entrega e a modalidade operacional, sendo a remoção do condensado realizada por *pigs*. Além disso, devido a existência de condições extremas como baixas temperaturas e altas pressões, pode ocorrer a formação de *plug* de hidrato nos gasodutos. Nesse caso, são previstas operações especiais para a remoção do *plug* de hidrato, onde, durante o procedimento, pode ser gerado condensado. Dessa forma, é importante que essas operações sejam simuladas durante a fase de projeto e de operação para avaliar a efetividade dos procedimentos e os valores das variáveis de processo de forma a garantir a segurança operacional do sistema. O objetivo deste estudo é investigar numericamente o processo de deslocamento de *pigs* e de *plugs* de hidrato ao longo de tubulações, na presença de condensado. A formação de condensado é obtida através de um modelo de equilíbrio de fases, que utiliza a equação de Peng-Robinson para o cálculo das propriedades termodinâmicas para ambas as fases. O escoamento bifásico é modelado como unidimensional. A solução das equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear e energia, acopladas ao balanço de forças para prever o deslocamento do *pig/plug* são resolvidas utilizando o método numérico de diferenças finitas. A modelagem do escoamento e do modelo termodinâmico, englobando o equilíbrio de fases e as propriedades termodinâmicas, foram validadas com soluções analíticas e dados da literatura. Estudos de casos de deslocamento de *pig* e de *plug* de hidrato na presença de condensado foram realizados e os resultados obtidos foram bastante satisfatórios, permitindo concluir que os modelos desenvolvidos podem ser utilizados para a análise e previsão das operações de passagem de *pig* e de remoção de *plugs* de hidrato na presença de condensado.

### Palavras-chave:

Mudança de fase; gasoduto; condensado; PIG; gás natural.

## Abstract

Branco, Tuanny Magalhães Cotias Ristow; Nieckele, Angela Ourivio (Advisor); Pires, Luis Fernando Gonçalves (Co-advisor). **Analysis of pigging gas pipelines in the presence of condensates**. Rio de Janeiro, 2019. 132p. Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

In offshore oilfield exploration, gas is often transported through long-distance transfer pipelines or production pipelines on the seabed. Along the pipeline, condensate may be formed, which dramatically affect the delivery capacity and the operational mode, requiring condensate removal employing pigs. Further, due to the presence of extreme conditions encountered in these pipelines, such as low temperatures and high pressures, hydrate plug can also be formed inside the gas pipelines. In this case, special procedures are foreseen to remove the hydrate plug, during which condensate may be generated. Thus, it is essential that these operations should be simulated throughout the design and operation stages to evaluate the efficacy of these procedures and the process variable values in order to guarantee the system's operational safety. The purpose of this study is to investigate numerically the process of displacement of pigs and hydrate plugs along pipelines, in the presence of condensate. The condensate formation is obtained through a phase behavior model (FLASH), which employs the Peng-Robinson equation to calculate the thermodynamic properties for both phases. Two-phase flow is modeled as one-dimensional. The conservation equations of mass, linear momentum and energy, coupled with the force balance to predict the displacement of the pig/plug are solved, using the numerical method of finite differences. The flow and thermodynamic models were validated with analytical solutions and literature data. The validation of the thermodynamic model included the phase equilibrium and thermodynamic properties. Case studies of displacement of pig and hydrate plug in the presence of condensate were performed and the results obtained were very satisfactory, allowing to conclude that the developed models can be used for the analysis and prediction of the pigging operations and removal of hydrate plugs in the presence of condensate.

### Keywords:

Phase change; gas pipeline; condensate; pig; natural gas

# Sumário

1	Introdução.....	16
1.1	Objetivo .....	19
1.2	Organização do Manuscrito .....	19
2	Revisão Bibliográfica .....	20
2.1	Despressurização .....	20
2.2	Modelo de Deslocamento de Pig .....	22
2.3	Escoamento Bifásico e Modelo de Deslizamento .....	25
2.4	Modelos Termodinâmicos.....	28
3	Modelo Matemático .....	33
3.1	Definição de Variáveis de Mistura Multicomponente.....	34
3.2	Equações de Conservação.....	36
3.2.1	Conservação de massa .....	36
3.2.2	Conservação da quantidade de movimento linear .....	39
3.2.3	Conservação de energia.....	40
3.2.4	Modelagem da dinâmica do <i>pig/plug</i> de hidrato.....	43
3.3	Relações de Fechamento .....	44
3.3.1	Dependência do diâmetro na pressão .....	44
3.3.2	Fator de atrito .....	45
3.3.3	Coeficiente global de transferência de calor .....	47
3.3.4	Propriedades termofísicas .....	48
3.3.5	Velocidade de deslizamento .....	50
3.4	Condições de Contorno .....	52
3.5	Condição Inicial .....	52
3.6	Modelo Termodinâmico .....	53
3.6.1	Equação de estado.....	53
3.6.2	Mudança de fase .....	60
4	Método Numérico .....	70
4.1	Sistema de Coordenadas Móvel.....	71
4.2	Solução do Sistema Algébrico .....	72
5	Validação.....	74
5.1	Validação do Modelo Termodinâmico .....	74
5.1.1	Modelo <i>Flash</i> .....	74
5.1.2	Cálculo do calor específico.....	80
5.1.3	Velocidade do som isotérmica e coeficiente de expansão térmica.....	85

5.2	Validação do Escoamento .....	88
5.2.1	Escoamento de Fanno.....	88
5.2.2	Escoamento bifásico.....	90
6	Análise de Casos.....	99
6.1	Caso 1: tubulação horizontal, baixa vazão.....	99
6.1.1	Condição inicial de repouso.....	101
6.1.2	Comparação com a literatura.....	104
6.2	Caso 2: tubulação horizontal: vazão alta .....	109
6.3	Caso 3: despressurização unilateral .....	113
7	Comentários Finais.....	119
	Referências Bibliográficas .....	121
	Apêndice.....	127
A.	Termos de deslizamento .....	127
A.1.	Fluxo de Deslizamento de Quantidade de Movimento, $J$ .....	127
A.2.	Termo de Deslizamento, $K_2$ .....	127
A.3.	Termo de Deslizamento, $H_2$ .....	128
B.	Propriedades Termodinâmicas.....	129
B.1.	Massa Molecular e Propriedades Críticas .....	129
B.2.	Parâmetro Binário .....	129
B.3.	Coeficientes correlação capacidade térmica .....	130
C.	Escoamento de Fanno.....	131

## Lista de tabelas

Tabela 3.1 – Parâmetros $C_k$ e $n_k$ de Lockhart-Martinelli .....	47
Tabela 3.2 – Correlações para $Co$ e $VGj$ para padrão intermitente e estratificado .....	51
Tabela 5.1 – Composição Molar do fluido utilizado na validação do FLASHPR .....	75
Tabela 5.2 – Propriedades Termodinâmicas .....	76
Tabela 5.3 – Comparação entre a composição das fases (FLASHPR e PVT Petro).....	77
Tabela 5.4 – Fator de Compressibilidade do Líquido .....	78
Tabela 5.5 – Fator de Compressibilidade do Gás.....	79
Tabela 5.6 – Composição para validar $cp$ .....	80
Tabela 5.7 – Comparação do calor específico. Modelo atual vs VRtherm® e Hysys®....	81
Tabela 5.8 – Composição para validar equação de estado.....	86
Tabela 5.9 – Características do caso de Fanno ideal.....	89
Tabela 5.10 - Características da tubulação .....	92
Tabela 5.11 – Composição <i>Winter Lean</i> e Composição hipotética .....	92
Tabela 5.12 – Características do componente hipotético .....	93
Tabela 5.13 – Resumo dos resultados .....	98
Tabela 6.1 – Características da tubulação. Caso 1. (Xu e Gong, 2005) .....	100
Tabela 6.2 – Composição do gás-condensado. Caso 1. ....	100
Tabela 6.3 – Características do pseudo-componente C7+. Caso 1. ....	100
Tabela 6.4 – Características da tubulação. Caso 2. (Li e Jia,2013) .....	110
Tabela 6.5 – Composição do gás-condensado – Caso2 .....	110
Tabela 6.6 – Profundidade dos elementos do <i>riser</i> .....	113
Tabela 6.7 – Características da tubulação do <i>riser</i> .....	114
Tabela 6.8 – Características do plug de hidrato .....	114

## Lista de figuras

Figura 1.1 – Campo Offshore.....	16
Figura 1.2 – Plug de Hidrato .....	17
Figura 1.3 – Passagem de pig para remoção de depósitos .....	18
Figura 3.1 – Layout da tubulação.....	33
Figura 3.2 – Balanço de forças no <i>pig/plug</i> .....	43
Figura 3.3 – Diagrama de fases de uma mistura.....	61
Figura 3.4 – Equilíbrio líquido-vapor (adaptado de Smith, 2005) .....	64
Figura 3.5 – Fluxograma do FlashPR [Fonte: autoria própria].....	69
Figura 4.1 – Distribuição dos elementos e volumes de controle .....	70
Figura 5.1 – Volatilidade a P=150bar e T=60°C .....	78
Figura 5.2 – Fração molar a P=150bar e T=60°C a) fração de líquido b) fração de gás .	79
Figura 5.3 – Envelope de Fases e Pontos testados: a) Envelope completo b) zoom na região de mudança de fases .....	80
Figura 5.4 – Comparação do calor específico– Fluido A .....	82
Figura 5.5 – Comparação do calor específico – Fluido B .....	83
Figura 5.6 – Comparação do calor específico – Fluido C .....	84
Figura 5.7 – Comparação Z, Modelo atual vs CNGA; a) Pressão constante variando temperatura b) Temperatura constante variando pressão.....	86
Figura 5.8 – Comparação $\alpha^2$ : a) Modelo atual vs CNGA_ModeloAtual; b) Modelo atual vs CNGA.....	87
Figura 5.9 – Comparação $\beta$ : a) Modelo atual vs CNGA_ModeloAtual; b) Modelo atual vs CNGA.....	88
Figura 5.10 – Comparação da pressão e temperatura ao longo da tubulação .....	90
Figura 5.11 – Comparação da velocidade e número de Mach ao longo da tubulação. ...	90
Figura 5.12 – Perfil de elevação: (a) AlRaeesi e Al Kaabi (2016), (b)filtrado. ....	91
Figura 5.13 – Envelope de Fases – <i>Winter Lean</i> .....	92
Figura 5.14 –Comparação Lockhart-Martinelli e Miller .....	95
Figura 5.15 – Gradiente de Temperatura - Comparação LM e Miller .....	96
Figura 5.16 – Perfil de Velocidade do escoamento - Comparação LM e Miller.....	96
Figura 5.17 – Comparação com a literatura - Gradiente de Pressão .....	96
Figura 6.1 – Envelope de Fases – gás-condensado.....	101
Figura 6.2 – Perfil de pressão ao longo da tubulação para diferentes instantes de tempo. Caso 1. ....	102

Figura 6.3 – Perfil de fração de líquido ao longo da tubulação para diferentes instantes de tempo. Caso 1.....	103
Figura 6.4 – Perfil de temperatura ao longo da tubulação para diferentes instantes de tempo. Caso 1. ....	103
Figura 6.5 – Perfil de velocidade ao longo da tubulação para diferentes instantes de tempo. Caso 1. ....	104
Figura 6.6 – Velocidade do <i>pig</i> ao longo do duto e posição do <i>pig</i> com o tempo. Caso1. ....	104
Figura 6.7 – Resultados da literatura – Fonte: [Xu e Gong (2005)].....	105
Figura 6.8 – Perfil de pressão em t=8 h, xpig=29 km. Caso 1.....	106
Figura 6.9 – Perfil de fração de líquido e de temperatura em t=8 h, xpig=29 km. Caso 1. Condição inicial repouso.....	106
Figura 6.10 – Perfil de fração de líquido e de temperatura em t=8 h, xpig=29 km. Caso 1. Condição inicial de regime permanente. ....	107
Figura 6.11 – Posição do pig em função do tempo. Caso 1. ....	108
Figura 6.12 – Comparação fração de condensado HYSYS® e Modelo atual.....	109
Figura 6.13 – Resultados da literatura – Fonte: [Li e Jia (2013)]-Caso 2.....	111
Figura 6.14 – Perfil de pressão e fração de líquido em t=9 h, xpig=84 km. Caso 2.....	112
Figura 6.15 – Posição e velocidade do pig em função do tempo. Caso 2.....	112
Figura 6.16 –Volume total de condensado ao longo do tempo. Caso 2. ....	113
Figura 6.17 – Perfil <i>riser</i> e posição inicial do <i>plug</i> de hidrato.....	113
Figura 6.18 – Perfil da Temperatura ambiente.....	114
Figura 6.19 – Variação da posição do <i>plug</i> com tempo.....	116
Figura 6.20 – Variação da velocidade do <i>plug</i> com tempo.....	116
Figura 6.21 – Evolução temporal da pressão ao longo do riser.....	116
Figura 6.22 – Evolução temporal da temperatura ao longo do riser.....	117
Figura 6.23 – Evolução temporal da condensado ao longo do <i>riser</i> .....	117
Figura 6.24 – Evolução temporal da velocidade ao longo do riser.....	118
Figura 6.25 – Evolução temporal do volume de condensado.....	118

## Lista de símbolos

$A$	Área da seção transversal [m <sup>2</sup> ]
$c$	Velocidade do som [m/s]
$C_o$	Número de Courant [-]
$c_p$	Calor específico a pressão constante [J/kg/K]
$c_v$	Calor específico a volume constante [J/kg/K]
$D$	Diâmetro [m]
$E$	Módulo de elasticidade de Young
$f$	Coeficiente de atrito [-]
$F$	Força [N]
$Gr$	Número de Grashof [-]
$h$	Entalpia específica [J/kg] / Coeficiente de transferência de calor por convecção [W/m <sup>2</sup> /K]
$i$	Energia total específica [J/kg]
$k$	Condutividade térmica do fluido [W/m/K]/ Coeficiente isentrópico do gás[-]
$K_t$	Condutividade térmica do tubo [W/m/K]
$K_i$	Volatilidade da espécie $i$
$L$	Comprimento do tubo [m]
$\dot{m}$	Fluxo de massa [kg/s]
$n_{max}$	Número máximo de incógnitas do problema [-]
$Nu$	Número de Nusselt [-]
$Pr$	Número de Prandtl [-]
$P_m$	Perímetro molhado [m]
$p$	Pressão [Pa]
$P_b$	Pressão de bolha [Pa]
$P_d$	Pressão de orvalho [Pa]
$q''$	Fluxo de calor por unidade de área [W/m <sup>2</sup> ]
$\dot{Q}$	Taxa de transferência de calor [W]
$R$	Constante universal para gás ideal [Pa.m <sup>3</sup> /mol/K]
$Re$	Número de Reynolds [-]
$r$	Raio [m]
$S$	Área [m <sup>2</sup> ]

$s$	Coordenada axial [m]
$T$	Temperatura [K]
$t$	Tempo [s]
$U$	Coeficiente global de transferência de calor [W/m <sup>2</sup> /K]
$u$	Energia interna específica [J/kg]
$V$	Velocidade axial média [m/s]
$\forall$	Volume [m <sup>3</sup> ]
$\dot{W}_b$	Taxa de trabalho das forças de corpo [W]
$x_{k,i}$	Fração molar do componente $i$ na fase $k$ [-]
$\chi_k$	Fração molar da fase $k$ [-]
$Z$	Fator de compressibilidade [-]

## Símbolos Gregos

$\alpha$	Fração volumétrica [-]
$\beta$	Coeficiente de expansão térmica (K <sup>-1</sup> )
$\Delta, \delta$	Variação de uma propriedade
$\varepsilon$	Rugosidade [m]
$\gamma$	Coeficiente isentrópico [-]
$\Gamma$	Taxa de transferência de massa entre fases [kg/m <sup>3</sup> /s]
$\mu$	Viscosidade dinâmica [Ns/m <sup>2</sup> ]
$\mu_i^k$	Potencial químico para componente $i$ da fase $k$ [ ]
$\Omega_i$	Variável auxiliar [-]
$\rho$	Massa específica [kg/m <sup>3</sup> ]
$\theta$	Ângulo [rad]
$\tau_s$	Tensão de cisalhamento [N/m <sup>2</sup> ]
$\chi$	Título do componente

## Subscritos

$c$	Referente a corpo (volume)
$crit.$	Referente ao ponto crítico
$e$	Externo
$G$	Fase gás
$i$	iésimo ponto nodal / iésimo componente / iésimo passo de tempo / Interno

$j$	jésimo ponto nodal, jésimo componente
$k$	Referente à fase (gás ou condensado)
$L$	Fase condensado
$m$	Valor médio
$p$	Valor no ponto nodal
$s$	Referente a superfície (área)

## Sobrescritos

$\phi^0$	Referente ao ponto anterior
$\bar{\phi}$	Referente à mistura (gás e condensado)

# 1 INTRODUÇÃO

Gasodutos submarinos de exportação são responsáveis por fazer o escoamento de toda a produção de gás dos campos *offshore* que produzem simultaneamente gás e óleo. O gás natural é tratado no continente em unidades de tratamento de gás natural (UPGN), e depois é escoado através da malha de gasodutos terrestres.



**Figura 1.1 – Campo Offshore**

Com o rápido desenvolvimento dos campos offshore de gás/condensados, o pré-tratamento do gás natural nas cabeças de poço, para remover os componentes mais pesados, não é uma opção. O gás produzido deve ser transmitido por gasodutos lançados no leito submarino através de longas distâncias até as unidades de tratamento de gás em terra.

Assim, pode ocorrer a formação de condensado nos gasodutos de transmissão de gás natural comumente devido ao equilíbrio termodinâmico. A presença de condensado em gasodutos afeta drasticamente a capacidade de entrega e a modalidade operacional, bem como as instalações e equipamentos de recebimento e processamento. Logo, é importante levar em consideração durante o projeto ou durante a operação a existência de condensado e seu deslocamento por *pigs*. Essa análise é normalmente executada por simulações

computacionais.

Outro grande problema é que os gasodutos submarinos de exportação normalmente operam a temperaturas baixas (4°C) e altas pressões (acima de 100 bar), sendo que nestas condições existe a suscetibilidade da formação não só de condensado, mas como também a formação de *plugs* de hidratos (fase sólida) quando a água também se apresenta na composição do gás.

Hidratos são compostos cristalinos, semelhantes ao gelo, formados por água e gás aprisionados à baixa temperatura e alta pressão. Com o crescimento dos cristais, estes tendem a se depositar nas paredes da tubulação, podendo reduzir significativamente a seção transversal disponível para o escoamento e, em casos extremos, gerar o completo bloqueio do duto. Nesse caso, fica configurada a situação de um *plug* de hidrato, que é uma massa cilíndrica, com mesmo diâmetro interno do duto e até vários metros de comprimento. Já o condensado corresponde ao líquido formado devido a condensação das frações mais pesadas (C7+) que compõe o gás natural não processado.



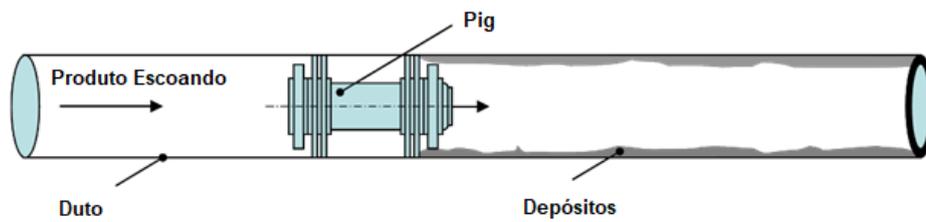
**Figura 1.2 – Plug de Hidrato**

Após sua formação, o *plug* pode ser removido por sua dissociação (através de aquecimento ou despressurização, por exemplo) ou por um esforço mecânico, normalmente realizado pela despressurização unilateral do duto. Em dutos terrestres, a opção pela dissociação do *plug* é obtida com uma equalização da pressão de ambos os lados do duto e esta é gradativamente reduzida até que o *plug* de hidrato comece a “fundir”. Em linhas *offshore*, essa operação torna-se muito difícil e a despressurização unilateral é uma opção bem utilizada para desbloqueio e retomada da produção. O processo de despressurização unilateral, consiste em reduzir a pressão em um dos lados do gasoduto, de forma a vencer o atrito entre o *plug* e a parede, deslocando o *plug* até a saída da tubulação, para ser possível restabelecer a operação do gasoduto. No entanto, durante o processo de despressurização de um gás, pode ocorrer a formação de condensado, transformando o escoamento em bifásico. Escoamento bifásicos apresentam uma

complexidade adicional, pois as fases podem ser arranjar de diversas formas, por exemplo, o escoamento pode ser estratificado, anular, bolhas, golfadas, etc.

As operações de despressurização uni-lateral podem ser perigosas, e, portanto, a previsão do deslocamento do *plug* é muito importante para projetar e controlar este tipo de operação. O deslocamento do *plug*, i.e., a determinação de sua velocidade e posição, pode ser obtido a partir de um balanço de forças sobre o mesmo, juntamente com a determinação do campo de velocidade, pressão, temperatura no interior de um gasoduto, com a solução das equações de conservação que governam o escoamento.

Já a operação de passagem de *pig* é uma pratica comum na indústria de petróleo e gás natural. A passagem de *pig* é empregada com diversas razões, incluindo limpeza de depósitos, como acúmulo de parafina, remoção de líquidos e condensados, separação dos produtos bombeados no mesmo duto e que não podem ser misturados, e inspeções para análise de integridade e manutenção.



**Figura 1.3 – Passagem de pig para remoção de depósitos**

A velocidade do *pig* ou do *plug* é função de várias variáveis, como a massa deste, o atrito com a parede do duto e a diferença de pressão a montante e a jusante. Durante o processo de despressurização e após seu deslocamento, são geradas pressões e temperaturas diferentes das que ocorrem durante a operação normal. Essas novas condições operacionais podem gerar condensado, tornando o padrão de escoamento de monofásico para bifásico. Durante o deslocamento do *pig/plug*, o volume de condensado gerado será “empurrado” pelo *pig/plug*, e irá interferir na sua velocidade de deslocamento. Essa massa líquida, ao se somar à massa do *pig/plug* tende a reduzir sua velocidade, que também será afetada pelo padrão do escoamento bifásico.

Logo, a modelagem do problema de deslocamento de *pig/plug* em gasodutos requer a solução do escoamento a montante e a jusante do *pig/plug*, através de uma modelagem bifásica na presença de mudança de fase, acoplada ao balanço de forças no *pig/plug* de forma a se obter, principalmente, a velocidade do *pig/plug*.

## 1.1 Objetivo

Investigar numericamente o processo de deslocamento de *pigs* para limpeza ou inspeção ou *plugs* de hidrato em operação de despressurização unilateral, na presença de formação de condensado.

Para alcançar esse objetivo principal, os seguintes objetivos secundários foram desenvolvidos:

1. Desenvolvimento de um modelo de Flash para prever a formação de condensado
2. Introdução de uma modelagem bifásica, baseada no modelo de deslizamento, em código de deslocamento de *pigs/plugs* desenvolvido pelo Grupo de Dinâmica dos Fluidos Computacional da PUC-Rio.

## 1.2 Organização do Manuscrito

O presente manuscrito encontra-se organizado da seguinte forma. No Capítulo 2 é apresentada uma revisão bibliográfica, visando situar o presente trabalho no estado da arte existente. O modelamento matemático, juntamente com as equações de estado e relações utilizadas para o cálculo das propriedades termodinâmicas do gás natural são apresentadas no Capítulo 3. O detalhamento das técnicas numéricas aplicadas na discretização das equações através do método das diferenças finitas é apresentado no Capítulo 4. No Capítulo 5, são apresentados testes de validação do modelo termodinâmico e do escoamento, no Capítulo 6, os resultados das simulações realizadas são apresentados e discutidos. Finalmente, no Capítulo 7, encontram-se as conclusões obtidas assim como recomendações para trabalhos futuros. No Apêndice A, estão detalhados alguns passos utilizados durante o desenvolvimento do modelo matemático, no Apêndice B são apresentadas as propriedades termodinâmicas utilizadas e no Apêndice C e apresentada a teoria sobre o escoamento de Fanno.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão bibliográfica foi dividida em quatro partes. Na primeira, apresenta-se um levantamento dos estudos feitos com despressurização em gasodutos e, na segunda, modelos de deslocamento de *pigs/plugs* dentro de dutos são discutidos. A seguir, apresentam-se trabalhos relacionados com a modelagem do escoamento bifásico, e finalmente sobre a modelagem da termodinâmica, visando determinar a quantidade de condensado dentro do duto utilizando modelo tipo *flash*.

### 2.1 Despressurização

Hirt e Romero (1975) desenvolveram um código computacional para estudar a despressurização em dutos retos preenchidos com água a alta temperatura e pressão, o que produzia um movimento bidirecional com a presença de duas fases. As equações foram baseadas na aproximação de fluxo de deslizamento e inclui o modelo de transição de fase e um cálculo padrão de velocidade de deslizamento. Concluíram que a taxa de transição de fase é relativamente importante, assim como o fator de atrito e a magnitude da velocidade de deslizamento.

Em 1995, Chen *et al.* (1995a, 1995b) publicaram dois trabalhos relacionados com despressurização em gasodutos com formação de condensado. No primeiro, um modelo hiperbólico baseado em princípios variacionais de Geurst e Vreenegoor (1988) foi implementado e, no segundo, um modelo numérico simplificado é aplicado para uma mistura multicomponente. Analisaram o efeito do escorregamento entre fases durante o processo de despressurização rápida, mostrando que o modelo de estabilidade marginal fornece melhor desempenho do que o modelo homogêneo simples para despressurização em dutos curtos. Já para dutos longos, os resultados de ambos os modelos foram muito similares. Logo, foi concluído que considerar o escorregamento entre fases em dutos longos é insignificante nas previsões gerais de despressurização.

Em 1998, Xiao *et al.* apresentaram uma abordagem de engenharia para estimar o impacto da operação de desbloqueio de linhas submarinas por meio da despressurização, utilizando o simulador transiente de escoamento multifásico,

OLGA, para simular movimentos de *plugs* de hidrato. As simulações mostraram que os movimentos do *plug* são influenciados por vários parâmetros incluindo diferencial de pressão através de um *plug*, o tamanho e a localização do *plug*, e a presença de óleo ou condensado. As velocidades calculadas do *plug* foram comparadas com dados de campo e foi concluído que as operações de desbloqueio de linhas submarinas exigem preocupações sérias de segurança. O método pode ser utilizado para estabelecer diretrizes para operações de campo.

Nos trabalhos de Camargo *et al.* (2011) e de Gonçalves *et al.* (2012) foram abordadas a alta variação de pressão, a influência da variação da temperatura devido à perda de calor para o ambiente e da composição do gás sobre o deslocamento do *plug*. Os resultados apresentados pelos autores mostraram que, dependendo das condições, e depois de fazer uma análise cuidadosa de risco pode ser seguro remover o *plug* de hidrato através de uma despressurização unilateral em diversas situações típicas nos cenários de produção offshore.

Burlutskiy (2013) desenvolveu um modelo unidimensional para analisar numericamente transientes de despressurização rápida de gás natural seco. Seu foco foi determinar as velocidades das ondas de descompressão ocasionadas, por exemplo, pela ruptura de um gasoduto. Já em 2014, Burlutskiy avaliou o efeito da condensação, a qual traz mais complexidade e desafios à modelagem apropriada do fenômeno. (Burlutskiy, 2014)

Munkejord e Hammer (2015) apresentaram e discutiram modelos de escoamento com foco na simulação de escoamentos transientes de misturas ricas em CO<sub>2</sub> em gasodutos, a qual é de grande relevância para projeto, operação e segurança de gasodutos. Os resultados do modelo são comparados com dados de cinco experimentos de despressurização de três instalações. A formulação de dois modelos de escoamento foi considerada. O primeiro é o modelo de equilíbrio homogêneo, no qual é considerado que as velocidades das fases são iguais. O segundo, é um modelo de dois-fluidos, que é um modelo mais complexo, no qual é modelado o escorregamento entre as fases. Foi concluído que o modelo mais complexo não forneceu previsões substancialmente melhores do que o modelo mais simples.

Coelho (2016) desenvolveu um modelo numérico para simular despressurização em gasodutos considerando escoamento bifásico, homogêneo e unidimensional. A formação e o consumo de condensado de um estado inicial supercrítico era obtido assumindo equilíbrio de fases. As propriedades dos fluidos foram retiradas de tabelas geradas por pacotes comerciais PVTsim e Multiflash. As equações de conservação foram discretizadas pelos métodos de diferenças

finitas empregando a aproximação de Euler para as derivadas em função do tempo e para os termos espaciais o esquema de *upwind*. Um algoritmo de acoplamento direto foi adotado para resolver o sistema algébrico. Os resultados obtidos exibiram boa concordância com dados reais de campo e resultados de ferramentas comerciais de referência.

Borujerdi e Ghazani (2018) desenvolveram um código computacional utilizando a abordagem de volumes finitos para investigar a despressurização de dutos a elevadas pressões, incluindo inicialmente líquido subresfriado. A ocorrência do processo de despressurização era devido a uma ruptura total no final do duto. Analisou-se escoamento de líquido monofásico e com duas fases para diferentes correlações de frações de vazios, utilizando modelos de não-equilíbrio termodinâmico. Comparando os resultados deste trabalho com dados experimentais anteriores, os autores concluíram que a correlação de Bhagwat e Ghajar (2014) foi boa o suficiente para prever a fração de vazios durante o processo de despressurização. Os autores observaram também que, no início do processo de despressurização, a velocidade do escoamento aumenta, juntamente com a taxa de transferência de calor. No entanto, a taxa de transferência de calor reduz com o aumento da fração de vazios ao longo do duto. Como a velocidade diminuiu durante o processo de despressurização, o efeito da fração de vazios passa a ser dominante e a taxa de transferência de calor decresce.

## 2.2 Modelo de Deslocamento de Pig

Um dos primeiros modelos simples para deslocamento de *pig* foi proposto por Mc Donald e Baker (1964). Eles calcularam a dinâmica do escoamento na presença de *pig* baseada no estado permanente, utilizando correlações empíricas de escoamento bifásico desenvolvidas por Kohda *et al.* (1988) para prever a formação de líquido, a velocidade do *pig* e a queda de pressão. O modelo de Kohda foi melhorado por Barua (1982), que propôs um modelo de aceleração de golfada, assumindo uma sequência de regimes permanentes. Tanto o modelo de Kohda quanto o modelo de Barua foram desenvolvidos assumindo escoamento 1D e movimento do *pig* independente do padrão de escoamento, hipóteses que causam grande erro de cálculo.

Nieckele *et al.* (2001) desenvolveram um modelo para prever o deslocamento de *pigs* ao longo de tubulações contendo tanto líquidos compressíveis, como gases, com diferentes condições, utilizando um modelo unidimensional e apresentaram ótimo desempenho. Um modelo para a força de

contato também foi desenvolvido e as equações de conservação de massa e quantidade de movimento linear do escoamento foram resolvidas numericamente acopladas com um balanço de forças no *pig*, utilizando a técnica de diferenças finitas com malha móvel, acompanhando o deslocamento do *pig*.

Xu e Gong (2005) desenvolveram um modelo simplificado para prever a operação de *pigging* em tubulações horizontais de gás-condensado com baixa carga de líquido, estimando o comportamento da fase, com um modelo hidrodinâmico. Os resultados foram comparados com o OLGA, e indicaram que o novo modelo de deslocamento de *pigs* tem boa precisão e alta velocidade de cálculo.

Hosseinalipour *et al.* (2007) estudaram a operação de deslocamento de *pig* em um escoamento bifásico com um modelo unidimensional, isotérmico e transiente. As equações de conservação foram resolvidas numericamente pelo método semi-implícito de diferenças finitas. Os resultados foram comparados com dados experimentais apresentando boa concordância na predição dos parâmetros do *pig* e da golfada, com exceção da velocidade do *pig* e da fração de condensado na golfada, os quais obtiveram pequenos erros devido a hipótese que não há fluxo de gás de jusante para montante do *pig*. Para cálculos práticos de engenharia, esses erros tendem para o lado da segurança operacional, logo, o modelo pode ser considerado excelente.

Tolmasquim e Nieckele (2008) desenvolveram um código numérico, baseado em diferenças finitas, afim de prover uma ferramenta eficiente para auxiliar no controle e no projeto de operações de *pig* através de dutos. Operações de secagem de tubulações foram investigadas com excelente comparação com dados de campo.

No trabalho de Esmailzadehetal e Asemani (2009), apresentou-se uma modelagem matemática do movimento de um *pig* através de oleodutos e gasodutos. As equações de conservação para o escoamento foram resolvidas sob uma condição de estado transiente pelo método das características (MOC). A posição e velocidade do *pig* foram determinados de forma acoplada, utilizando condições operacionais de um oleoduto, apresentando bons resultados quando comparados com dados de dois gasodutos reais.

Segundo Li e Jia (2013), a previsão da velocidade do *pig*, do tempo total de deslocamento do *pig* e do comprimento da golfada são de grande importância para a operação de passagem de *pig*. Para modelar o processo de deslocamento de *pig*, as tubulações foram divididas em uma seção de reformação de escoamento bifásico, seção de gás monofásica, seção de golfada e seção de escoamento

bifásica não perturbada a jusante. O modelo dinâmico para cada seção é construído com base nas equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear e energia da fase líquida e gasosa. Uma vez que as localizações do *pig*, da frente da golfada líquida e da frente da seção de reformação bifásica estão em movimento, é aplicado um método baseado no sistema de coordenadas fixas e limites de movimentação internos no modelo de deslocamento de *pig*. Finalmente, um gasoduto de transporte de gás condensado foi usado para validar os métodos, prevendo razoavelmente bem o tempo total de deslocamento do *pig*, sua velocidade e posição.

O principal objetivo do estudo de Talaie e Deilamani (2014) foi conseguir um modelo hidrodinâmico integrado de duas fases / monofásico para escoamentos de gás-condensado através de gasodutos de transmissão sob condições operacionais industriais, isto é, dutos grandes e pressões elevadas. O modelo desenvolvido abrange o escoamento monofásico de gás, e bifásico com padrão névoa e também todos os padrões de escoamento que ocorrem na transição de estratificado para anular tendo fração de volume de líquido de 0,005 a 0,3. A Correlação de Flanigan, baseada em dados de campo para gasodutos de transmissão, foi corrigida de maneira que foi aplicável para o escoamento bifásico de névoa sob condições operacionais industriais. O modelo de Grolman e Fortuin (1997), baseado em dois regimes permanentes, equação de conservação da quantidade de movimento linear unidimensional, a qual inclui as velocidades superficiais e propriedades de transporte de gás e líquido, diâmetro do duto e o seu ângulo com a horizontal. Para prever a queda de pressão e a quantidade de líquido em um escoamento bifásico com baixa quantidade de líquido, foi utilizado no cálculo da fração de líquido utilizando as abordagens de Taitel e Duckler (1976). O mesmo modelo de Grolman e Fortuin foi aplicado para o cálculo da queda de pressão assim com o modelo de Baker (Baker *et al.*, 1988), modelo homogêneo para prever queda de pressão, baseado em Taitel e Duckler para avaliar a quantidade de líquido.. Para o filme de fração de líquido, o modelo de Grolman e Fortuin e as abordagens de Taitel e Duckler foram empregados para o escoamento de duas fases em subida e descida, respectivamente. Já para a queda de pressão através de dutos ascendentes e descendentes, foram aplicados os métodos de Grolman e Fortuin e o modelo de Baker, respectivamente. Duas novas relações para predição de fatores de atrito entre líquido e gás e entre líquido e parede foram utilizadas, obtidas com base nos dados de campo. A comparação dos resultados do modelo com os dados de campo revelou que o modelo proposto é capaz de prever com precisão a queda de pressão em gasodutos na presença

de condensados.

Caputo, *et al.* (2015) investigaram um caso de ruptura de um gasoduto devido a presença de um *plug* de hidrato utilizando modelos analíticos e numéricos apropriados para analisar o movimento do plug de hidrato assim como o seu impacto contra a parede do gasoduto.

Pinto (2015) avaliou a influência das forças de resistência durante operações de despressurização, analisando dois modelos encontrados na literatura, o modelo de Bollavaram e Sloan e o modelo de Camargo *et al.* (2011), onde o primeiro é mais simples e não considera a força de atrito do plug de hidrato com a parede da tubulação, já o segundo é mais rigoroso e considera não efeito, mas com uma deficiência no cálculo do coeficiente de atrito. Além disso, Pinto também determinou experimentalmente o coeficiente de atrito entre um plug de hidrato e uma tubulação de acrílico.

Jamshidi e Sarkari (2016) desenvolveram um modelo simplificado para prever a operação de deslocamento de *pig* em duto de escoamento bifásico. No início, a condição de estado estacionário foi modelada para encontrar os valores iniciais, então foi modelado o estado transiente causado pela variação da taxa de escoamento da alimentação e, finalmente, o modelo transiente foi acoplado com o modelo de deslocamento de *pig* para descrever o comportamento deste com base em três zonas de escoamento. Foram utilizadas como método de solução as equações de conservação diferenciais unidimensionais, com discretização pelo método de diferenças finita, de forma explícita. Os resultados obtidos com o código foram comparados com a simulação OLGA e o deslocamento de *pig* em três campos reais. Houve boa concordância entre eles, validando assim o método.

## 2.3 Escoamento Bifásico e Modelo de Deslizamento

Visto que diferentes padrões de escoamento podem ocorrer em um escoamento multifásico, é de grande importância prever o mesmo para a modelagem do escoamento, e com isso a escolha do modelo de solução mais adequado dependerá do padrão do escoamento.

O trabalho de Taitel and Dukler (1976) foi o primeiro a desenvolver mapas de regimes de escoamento teóricos capaz de prever a transição entre os diferentes tipos de padrões de escoamento para tubulações horizontais e levemente inclinadas. Eles argumentaram que cada regime de escoamento é baseado em conjuntos diferentes de forças concorrentes e que um único

parâmetro ou conjuntos de coordenadas não deveria prever todas as transições de regime de escoamento. O mapa de Taitel-Dukler inclui cinco regimes de escoamento: estratificado suave, estratificado ondulado, anular, intermitente (pistonado e golfadas), bolhas dispersas.

Zuber e Findlay (1965) utilizaram o modelo de deslizamento para analisar o escoamento bifásico. Neste modelo, a fração de vazios é função das velocidades superficiais total e do vapor, do parâmetro de distribuição de fases e da velocidade de deslizamento. Esses parâmetros são obtidos pelas correlações obtidas a partir de dados experimentais em várias condições operacionais. Deste modo, a correta previsão da fração de vazios no sistema depende da precisão dessas correlações.

Coddington e Macian (2002) realizaram um estudo detalhado de uma série de correlações de fração de vazios. Eles observaram que das 25 correlações diferentes publicadas entre 1965 e 1995, 13 correlações produziram resultados aceitáveis em toda a gama de dados. Muitas das correlações são precisas dentro das condições similares àquelas das quais foram derivadas da correlação de Zuber e Findlay.

Muzychka e Awad (2010) examinaram do ponto de vista da modelagem assintótica o método de Lockhart-Martinelli (Lockhart e Martinelli, 1976) para prever a queda de pressão do escoamento bifásico. Comparações são feitas com o método clássico de Lockhart-Martinelli, o método de Chisholm (Chisholm, 1967) e o método de Turner-Wallis (Wallis, 1969). Uma abordagem alternativa para prever a queda de pressão do escoamento bifásico é desenvolvida usando superposição de três gradientes de pressão: líquido monofásico, gás monofásico e queda de pressão interfacial. Esta nova abordagem permite que a queda de pressão interfacial seja facilmente modelada para cada tipo padrão de escoamento, como bolhas, névoa, caótico, golfada, estratificado e anular, sendo ainda baseado nas combinações clássicas de regimes de fluxo (laminar-laminar, turbulento-turbulento, laminar-turbulento e laminar turbulento).

Tobardi (2015) desenvolveu uma formulação para o cálculo do volume médio de vazão de gás, óleo/água e partículas de hidrato em gasodutos submarinos. Para tal, foi desenvolvido um modelo semi-analítico para incluir os efeitos da transferência de calor e do crescimento do hidrato no gasoduto. Os resultados do trabalho de Tobardi previram para um escoamento bifásico a fração volumétrica e a velocidade para cada fase, assim como o perfil de pressão e temperatura da mistura ao longo do comprimento do gasoduto. O modelo para prever o crescimento do hidrato consegue prever esse crescimento como também a localização onde se inicia a formação de hidrato. Finalmente, para avaliar o

impacto de alguns parâmetros nas características do escoamento, Tobardi conduziu estudos paramétricos. E esses resultados, apresentaram os efeitos das variações de diâmetro da tubulação, taxa de transferência de massa como também pressão e temperatura de entrada, nas características do escoamento como no crescimento do hidrato.

Em 2016, Han, *et al.* realizaram um estudo experimental dinâmico onde obtiveram dados de diferencial de pressão, no intuito de prever a velocidade superficial das fases utilizando modelos de deslizamento baseados na fração volumétrica de água. Concluíram que o modelo é adequado para investigar o escoamento de duas fases óleo e água com velocidade baixa e alta fração volumétrica de água. Além disso, atentaram também que o fator de atrito é muito impactado pelo padrão de escoamento, e o fator de atrito do escoamento de óleo-água disperso possui a distribuição mais complicada pois corresponde a estrutura de escoamento mais complexa.

Em 2018, Eghorieta *et al.* desenvolveram um modelo de deslizamento utilizando duas equações de conservação de massa, uma equação de conservação de momento linear para a mistura, uma relação algébrica para o deslizamento e uma nova relação de fechamento para a velocidade de deslizamento para o caso de mistura de óleo com alta viscosidade e ar em uma tubulação praticamente horizontal. Foi utilizado o método de volume finito com um sistema de malha ordenada. O esquema de fluxo de escorregamento foi utilizado para discretizar o termo de fluxo. Para o termo temporal, foi utilizado o método de Euler explícito utilizando a consideração de número de Courant. Segundo os autores, foi a primeira vez em que um estudo baseado no modelo de deslizamento foi capaz de prever o transiente hidrodinâmico da mistura de ar com óleo muito viscoso. O modelo fornece resultados razoáveis com um erro relativo de 13,55%.

Recentemente, Turney *et al.* (2018) apresentaram um modelo de deslizamento com a inclusão dos parâmetros de fluxo de deslizamento ajustados a partir de dados experimentais da variação temporal da fração de gás e da vazão volumétrica. Também apresentaram uma proposta de modificação da equação de Harmathy (1960) para estimar a velocidade de deslizamento, incluindo a influência da transição de regime hidrodinâmico de bolhas diluídas colidindo com baixa concentração de bolhas para alta densidade de bolhas colidindo com alta concentração.

Shen *et al.* (2018) investigaram experimentalmente as características do escoamento de lama de hidrato de metano em um loop de fluxo de alta pressão sob uma condição isotérmica e isobárica para um sistema de corte de 100% de

água. Estudaram os efeitos da fração volumétrica de hidratos, diâmetro e vazão nos regimes de escoamento, queda de pressão e coeficientes de atrito dos tubos. Três regimes de escoamento diferentes foram encontrados com a formação contínua de hidratos a uma taxa de escoamento fixa para os sistemas de alta vazão. Quando o volume de hidratos era baixo, o hidrato estava em um fluxo turbulento e a queda de pressão era quase constante em uma ampla faixa de fração de volume de hidratos e seu valor era similar ao da água. Como uma fração crítica de volume de hidratos foi excedida, ela mudou para um regime de fluxo de transição onde houve uma diminuição da queda de pressão. Em seguida, a lama de hidratos entrou em um fluxo laminar e a queda de pressão aumentou muito rapidamente com o aumento da fração de volume de hidratos.

## 2.4 Modelos Termodinâmicos

Para a previsão da formação de condensado, conhecimentos sobre equilíbrio de fases, assim como do envelope de fase são fundamentais. A pesquisa sobre *flash* é intensa e numerosos métodos são propostos. Todos os métodos parecem ser desenvolvidos visando aplicações e faixas determinadas, e a garantia de convergência para a correta solução para qualquer problema ainda é um desafio.

O cálculo de equilíbrio multifásico tem sido largamente utilizado em reservatórios e simulações de processo para determinar o número de fases, quantidade da fase e composição da fase a uma determinada pressão, temperatura e composição total. Nas últimas décadas, diversos algoritmos de *flash* multifásico foram desenvolvidos para diferentes tipos de equilíbrio. Para resolver problemas de *flash* pode-se empregar a técnica de minimização da energia livre de Gibbs. No entanto, é possível relacionar a energia livre de Gibbs com a fugacidade. Dessa forma, um procedimento alternativo para resolver este tipo de problema consiste em igualar as fugacidades das fases (Prausnitz *et al.*, 2000) Um dos artigos mais citados na literatura associado a essa técnica é o trabalho de Rachford e Rice (1952). Bünz *et al.* (1991) e Ohanomah e Thompson (1984) utilizaram esta técnica para casos multifásicos.

Desde a década de 1970, na qual as equações de estado de Soave-Redlich-Kwong (Soave, 1972) e Peng-Robinson (1976) foram desenvolvidas, estas têm sido muito empregadas para modelar tanto a fase líquida quanto a fase gás no cálculo de *flash*. Um típico *flash* com equação de estado é formulado pelo balanço material e igualdade da fugacidade dos componentes. Um método robusto de

substituição sucessiva (SS) é comumente utilizado para resolver as equações de fugacidade (Prausnitz *et al.*, 2000). Um procedimento padrão de Substituição Sucessiva contém um *loop* interno para realizar um *flash* com valores da volatilidade K constante, e um *loop* externo para atualizar o valor de K calculado com as fugacidades dos componentes pela equação de estado. Este método é estável, no entanto, sua convergência é muito lenta perto de pontos críticos (Michelsen, 1982a).

Para alcançar tanto estabilidade quanto eficiência, Mehra *et al.* (1980) desenvolveu um esquema acelerado de substituição sucessiva (ACSS) que escolhe um tamanho de passo ótimo para atualizar o valor de K no *loop* externo. Eles reportaram que o número de iteração para convergência foi significativamente reduzido utilizando o ACSS. Nghiem *et al.* (1983) combinou o método Substituição Sucessiva e o Método híbrido de Powell (Powell, 1970), baseado em direções conjugadas, e desenvolveu um critério eficiente de troca. Nghiem também desenvolveu um Método de Substituição Sucessiva quase-Newton (QNSS) que pode alcançar rápida convergência sem necessitar de uma estimativa inicial.

Michelsen (1982b) descreveu um algoritmo para cálculo de equilíbrio multifásico, dados temperatura e pressão, utilizando uma única equação de estado como modelo termodinâmico. O uso da análise de estabilidade para gerar as estimativas iniciais e o método de convergência de segunda ordem levam a solução rápida mesmo na proximidade do ponto crítico.

Marín e Pérez (2011) partiram da necessidade de estimar o perfil de condensado em dutos de produção de gás natural, como parte de um pacote de ferramentas computacionais que, aplicando os modelos termodinâmicos propostos por SRK, PR e Kabaddi-Danner, este último sendo o modelo de SRK modificado para representar o equilíbrio líquido-vapor (ELV) para sistemas contendo hidrocarbonetos e água (Kabaddi e Danner, 1985), estime as características de formação de condensado e água dos dutos de produção de seis poços de gás natural. Um algoritmo de cálculo foi desenvolvido para estimar o perfil de condensado nos seguimentos de dutos utilizando o algoritmo de equilíbrio  $\phi - \phi$ , onde  $\phi$  é o coeficiente de fugacidade, sendo este utilizado tanto para a fase gasosa como para a fase líquida. Foram desenvolvidas as equações de balanço de massa para equilíbrio líquido-vapor e líquido-líquido-vapor (2 fases líquidas e uma fase vapor), assim como o uso das equações cúbicas na determinação dos coeficientes de fugacidade e as constantes de equilíbrio das espécies, nas quais os valores iniciais foram estimados a partir da correlação de Wilson. O resultado

obtido foi comparado com dados de campo e o erro na quantidade de condensado foi menor que 20% para o caso do equilíbrio líquido-vapor e menor que 6% para o líquido-líquido-vapor.

Nichita e Leibovici (2013) propuseram uma nova janela de solução simples (limites superior e inferior onde será procurado o valor da solução), que depende apenas da composição dos componentes mais leve e mais pesado, assim como procedimentos de inicialização baseados em formulações convexas. Dois algoritmos de solução são propostos, baseados na seleção da função convexa adequada e diversos métodos de Newton, incluindo ordens mais elevadas, podendo ser utilizadas sem qualquer controle da estimativa inicial. O algoritmo proposto é simples, de fácil implementação, robusto e de rápida convergência. Nichita e Leibovici focaram apenas na janela de solução, ou seja, o intervalo de valores onde a solução se encontra, que depende apenas da composição da alimentação. As novas janelas de solução são menores que as propostas em 2013. (Nichita e Leibovici, 2017)

De 2014 a 2016, Barbosa Neto com colaboradores (Barbosa Neto *et al.*, 2014; Barbosa Neto, 2015; Barbosa Neto e Bannwart, 2016) desenvolveram uma ferramenta computacional para o cálculo do *flash* isotérmico-isobárico para misturas multicomponentes de óleo e gás com boa precisão tanto para projeto quanto para operação. A equação de estado de Peng-Robinson foi utilizada para modelar o equilíbrio líquido-vapor. O método de Newton foi aplicado para obter convergência da equação de Rachford-Rice e das raízes da equação cúbica. As raízes para cada fase foram determinadas por minimização da energia livre de Gibbs. Os resultados foram comparados com o Hysys®, onde os parâmetros e propriedades termodinâmicas de todos os componentes são idênticas em ambos os modelos, e apresentaram erros muito pequenos. Além disso, o resultado obtido apresenta uma precisão que atende modelos composicionais para petróleo. Os resultados encontrados comparados com condições reais de campo foram apresentaram resultados consistentes.

Fernandes *et al.* (2015) desenvolveram um pacote composicional para possibilitar a resolução de problemas envolvendo equações de estado, entre essas, o cálculo das propriedades termodinâmicas utilizando as equações de Peng-Robinson, Redlich-Kwong e Soave-Redlich-Kwong. Um modelo para resolução de um *flash* multicomponente, baseado no método de substituições sucessivas foi implementado e aplicado a um sistema contendo os hidrocarbonetos propano, n-butano, n-pentano e n-hexano. A validação dos resultados foi feita baseada em uma simulação implementada no software Aspen

Plus. Nos cálculos validados, foram obtidos desvios inferiores a 1% para a equação de Peng-Robinson e inferiores a 3% para Redlich-Kwong e Soave-Redlich-Kwong mostrando a boa precisão na utilização dos códigos.

Com relação a trabalhos que discutem a obtenção do envelope de fase, pode-se citar Kalliapan (1971) que apresentou um procedimento sistemático para calcular o envelope de fases de sistemas de multicomponentes de hidrocarbonetos. O método utilizado para a geração de envelope de fases foi baseado no procedimento publicado por Rowe (1967) para o cálculo de convergência de pressão conhecida como Método de Composição Crítica. Este método foi selecionado por ser um método que estava sendo utilizado com sucesso no cálculo do envelope de fases a altas pressões, especialmente perto da região crítica.

Michelsen (1980) desenvolveu um método rápido e preciso para o cálculo do envelope de fases completo para uma composição total especificada e da razão entre fases. O método foi baseado na equação de Estado de Soave-Redlich-Kwong (SRK) para representar o equilíbrio líquido-vapor, podendo ser utilizado com qualquer outra equação de estado. O algoritmo é baseado no Método de Newton para a solução da equação não-linear, a seleção automática da variável especificada mais conveniente e o uso da solução anteriormente calculada para obter a estimativa inicial. Foram discutidos alguns métodos para a determinação direta do ponto crítico, e é apresentada uma modificação na qual a derivada de segunda ordem da fugacidade dos componentes não é mais necessária.

Em 1986, Michelsen descreveu procedimentos para traçar os limites multifásicos e investigar o fenômeno crítico em sistemas multifásicos, com ênfase no sistema trifásico. Em contraste com o equilíbrio bifásico, a diversidade observada nos sistemas multifásicos impediu a construção de procedimentos capazes de rastrear de forma totalmente automática as regiões multifásicas. Porém, Michelsen discute que as ferramentas descritas, com iterações manuais adequadas, poderiam possibilitar o mapeamento de qualquer mistura individual. (Michelsen, 1986)

Nichita (2008) apresentou um método reduzido para a construção do envelope de fases utilizando equações de estado cúbicas. Ele descreve o procedimento para o cálculo de pressão e temperatura de saturação (ponto de bolha e ponto de orvalho), linhas de título (para uma dada fração molar ou fração molar de uma das fases em equilíbrio, pontos de cricondenterma (acima desta temperatura há apenas gás) e cricondenbar (acima dessa pressão há apenas

líquido), ponto crítico e estabilidade termodinâmica (*spinodal*) A construção do envelope de fases foi totalmente automática.

Siddiqui (2015) desenvolveu um algoritmo para geração de um envelope de fases completo utilizando modelagem computacional incorporando algumas modificações no algoritmo de Michelsen, de maneira a evitar o cálculo de algumas derivadas, assim, requerendo menos dados e esforço computacional. Essas modificações permitiram utilizar o modelo com sucesso para diferentes sistemas de hidrocarbonetos sem qualquer problema de convergência. Como nesse novo modelo não é necessário lidar com derivadas parciais da fugacidade, este pode trabalhar com qualquer modelo de comportamento de fases baseada em equação de estado.

Carmo (2016) desenvolveu um algoritmo de baixo custo computacional com análise de estabilidade acoplada capaz de realizar cálculos de *flash* e traçar envelopes de fases completos de forma totalmente automatizada, que possibilite o cálculo de qualquer equilíbrio envolvendo as fases sólida parafínica, líquida e vapor. O autor se baseou no livro de Michelsen e Mollerup (2007) para o cálculo do equilíbrio bifásico líquido-vapor e líquido-líquido. O método apresentado foi um método híbrido composto por substituições sucessivas e método de Newton para o cálculo dos pontos de saturação para equilíbrio líquido-vapor.

Recentemente, Novak *et al.* (2018) afirmaram que modelos termodinâmicos para prever o comportamento de fluidos de reservatórios são de grande importância para a indústria de óleo e gás. Para propósitos de projeto e operações seguras, é necessário ter um modelo preciso, simples e robusto para prever o equilíbrio de fases em reservatórios. Os autores avaliaram um modelo UMR\_PRU (Regra da Mistura Universal (UMR) combinada com equação de estado de Peng-Robinson e modelo UNIFAC (*Universal quasichemical Functional-group Activity Coefficients*) para prever os pontos de orvalho e bolha de uma mistura de gás condensado, e compararam com as equações cúbicas de SRK e Peng-Robinson (PR), assim como a equação de estado não cúbica de Teoria Estatística de Perturbação para Fluidos de Cadeia de Associação (*non-cubic Perturbed-Chain Statistical Associationg Fluid Theory – PC-SAFT*). Foram obtidos resultados satisfatórios para o modelo avaliado.

### 3 MODELO MATEMÁTICO

Neste capítulo, as equações de conservação necessárias para prever o deslocamento do *pig* ou *plug* de hidrato são apresentadas. Inicialmente, são apresentadas as equações de conservação para determinar um escoamento bifásico, juntamente com o balanço de forças no *plug*. A seguir, as equações de fechamento do modelo são apresentadas, finalizando pela descrição do modelo termodinâmico para a obtenção das propriedades termofísicas, assim como o modelo de mudança de fase para previsão de condensado. Deve-se observar que essa formulação também pode ser empregada para operações de passagem de *pigs* tradicionais.

A configuração geométrica de interesse consiste em uma tubulação longa de diâmetro  $D$ , inclinada de um ângulo  $\theta$  em relação a horizontal (Figura 3.1). O fluido no interior da tubulação troca calor com o ambiente que se encontra a temperatura  $T_\infty$ , sendo o coeficiente de troca de calor com o ambiente igual a  $h_{ex}$ . A direção do escoamento é  $s$  e a direção vertical é  $z$ . A tubulação pode possuir diâmetro nominal variável. Além disso, o diâmetro da tubulação pode sofrer dilatação devido ao efeito da pressão no interior da tubulação.

O fluido que escoar na tubulação é gás com ou sem a presença de condensado. Ambos os fluidos são governados pela equação de estado de Peng-Robinson (1976).

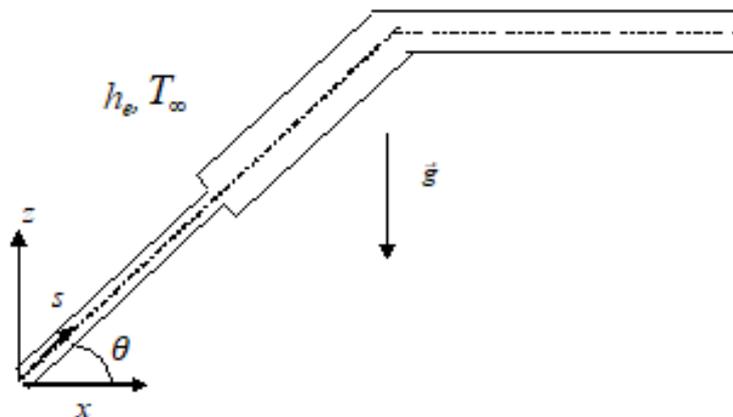


Figura 3.1 – Layout da tubulação

### 3.1 Definição de Variáveis de Mistura Multicomponente

Os hidrocarbonetos são formados por uma mistura multicomponente, i.e., cada fase  $k$  possui  $i$  espécies. A composição de um fluido,  $z_i$ , é definida pela razão da quantidade de matéria de uma determinada espécie  $i$ ,  $n_i$ , e a quantidade total de matéria da mistura  $n$

$$z_i = \frac{n_i}{n} \quad (3.1.1)$$

A composição da espécie  $i$  numa fase  $k$ ,  $x_{ik}$ , é a razão da quantidade de matéria da espécie  $i$  na fase  $k$ ,  $n_{ik}$ , pela quantidade de matéria da fase  $k$ ,  $n_k$

$$x_{ik} = \frac{n_{ik}}{n_k} \quad (3.1.2)$$

A quantidade total de matéria da espécie  $i$  é a soma da quantidade total de matéria da espécie  $i$  das duas fases

$$n_i = n_{iG} + n_{iL} \quad (3.1.3)$$

logo, dividindo a equação acima pela quantidade total de matéria da mistura tem-se

$$\frac{n_i}{n} = \frac{n_{iG}}{n} + \frac{n_{iL}}{n} = \frac{n_{iG}}{n_G} \frac{n_G}{n} + \frac{n_{iL}}{n_L} \frac{n_L}{n} \rightarrow z_i = x_{iG} \chi_G + x_{iL} \chi_L \quad (3.1.4)$$

onde

$$\chi_G = \frac{n_G}{n} \quad ; \quad \chi_L = \frac{n_L}{n} \quad \text{com} \quad \chi_G + \chi_L = 1 \quad (3.1.5)$$

As variáveis  $\chi_G$  e  $\chi_L$  são conhecidas como razão de vapor e alimentação (*feed*) e razão de líquido e *feed*, respectivamente, e correspondem a fração molar de cada uma das fases.

A massa específica da fase  $k$  e a massa específica da espécie  $i$  na fase  $k$  são:

$$\rho_k = \frac{m_k}{V_k}; \quad \rho_{ik} = \frac{m_{ik}}{V_{ik}}; \quad m_k = \sum_i m_{ik} \quad (3.1.6)$$

e relacionam-se com a fração volumétrica da espécie  $i$  na fase  $k$  por

$$\rho_k = \sum_i \zeta_{ik} \rho_{ik} ; \quad \zeta_{ik} = \frac{V_{ik}}{V_k} \quad (3.1.7)$$

sendo  $m$  a massa e  $V$  o volume.

O volume específico em massa  $v$  é o inverso da massa específica, e o volume molar  $\hat{v}$  é igual ao produto do volume específico com a massa molecular  $MM$ . Essas grandezas possuem as seguintes definições

$$v_k = \frac{1}{\rho_k} ; \quad v_{ik} = \frac{1}{\rho_{ik}} \quad (3.1.8)$$

$$\hat{v}_k = MM_k v_k = \frac{MM_k}{\rho_k} ; \quad \hat{v}_{ik} = MM_i v_{ik} = \frac{MM_i}{\rho_{ik}} \quad (3.1.9)$$

Aqui,  $MM_k$  é a massa molecular da fase  $k$ , obtida ponderando a massa molecular de cada componente  $i$ , pela composição molar do respectivo componente na fase  $k$ ,  $x_{ik}$

$$MM_k = \sum_i x_{ik} MM_i \quad (3.1.10)$$

A massa molecular total  $\overline{MM}$  é obtida ponderando a massa molecular de cada componente  $i$ , pela composição global molar do respectivo componente,  $z_i$

$$\overline{MM} = \sum_i z_i MM_i \quad (3.1.11)$$

O volume molar se relaciona com o volume, utilizando a quantidade de matéria

$$\hat{v}_k = \frac{V_k}{n_k} \quad (3.1.12)$$

A fração volumétrica de cada uma das fases é representada pelo símbolo  $\alpha_k$

$$\alpha_k = \frac{V_k}{V} = \frac{A_k}{A} \quad (3.1.13)$$

onde  $V = A ds$  é volume e  $A$  área.  $A_k$  é a área da seção transversal ocupada pela fase  $k$ , a qual é igual a  $G$  para a fase gasosa e  $L$  para a fase líquida.  $A = \pi D^2/4$  é a área transversal total. Considerando a existência de somente duas fases, gasosa e líquida, tem-se que

$$\alpha_L + \alpha_G = 1 \tag{3.1.14}$$

sendo  $\alpha_L$  e  $\alpha_G$  as frações volumétricas correspondentes à fase líquida e à fase gás.

A massa específica da mistura é

$$\rho_m = \frac{m}{V} = \frac{\sum m_k}{V} = \sum \rho_k \frac{V_k}{V} = \sum \rho_k \alpha_k \tag{3.1.15}$$

A fração volumétrica de uma fase  $k$  pode ser obtida em função da quantidade de matéria a partir de

$$\alpha_k = \frac{V_k}{V} = \frac{n_k \hat{V}_k}{n \hat{V}} = \frac{n_k MM_k \rho_m}{n \rho_k MM} \tag{3.1.16}$$

logo

$$\alpha_G = \chi_G \frac{MM_G \rho_m}{\rho_G MM} \quad ; \quad \alpha_L = \chi_L \frac{MM_L \rho_m}{\rho_L MM} \tag{3.1.17}$$

### 3.2 Equações de Conservação

Para modelar o escoamento bifásico, selecionou-se o modelo de deslizamento (*drift flux*) (Zuber e Findlay, 1965), o qual permite a determinação das propriedades da mistura (velocidade, pressão e temperatura).

Uma vez que as tubulações de interesse apresentam um comprimento várias ordens de grandeza maior que o diâmetro, considera-se o escoamento unidimensional, com propriedades uniformes na seção transversal.

#### 3.2.1 Conservação de massa

A equação da continuidade ou conservação da massa da fase  $k$  é

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k A) + \frac{\partial}{\partial s} (\alpha_k \rho_k u_k A) = \pm \Gamma_k A \tag{3.2.1}$$

onde  $\rho$  é a massa específica,  $A$  é a área,  $u$  é a velocidade,  $\Gamma_k = \Gamma_{GL}$  é o termo de transferência de massa entre as fases, sendo o símbolo positivo utilizado para a fase líquida e negativo para a fase gasosa.

A equação da continuidade para a mistura pode ser obtida somando as equações de conservação de massa para cada fase, resultando em

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m A) + \frac{\partial}{\partial s}(\rho_m u_m A) = 0 \quad (3.2.2)$$

sendo a massa específica de mistura ( $\rho_m$ ) e a velocidade de mistura ( $u_m$ ) definidas por

$$\rho_m = \alpha_L \rho_L + \alpha_G \rho_G \quad (3.2.3)$$

$$u_m = \frac{\alpha_L \rho_L u_L + \alpha_G \rho_G u_G}{\rho_m} \quad (3.2.4)$$

A equação da continuidade da mistura pode ser escrita na forma não conservativa, ao expandir as suas derivadas, obtendo-se:

$$A \frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \rho_m \frac{\partial A}{\partial t} + \rho_m u_m \frac{\partial A}{\partial s} + \rho_m A \frac{\partial u_m}{\partial s} + u_m A \frac{\partial \rho_m}{\partial s} = 0 \quad (3.2.5)$$

esta equação pode ser compactada, lembrando-se da definição de derivada material:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_m \frac{\partial}{\partial s} \quad (3.2.6)$$

resultando em:

$$\frac{1}{\rho_m} \frac{D\rho_m}{Dt} + \frac{1}{A} \frac{DA}{Dt} + \frac{\partial u_m}{\partial s} = 0 \quad (3.2.7)$$

Como a massa específica depende de pressão e temperatura, e a área, da pressão, para aumentar o acoplamento entre as variáveis, pode-se introduzir estas dependências diretamente nas equações de conservação.

A partir da Eq. (3.2.7), a derivada material da massa específica da mistura é

$$\frac{D\rho_m}{Dt} = (\rho_G - \rho_L) \frac{D\alpha_G}{Dt} + \frac{DP}{Dt} \left( \frac{\partial \rho_m}{\partial P} \right)_T + \frac{DT}{Dt} \left( \frac{\partial \rho_m}{\partial T} \right)_P \quad (3.2.8)$$

onde as derivadas da massa específica da mistura em relação à pressão e temperatura podem ser escritas como

$$\left( \frac{\partial \rho_m}{\partial P} \right)_T = \frac{1}{a_m^2} \quad (3.2.9)$$

$$\left(\frac{\partial \rho_m}{\partial T}\right)_P = -\beta_m \rho_m \quad (3.2.10)$$

sendo  $a_m$  é a velocidade do som isotérmica da mistura e  $\beta_m$  é o coeficiente de expansão isotérmico da mistura ponderado pela massa específica. Essas grandezas podem ser obtidas a partir dessas propriedades correspondentes de cada fase ( $a_k$  e  $\beta_k$ )

$$a_k^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho_k}\right)_T \quad (3.2.11)$$

$$\beta_k = -\rho_k \left(\frac{\partial \rho_k}{\partial T}\right)_P \quad (3.2.12)$$

pois

$$\left(\frac{\partial \rho_m}{\partial P}\right)_T = \alpha_G \left(\frac{\partial \rho_G}{\partial P}\right)_T + \alpha_L \left(\frac{\partial \rho_L}{\partial P}\right)_T ; \quad \left(\frac{\partial \rho_m}{\partial T}\right)_P = \alpha_G \left(\frac{\partial \rho_G}{\partial T}\right)_P + \alpha_L \left(\frac{\partial \rho_L}{\partial T}\right)_P \quad (3.2.13)$$

resultando em

$$a_m^2 = \frac{1}{\alpha_G/a_G^2 + \alpha_L/a_L^2} \quad (3.2.14)$$

$$\beta_m \rho_m = (\alpha_G \beta_G \rho_G + \alpha_L \beta_L \rho_L) \quad (3.2.15)$$

A variação da área do tubo pode ocorrer devido às forças de pressão ou devido às alterações na geometria do tubo, assim:

$$dA = \left(\frac{\partial A}{\partial P}\right) dP + \left(\frac{\partial A}{\partial s}\right) ds \quad (3.2.16)$$

logo

$$\frac{1}{A} \frac{DA}{Dt} = \frac{1}{A} \left(\frac{\partial A}{\partial P}\right) \frac{DP}{Dt} + \frac{u_m}{A} \frac{\partial A}{\partial s} \quad (3.2.17)$$

Substituindo na equação de conservação de massa a variação da área e massa específica em função de pressão e temperatura e rearrumando tem-se:

$$\frac{DP}{Dt} + \xi \left[ \frac{\partial u_m}{\partial s} + \frac{u_m}{A} \frac{\partial A}{\partial s} - \beta_m \frac{DT}{Dt} + \frac{(\rho_G - \rho_L)}{\rho_m} \frac{D\alpha_G}{Dt} \right] = 0 \quad (3.2.18)$$

sendo

$$\xi = \frac{\rho_m a_m^2}{\xi} \quad ; \quad \tilde{\xi} = 1 + \rho_m a_m^2 \frac{1}{A} \left( \frac{\partial A}{\partial P} \right) \quad (3.2.19)$$

onde  $a^2/\xi$  é a velocidade de propagação da onda acústica no meio.

### 3.2.2 Conservação da quantidade de movimento linear

A equação de conservação de quantidade de movimento linear da mistura também pode ser obtida a partir da equação de conservação de quantidade de movimento linear para cada fase  $k$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k u_k A) + \frac{\partial}{\partial S} (\alpha_k \rho_k u_k^2 A) = -\alpha_k A \frac{\partial P}{\partial S} - \alpha_k \rho_k g A \text{ sen } \theta - \tau_k S_k \pm \tau_i S_i \quad (3.2.20)$$

onde  $g$  é a aceleração da gravidade,  $\theta$  é a inclinação em relação a horizontal,  $\tau_k$  é a tensão cisalhante entre a fase  $k$  e a parede do tubo e  $\tau_i$  é a tensão cisalhante na interface. Note que o sinal da tensão cisalhante na interface é negativo para o gás e positivo para o líquido. Os perímetros molhados entre as fases  $k$  e a parede e na interface são respectivamente  $S_k$  e  $S_i$ . A equação para a mistura é

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_m u_m A) + \frac{\partial}{\partial S} (\rho_m u_m^2 A) = -A \frac{\partial P}{\partial S} - \rho_m g A \text{ sen } \theta - \tau_w S - \frac{\partial J A}{\partial S} \quad (3.2.21)$$

onde  $S = S_L + S_G$  é o perímetro total.  $\tau_w = (\tau_G S_G + \tau_L S_L)/S$  é a tensão cisalhante total na parede e pode ser estimada considerando escoamento localmente hidrodinamicamente desenvolvido, e utilizando o coeficiente de atrito como:

$$\tau_w = \frac{1}{8} f \rho_m |u_m| u_m \quad (3.2.22)$$

$J$  é o fluxo de deslizamento entre as fases (ver Apêndice A.1)

$$J = \alpha_G \alpha_L \frac{\rho_G \rho_L}{\rho_m} u_r^2 \quad (3.2.23)$$

sendo  $u_r$  a velocidade relativa entre as fases

$$u_r = u_G - u_L \quad (3.2.24)$$

A Eq. (3.2.21) pode ser reescrita combinando com a equação de conservação de massa da mistura, Eq. (3.2.2), substituindo as equações (3.2.22) e (3.2.23), dividindo pela área total da seção transversal,  $A = \pi D^2/4$ , e utilizando a definição

de derivada material, Eq. (3.2.6), na seguinte forma não conservativa.

$$\frac{D u_m}{D t} + \frac{1}{\rho_m} \frac{\partial P}{\partial s} + g \operatorname{sen} \theta + \frac{1}{2} \frac{f |u_m| u_m}{D} + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial s} \left( \alpha_L \alpha_G \frac{\rho_L \rho_G}{\rho_m^2} u_r^2 A \right) = 0 \quad (3.2.25)$$

### 3.2.3 Conservação de energia

Para obtenção da equação de conservação de energia para a mistura é empregado o mesmo procedimento utilizado para as outras equações, i.e., combina-se as equações de energia para cada fase  $k$ , as quais podem ser escritas como

$$\dot{Q}_k - \dot{W}_k = \frac{\partial}{\partial t} (i_k \rho_k \alpha_k A) ds + \frac{\partial}{\partial s} \left[ \left( i_k + \frac{P}{\rho_k} \right) \rho_k u_k \alpha_k A \right] ds \pm W_{\Gamma_k} \quad (3.2.26)$$

onde  $\dot{Q}_k = q_w'' S ds$  é a taxa de transferência de calor entrando no sistema da fase  $k$  ( $q_w''$  é o fluxo de calor),  $\dot{W}_k = -u_k \tau_k S_k ds$  é a taxa de trabalho que está sendo realizado pelo sistema da fase  $k$  e  $W_{\Gamma_k}$  é a taxa de trabalho através da interface.  $i_k$  é a energia interna, que pode ser relacionada com a entalpia  $h_k$  com

$$i_k = h_k - \frac{P}{\rho_k} \quad (3.2.27)$$

Reescrevendo a equação da energia para cada fase, em função da entalpia, e combinando com a equação de conservação de energia mecânica da fase, tem-se

$$\begin{aligned} q_w'' S + u_m \tau_m S + \mathbb{Q}_2 A = \frac{\partial}{\partial t} (h_m \rho_m A) + \frac{\partial}{\partial s} (h_m \rho_m u_m A) \\ + \frac{\partial}{\partial s} (A \mathbb{K}_2) - \frac{\partial}{\partial s} (P A) - u_m A \frac{\partial P}{\partial s} - \mathbb{H}_2 A \frac{\partial p}{\partial s} \end{aligned} \quad (3.2.28)$$

onde a entalpia da mistura em base mássica  $h_m$  é

$$h_m = \frac{h_G \rho_G \alpha_G + h_L \rho_L \alpha_L}{\rho_m} \quad (3.2.29)$$

O fluxo de calor  $q_w''$  total pode ser obtido a partir do coeficiente global de troca de calor  $U$  e da temperatura do ambiente  $T_\infty$

$$q_w'' = U (T_\infty - T) \quad (3.2.30)$$

$\mathbb{Q}_2$  está associado com a dissipação viscosa das fases e da mistura

$$\mathbb{Q}_2 = \frac{u_G \tau_G S_G + u_L \tau_L S_L - u_m \tau_m S}{A} = \frac{(u_G - u_L) \tau_G S_G + (u_L - u_m) \tau_m S}{A} \quad (3.2.31)$$

Os termos  $\mathbb{K}_2$  e  $\mathbb{H}_2$  da Eq. (3.2.28) dependem da velocidade relativa entre as fases (ver Apêndices A.2 e A.3)

$$\mathbb{K}_2 = \alpha_G \alpha_L \frac{\rho_G \rho_L}{\rho_m} (h_G - h_L) u_r \quad (3.2.32)$$

$$\mathbb{H}_2 = \alpha_G \alpha_L \left( \frac{(\rho_L - \rho_G)}{\rho_m} u_r \right) \quad (3.2.33)$$

Introduzindo a equação de conservação de massa da mistura, Eq. (3.2.2), na equação da energia, Eq. (3.2.28), utilizando as Eqs. (3.2.29) a (3.2.33), dividindo por  $A$  e escrevendo em função da derivada material, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{4U}{D} (T_\infty - T) + \frac{\rho_m}{2} \frac{f |u_m| u_m^2}{D} + \mathbb{Q}_2 \\ = \rho_m \frac{Dh_m}{Dt} + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial s} (A \mathbb{K}_2) - \frac{DP}{Dt} - \frac{P}{A} \frac{\partial A}{\partial t} - \mathbb{H}_2 \frac{\partial P}{\partial s} \end{aligned} \quad (3.2.34)$$

A entalpia de mistura depende da massa específica, pressão e temperatura. Para avaliar essa relação é conveniente utilizar a entalpia molar de mistura  $\hat{h}_m$ . Para uma composição global constante,  $\overline{MM}$  é constante, logo

$$\frac{Dh_m}{Dt} = \frac{1}{\overline{MM}} \frac{D\hat{h}_m}{Dt} \quad (3.2.35)$$

A entalpia molar  $\hat{h}_m$  é definida como

$$\hat{h}_m = \chi_G \hat{h}_G + (1 - \chi_G) \hat{h}_L \quad (3.2.36)$$

onde  $\chi_G$  é a fração molar da fase  $G$ . Então a variação total da entalpia molar da mistura é

$$\frac{D\hat{h}_m}{Dt} = \left( \frac{\partial \hat{h}_m}{\partial P} \right)_T \frac{DP}{Dt} + \left( \frac{\partial \hat{h}_m}{\partial T} \right)_P \frac{DT}{Dt} + (\hat{h}_G - \hat{h}_L) \frac{D\chi_G}{Dt} \quad (3.2.37)$$

O último termo da equação acima corresponde ao calor latente associado com o processo de mudança de fase,

$$\hat{\lambda} = \hat{h}_G - \hat{h}_L \quad (3.2.38)$$

As derivadas da entalpia molar em relação à pressão e temperatura podem ser escritas como

$$\left(\frac{\partial \hat{h}_k}{\partial T}\right)_P = \widehat{c}p_k \quad (3.2.39)$$

$$\left(\frac{\partial \hat{h}_k}{\partial P}\right)_T = \hat{V}_k [1 - T \beta_k] \quad (3.2.40)$$

sendo o coeficiente o  $\widehat{c}p_k$  e  $\beta_k$  são o calor específico molar à pressão constante e o coeficiente de expansão térmica da fase  $k$ .  $\hat{V}_k$  é o volume molar da fase  $k$  (Eq.(3.1.9)). Com essas definições, as derivadas da entalpia da mistura em relação à pressão e temperatura, então podem ser escritas como

$$\left(\frac{\partial \hat{h}_m}{\partial T}\right)_P = \widehat{c}p_m = \chi_G \widehat{c}p_G + (1 - \chi_G) \widehat{c}p_L \quad (3.2.41)$$

$$\left(\frac{\partial \hat{h}_m}{\partial P}\right)_T = \frac{\overline{MM}}{\rho_m} (1 - T \hat{\beta}) \quad ; \quad \hat{\beta} = \alpha_G \beta_G + \alpha_L \beta_L \quad (3.2.42)$$

onde  $\widehat{c}p_m$  é o calor específico molar à pressão constante de mistura e  $\hat{\beta}$  é o coeficiente de expansão térmica da mistura.

A derivada material da entalpia na base mássica pode então ser escrita como

$$\frac{Dh_m}{Dt} = \frac{1}{\rho_m} (1 - T \hat{\beta}) \frac{D P}{Dt} + c p_m \frac{DT}{Dt} + \lambda \frac{D \chi_G}{Dt} \quad (3.2.43)$$

com

$$c p_m = \frac{\widehat{c}p_m}{\overline{MM}} \quad ; \quad \lambda = \frac{\hat{\lambda}}{\overline{MM}} \quad (3.2.44)$$

Substituindo as equações Eq. (3.2.42) na (3.2.34), dividindo por  $\rho_m c p_m$ , a equação de energia da mistura fica

$$\begin{aligned} \frac{DT}{Dt} = & \frac{4U}{\rho_m c p_m D} (T_\infty - T) + \frac{\hat{\beta} T}{\rho_m c p_m} \frac{DP}{Dt} - \frac{\lambda}{c p_m} \frac{D\chi_G}{Dt} + \frac{P}{\rho_m c p_m A} \frac{1}{\left(\frac{\partial A}{\partial P}\right)} \frac{\partial P}{\partial t} \\ & + \frac{1}{2} \frac{f |u_m| u_m^2}{c p_m D} + \frac{1}{\rho_m c p_m} \mathbb{Q}_2 + \frac{\mathbb{H}_2}{\rho_m c p_m} \frac{\partial P}{\partial s} - \frac{1}{\rho_m c p_m A} \frac{1}{\partial s} (A \mathbb{K}_2) \end{aligned} \quad (3.2.45)$$

Desprezando a influência da dilatação da estrutura na equação da energia

$$\frac{P}{\rho_m c p_m A} \frac{1}{\left(\frac{\partial A}{\partial P}\right)} \frac{\partial P}{\partial t} \sim 0 \quad (3.2.46)$$

e na ausência de deslizamento:

$$\mathbb{H}_2 = \mathbb{K}_2 = \mathbb{Q}_2 = 0 \quad (3.2.47)$$

tem-se

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{4U}{\rho_m c p_m D} (T_\infty - T) + \frac{\hat{\beta} T}{\rho_m c p_m} \frac{DP}{Dt} + \frac{1}{2} \frac{f |u_m| u_m^2}{c p_m D} - \frac{\lambda}{c p_m} \frac{D\chi_G}{Dt} \quad (3.2.48)$$

Analisando a equação anterior, observa-se que na ausência de mudança de fase, não há variação de fração molar, logo o último termo desaparece, resgatando-se a equação de energia monofásica.

### 3.2.4 Modelagem da dinâmica do *pig/plug* de hidrato

O balanço de força no *pig/plug* de hidrato, Figura 3.2, pode ser escrito como

$$m_p \frac{dV_p}{dt} = (P_1 - P_2)A - m_p g \text{sen} \theta - F_{at}(V_p) \quad (3.2.49)$$

onde  $m_p$  é a massa do *pig/plug*,  $V_p$  é a velocidade do *pig/plug*,  $P_1$  e  $P_2$  são as pressões nas faces à montante e à jusante do *pig/plug* e  $\theta$  é o ângulo do eixo do tubo com a horizontal.

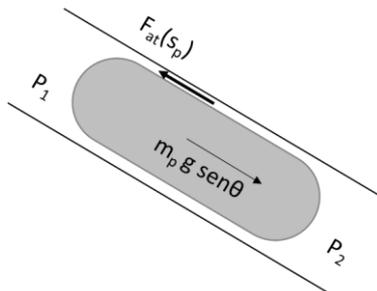


Figura 3.2 – Balanço de forças no *pig/plug*

O termo  $F_{at}(V_p)$  representa a força de contato entre o *pig/plug* e a parede do tubo, a qual pode variar de zero à força estática máxima,  $F_{stat}$ , a fim de equilibrar a força de pressão devido ao escoamento do fluido. O caso de gradiente de pressão negativo, a forma máxima é  $F_{stat}^{neg}$ , caso positivo,  $F_{stat}^{pos}$ . Estes dois valores de força não são necessariamente iguais, visto que o *pig/plug* pode resistir diferentemente ao ser empurrado para frente ou para trás.

$$-F_{stat}^{neg}(s_p) \leq F_{at}(s_p) \leq F_{stat}^{pos}(s_p) \quad (3.2.50)$$

No momento em que o *pig/plug* é posto em movimento, a força de contato pode ser constante ou diretamente proporcional a velocidade de deslocamento do *pig/plug*, isto é

$$F_{at}(V_p) = \begin{cases} +F_{din}^+ & \text{se } V_p > 0 \\ -F_{din}^- & \text{se } V_p < 0 \end{cases} \quad \text{ou} \quad F_{at}(V_p) = C_{din}V_p \quad (3.2.51)$$

$m_p$  é a massa do *pig/plug*.  $C_{din}$  é o coeficiente de atrito dinâmico. Quando a análise for o deslocamento de um *plug* de hidrato, a massa do *plug*  $m_p$  é avaliada em função da massa específica do hidrato  $\rho_p$ , porosidade  $\phi_p$  e do comprimento do *plug*  $\ell_p$ , de acordo com

$$m_p = (1 - \phi_p) \rho_p \frac{\pi D^2}{4} \ell_p \quad (3.2.52)$$

O *pig/plug* se desloca quando a força de pressão  $\Delta P A = (P_1 - P_2) A$  for maior que a força que se opõe ao movimento,  $F_{oposta} = m_p g \sin \theta - F_{at}(V_p)$ .

### 3.3 Relações de Fechamento

Para completar o sistema de equações de conservação, é preciso definir relações de fechamento associado com a dilatação da tubulação, assim como fator de atrito e coeficiente de transferência de calor.

#### 3.3.1 Dependência do diâmetro na pressão

O presente modelo permite considerar a deformação do tubo devido à pressão interna. Considerando uma tubulação totalmente ancorada, pode-se determinar segundo Wylie e Streeter (1978) a variação com a área como sendo igual a

$$\frac{\partial A}{\partial P} = \frac{AD}{eE} (1 - \nu^2) \tag{3.3.1}$$

onde  $e$  é a espessura da parede do tubo,  $A = \pi D^2/4$  é a área da seção transversal, sendo  $D$  o diâmetro interno do tubo.  $E$  é o módulo elasticidade de Young do material do tubo e  $\nu$  é o coeficiente de Poisson.

O diâmetro interno do tubo pode ser obtido integrando a equação acima, considerando que quando a pressão é igual a pressão atmosférica,  $P_{atm}$ , tem-se o diâmetro nominal de referência da tubulação,  $D_{ref}$ . Logo,

$$D = \frac{D_{ref}}{[1 - C_D(P - P_{atm})]} \tag{3.3.2}$$

$$C_D = \frac{(1 - \nu^2)D_{ref}}{2 e E} \tag{3.3.3}$$

A relação entre o diâmetro externo e interno do tubo é

$$D_{ext} = D + 2e \tag{3.3.4}$$

### 3.3.2 Fator de atrito

O fator de atrito  $f$  é uma função do número de Reynolds  $Re$  e, para o regime turbulento, também depende da rugosidade  $\varepsilon$ . Diferentes correlações empíricas podem ser empregadas para estimar essa grandeza. Para escoamento monofásico, a correlação de Miller (Fox *et al.* 2014) fornece uma aproximação razoável. Para escoamento bifásico, pode-se utilizar a correlação de Lockhart-Martinelli (1976).

O número de Reynolds pode ser definido para a mistura,  $Re$ , e para cada uma das fases,  $Re_k$  como

$$Re = \frac{\rho_m |u_m| D}{\mu_m} \tag{3.3.5}$$

$$Re_k = \frac{\rho_k |u_{sk}| D}{\mu_k} \tag{3.3.6}$$

onde a variável  $\mu$  é a viscosidade absoluta do fluido.  $u_{sk}$  corresponde à velocidade superficial da fase  $k$

$$u_{sk} = \alpha_k u_k \tag{3.3.7}$$

### 3.3.2.1 Fator de atrito monofásico

Para regime laminar ( $Re < 2300$ ), o fator de atrito é

$$f = \frac{64}{Re} \quad (3.3.8)$$

Para o regime turbulento, ( $Re > 2300$ ) a correlação de Miller (Fox *et al.* 2014), que fornece uma boa estimativa, pode ser empregada

$$f = 0,25 \left[ \log \left( \frac{\varepsilon / D}{3,7} + \frac{5,74}{Re^{0,9}} \right) \right]^{-2} \quad (3.3.9)$$

Para evitar uma transição abrupta no fator de atrito, devido a transição do regime laminar para o turbulento, na faixa de  $2000 < Re < 2500$ , pode-se utilizar uma interpolação linear entre as duas expressões anteriores.

### 3.3.2.2 Fator de atrito bifásico

Lockhart e Martinelli (1976) propuseram uma correlação para escoamento bifásico, combinando a queda de pressão referente a cada fase. O fator de atrito da mistura bifásica pode ser obtido a partir da queda de pressão bifásica (subscrito  $tp = two-phase$ )

$$f = \frac{\partial P}{\partial s} \Big|_{tp} \frac{2D}{\rho_m u_m^2} \quad (3.3.10)$$

Lockhart e Martinelli introduziram duas variáveis auxiliares  $X$  e  $\Phi_k$  definidas pela razão de queda de pressão de cada fase

$$X^2 = \frac{\frac{\partial P}{\partial s} \Big|_L}{\frac{\partial P}{\partial s} \Big|_G} \quad ; \quad \Phi_k = \frac{\frac{\partial P}{\partial s} \Big|_{tp}}{\frac{\partial P}{\partial s} \Big|_k} \quad (3.3.11)$$

Essas variáveis são relacionadas de acordo com

$$\Phi_L^2 = 1 + \frac{C}{\sqrt{X^2}} + \frac{1}{X^2} \quad ; \quad \Phi_G^2 = 1 + C X + X^2 \quad (3.3.12)$$

Com  $C$  sendo apresentado na Tabela 3.1. As quedas de pressão das fases individuais são obtidas com

$$\frac{\partial P}{\partial s} \Big|_L = \frac{1}{2} \frac{f_L}{D} \rho_L u_{sL}^2 \quad ; \quad \frac{\partial P}{\partial s} \Big|_G = \frac{1}{2} \frac{f_G}{D} \rho_G u_{sG}^2 \quad (3.3.13)$$

onde o fator de atrito pode ser ajustado utilizando as seguintes expressões

$$f_L = \frac{c_L}{Re_L^{n_L}} \quad ; \quad f_G = \frac{c_G}{Re_G^{n_G}} \quad (3.3.14)$$

Sendo que os coeficientes  $c_k$  e  $n_k$  dependem do regime de cada fase, e são apresentados na Tabela 3.1.

O fator de atrito da mistura é

$$f = \frac{\partial P}{\partial s} \Big|_{tp} \frac{2 D}{\rho_m u_m^2} = \Phi_L \frac{\partial P}{\partial s} \Big|_L \frac{2 D}{\rho_m u_m^2} \quad (3.3.15)$$

**Tabela 3.1 – Parâmetros  $C_k$  e  $n_k$  de Lockhart-Martinelli**

Escoamento Gás	Escoamento Líquido	C	$c_G$	$n_G$	$c_L$	$n_L$
Laminar	Laminar	5	64	1	64	1
Laminar	Turbulento	10	64	1	0,316	0,25
Turbulento	Laminar	12	0,316	0,25	64	1
Turbulento	Turbulento	20	0,316	0,25	0,316	0,25

### 3.3.3 Coeficiente global de transferência de calor

O coeficiente de transferência de calor global entre um fluido escoando em um duto e o ambiente pode ser avaliado pela expressão:

$$U = \left( \frac{1}{h_i} + \frac{1}{U_e} \right)^{-1} \quad (3.3.16)$$

onde  $h_i$  é o coeficiente de transferência de calor por convecção interna, entre o fluido e a parede interna da tubulação e  $U_e$  é o coeficiente global de transferência de calor externo, entre a parede interna da tubulação e o meio ambiente externo por convecção e condução.

O coeficiente de transferência de calor interno  $h_i$  depende das condições do escoamento, isto é, do número de Reynolds da mistura  $Re$  (Eq. (3.2.5)), do fator de atrito  $f$  e do número de Prandtl,  $Pr$ , da mistura,

$$Pr = \frac{\mu_m c_{p_m}}{k_m} \quad (3.3.17)$$

onde  $k_m$  é a condutividade térmica da mistura.  $\mu_m$  e  $c_{p_m}$  são as viscosidade absoluta e calor específico à pressão constante para a mistura.

Tanto para o regime laminar como turbulento, utilizou-se, como uma primeira aproximação para avaliar o número de Nusselt  $Nu$ , considerando escoamento localmente completamente desenvolvido. O número de Nusselt é definido como

$$Nu = \frac{h_i D}{k_m} \quad (3.3.18)$$

Para regime laminar ( $Re < 2000$ ), o número de Nusselt foi especificado como

$$Nu = 3,66 \quad (3.3.19)$$

correspondente a condição de contorno de temperatura constante na parede. Para o regime turbulento, ( $Re > 2300$ ), a seguinte correlação de Gnielinski (Incropera e Dewitt, 2008), que fornece uma boa estimativa, foi empregada

$$Nu = Pr \frac{(f/8)(Re - 1000)}{1 + 12,7 \sqrt{\left(\frac{f}{8}\right)} (Pr^{2/3} - 1)} \quad (3.3.20)$$

para  $0,5 < Pr < 2000$  e  $3000 < Re < 5 \times 10^6$ .

Novamente, utilizou-se uma interpolação linear entre as correlações para  $2000 < Re < 2500$ , para evitar variações bruscas no número de Nusselt. O coeficiente global externo  $U_e$  é considerado constante por trecho do duto.

### 3.3.4 Propriedades termofísicas

Para a determinação do fator de atrito e coeficiente global de transferência de calor, é necessário introduzir correlações para determinar a viscosidade absoluta e a condutividade térmica.

#### 3.3.4.1 Viscosidade absoluta

O cálculo da viscosidade absoluta da fase gasosa é realizado com a correlação de Lee *et al.* (1966). Nesta correlação, a viscosidade absoluta é calculada a partir da massa específica e da massa molecular da fase, da temperatura.

$$\mu_g = 10^{-4} A \exp(B \rho_G^C) \quad (3.3.21)$$

$$A = \frac{(9,379 + 0,01607 MM_G) T^{1,5}}{209,2 + 19,26 MM_G + T} \quad (3.3.22)$$

$$B = 3,448 + 0,0101 MM_k + \frac{986,4}{T} \quad (3.3.23)$$

$$C = 2,447 - 0,2224B_{\mu_k} \quad (3.3.24)$$

onde  $\mu_G$  é a viscosidade absoluta do fluido na fase gasosa, em cP,  $T$  é a temperatura em Rankine,  $MM_G$  é a massa molecular da fase em kg/kmol.

Já o cálculo da viscosidade absoluta da fase líquida é realizado com o modelo de Lohrenz *et al.* (1964). Nesta correlação a viscosidade absoluta em cP é calculada a partir da massa específica reduzida, a qual é calculada em função da massa específica crítica, que depende das propriedades críticas dos componentes

$$\begin{aligned} [(\mu_L - \mu^*)\zeta + 10^{-4}]^{1/4} \\ = 0,1023 + 0,023364\rho_r + 0,058533\rho_r^2 \\ - 0,40758\rho_r^3 + 0,0093324\rho_r^4 \end{aligned} \quad (3.3.25)$$

onde  $\mu_L$  é a viscosidade absoluta do líquido em cP,  $\mu^*$  é a viscosidade absoluta de gás ideal, em cP,  $\zeta$  é o parâmetro da viscosidade para mistura e  $\rho_r$  é a massa específica reduzida  $\rho_r = \rho_L / \rho'_c$ , onde  $\rho'_c$  é a massa específica pseudo-crítica em kmol/m<sup>3</sup>.

$$\rho'_c = \frac{1}{v'_c} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{nc} x_{iL} v_{ci}} \quad (3.3.26)$$

onde  $v'_c$  é o volume pseudo-crítico, e  $v_{ci}$  é o volume crítico do componente  $i$ ,  $x_{iL}$  é a fração molar do componente  $i$  na fase líquida,  $L$ .

O parâmetro da viscosidade  $\zeta$  é calculado da seguinte forma:

$$\zeta = \frac{T_{pc}^{1/6}}{\sqrt{MM_L} P_{pc}^{2/3}} \rightarrow T_{pc} = \sum_{i=1}^{nc} x_{iL} T_{ci} ; P_{pc} = \sum_{i=1}^{nc} x_{iL} P_{ci} \quad (3.3.27)$$

onde  $T_{pc}$  e  $P_{pc}$  são a temperatura e a pressão pseudo-críticas respectivamente.

A viscosidade de mistura de um gás a baixa pressão (gás ideal) é calculada da seguinte maneira

$$\mu^* = \frac{\sum_{i=1}^{nc} x_{iL} \mu_i^* \sqrt{MM_i}}{\sum_{i=1}^{nc} x_{iL} \sqrt{MM_i}} \quad (3.3.28)$$

onde  $\mu_i^*$  é a viscosidade do componente  $i$  como um gás a baixa pressão (gás ideal do componente  $i$ ) e é calculada com as equações abaixo

$$\begin{aligned}\mu_i^* &= \frac{34.10^{-5} T_{r_i}^{0,94}}{\zeta_i} & (T_r \leq 1,5) \\ \mu_i^* &= \frac{17,78.10^{-5} (4,58 T_{r_i} - 1,67)^{5/8}}{\zeta_i} & (T_r > 1,5)\end{aligned}\quad (3.3.29)$$

sendo  $T_{r_i} = T/T_{c_i}$  a temperatura reduzida do componente  $i$ .  $\zeta_i$  é o parâmetro de viscosidade do componente  $i$  e é calculado com a seguinte equação.

$$\zeta_i = \frac{T_{c_i}^{1/6}}{\sqrt{MM_i} P_{c_i}^{2/3}} \quad (3.3.30)$$

Finalmente, para o cálculo da viscosidade de mistura a expressão apresentada a seguir é utilizada. (Bankoff, 1960)

$$\mu_m = \alpha_G \mu_G + \alpha_L \mu_L \quad (3.3.31)$$

### 3.3.4.2 Condutividade térmica

A condutividade térmica da mistura ( $k_m$ ) pode ser estimada com

$$k_m = \alpha_G k_G + \alpha_L k_L \quad (3.3.32)$$

onde  $k_G$  e  $k_L$  são as condutividades das fases gasosa e líquida, respectivamente.

### 3.3.5 Velocidade de deslizamento

O escorregamento entre fases é representado pela velocidade de deslizamento ou escorregamento (*Drift*) que é descrita por uma correlação empírica a qual varia com o regime do escoamento, com as características dos fluidos e com a inclinação do duto. A formulação que representa a velocidade de escorregamento entre as fases descreve a interação entre o parâmetro de distribuição ( $C_o$ ) e a velocidade de *Drift* ( $V_{Gj}$ ). O fluxo volumétrico total é definido como sendo a soma das velocidades superficiais  $u_{s_k}$  de ambas as fases, e a velocidade superficial foi definida na equação (3.3.7):

$$j = u_{s_G} + u_{s_L} \quad (3.3.33)$$

E da velocidade de *Drift* modificada  $\bar{V}_{Gj}$  é

$$\bar{V}_{Gj} = V_{Gj} + (C_o - 1)j \quad (3.3.34)$$

De acordo com Zuber e Findlay (1965), a velocidade da fase gás está relacionada com o fluxo volumétrico total da seguinte maneira:

$$u_G = V_{Gj} + C_o j \quad (3.3.35)$$

As velocidades das fases líquida e gasosa podem ser obtidas em função da velocidade de mistura  $u_m$ , ao se combinar as equações anteriores, resultando em

$$u_G = u_m + \frac{\rho_L}{\rho_m} \bar{V}_{Gj} \quad (3.3.36)$$

$$u_L = u_m + \frac{\alpha_G}{1 - \alpha_G} \frac{\rho_G}{\rho_m} \bar{V}_{Gj} \quad (3.3.37)$$

O parâmetro de distribuição  $C_o$  e a velocidade de deslizamento  $V_{Gj}$  são determinados empiricamente, e dependem do padrão do escoamento. Algumas correlações empíricas para esses parâmetros para o padrão de escoamento intermitente e estratificado são apresentadas na Tabela 3.2.

**Tabela 3.2 – Correlações para  $C_o$  e  $\bar{V}_{Gj}$  para padrão intermitente e estratificado**

Escoamento	Correlação	Referência
Vertical	$C_o = 1,2$ $\bar{V}_{Gj} = 0,35 \sqrt{gD \frac{(\rho_L - \rho_G)}{\rho_L}}$	Hibiki e Ishii (2002)
Horizontal / Inclinado escoamento totalmente desenvolvido e comprimento de golfada muito grande (> 10D)	Para $Fr \leq 3,5$ $C_o = 0,35\sqrt{gD} \sin \theta + 0,54\sqrt{gD} \cos \theta$ $\bar{V}_{Gj} = 1,05 + 0,15 \sin^2 \theta$ Para $Fr > 3,5$ $C_o = 1,2$ $\bar{V}_{Gj} = 0,35\sqrt{gD} \cos \theta$ onde o número de Froude é: $Fr = \frac{j}{\sqrt{gD}}$	Bendiksen (1984)

É importante notar que o modelo homogêneo é um caso particular do Modelo de Deslizamento, onde a velocidade de escorregamento é nula, portanto,  $C_o = 1,0$  e  $V_{Gj} = 0,0$ .

### 3.4 Condições de Contorno

Dependendo do problema de interesse, deslocamento de *pig* ou despressurização unilateral com escoamento bifásico, diferentes condições de contorno são aplicadas.

Para a aplicação de despressurização, tem-se que a pressão é imposta nas duas extremidades do domínio, ambas fechadas, i.e., com velocidade nula. Com relação a troca de calor nas extremidades, em uma primeira aproximação, pode-se considerar fluxo nulo de calor nas extremidades.

Outros tipos de condições de contorno consistem em impor o valor de vazão ou velocidade na entrada e pressão na saída ou vice-versa. A temperatura na entrada também pode ser imposta, sendo o fluxo de calor na saída desprezado.

### 3.5 Condição Inicial

Dependendo do problema de interesse, a condição inicial para analisar o deslocamento do *pig/plug* pode ser de repouso ou de escoamento em regime permanente. Caso a condição inicial seja de regime permanente, antes da inclusão do *pig/plug*, esta é obtida numericamente, partindo do repouso.

Considerando a condição inicial com velocidade nula, considera-se também a existência de equilíbrio térmico entre o fluido no interior da tubulação e a temperatura do meio externo.

Estima-se a existência ou não de condensado utilizando-se os valores de pressão nas extremidades do duto.

Para obter a distribuição de pressão, determina-se a distribuição hidrostática em ambos os lados do *pig/plug*, a partir das pressões impostas nas extremidades do duto, integrando-se a equação da hidrostática, utilizando a equação de estado adequada para determinar a relação entre pressão e massa específica.

$$\int_{in}^s \frac{dP}{\rho_m} + \int_{in}^s g dz = 0 \quad (3.5.1)$$

$$\int_s^{out} \frac{dP}{\rho_m} + \int_s^{out} g dz = 0 \quad (3.5.2)$$

Para calcular a integral do termo da pressão, é preciso considerar que a massa específica depende de  $P$ . Visando simplificar um pouco o cálculo, despreza-se a variação do fator de compressibilidade, considerando uma relação direta entre  $\rho_m$  e  $P$ , de acordo com

$$\rho_m = \alpha_G \frac{P MM_G}{Z_G \Re T} + \alpha_L \frac{P MM_L}{Z_L \Re T} = P \aleph \quad (3.5.3)$$

$$\aleph = \frac{\alpha_G MM_G}{Z_G \Re T} + \frac{\alpha_L MM_L}{Z_L \Re T} \approx cte \quad (3.5.4)$$

logo

$$\int \frac{dP}{\rho_m} = \frac{1}{\aleph} \int \frac{dP}{P} = \frac{1}{\aleph} \ln P \quad (3.5.5)$$

então

$$P_{s+ds} = P_s \exp[-\aleph g(z_{s+ds} - z_s)] \quad (3.5.6)$$

e a massa específica da mistura é determinada com a Eq. (3.5.3).

## 3.6 Modelo Termodinâmico

Um modelo termodinâmico fornece as relações necessárias entre as propriedades termodinâmicas de um componente e pode ser utilizado em combinação com relações fundamentais para gerar todas as propriedades requeridas para realizar o cálculo de equilíbrio de fases de uma mistura multicomponentes, determinando a fração volumétrica de cada fase. Diversas são as equações de estado que podem ser utilizadas para representar o comportamento de um fluido. De acordo com Saber (2011), a equação de estado de Peng-Robinson (1976) tem se mostrado eficiente para representar misturas de hidrocarbonetos, tendo sido selecionada neste trabalho.

Nesta seção, o modelo de Peng-Robinson é apresentado, juntamente com a determinação de diversas propriedades termodinâmica, seguido da descrição do modelo de equilíbrio de fase para prever a formação de condensado.

### 3.6.1 Equação de estado

A equação de estado de Peng-Robinson foi inicialmente desenvolvida com o propósito de determinar as propriedades de substâncias puras, sendo em seguida aperfeiçoada e adaptada para atender às previsões de misturas. A equação de estado de Peng-Robinson pode ser definida como:

$$P = \frac{\Re T}{\hat{V}_k - b_{k_m}} - \frac{a_{k_m}}{\hat{V}_k (\hat{V}_k + b_{k_m}) + b_{k_m} (\hat{V}_k - b_{k_m})} \quad (3.6.1)$$

sendo:  $P$  a pressão,  $T$  a temperatura,  $\Re$  a constante universal dos gases,  $\hat{V}_k$  o volume molar,  $a_{k_m}$  e  $b_{k_m}$  os parâmetros de regra de mistura para a fase  $k$ . Nesta equação, o subscrito  $k$  pode representar a fase gás,  $G$ , a fase líquida,  $L$ , e ainda a mistura,  $m$ .

Para facilitar o uso desta equação, é conveniente reescrevê-la introduzindo o fator de compressibilidade da fase  $k$ ,  $Z_k$ , como

$$P = \frac{Z_k \Re T}{\hat{V}_k} \quad (3.6.2)$$

Para determinar o fator de compressibilidade, iguala-se a Eq. (3.6.1) com a Eq. (3.6.2), resultando na seguinte equação cúbica.

$$Z_k^3 + (B_k - 1)Z_k^2 + (A_k - 2B_k - 3B_k^2)Z_k + (B_k^3 + B_k^2 - A_k B_k) = 0 \quad (3.6.3)$$

onde

$$A_k = \frac{a_{k_m} P}{(\Re T)^2} \quad ; \quad B_k = \frac{b_{k_m} P}{\Re T} \quad (3.6.4)$$

A equação de estado de Peng-Robinson é capaz de prever tanto o comportamento de líquido quanto de gás. No caso de líquidos, deve-se selecionar a menor raiz e no caso de gases a maior raiz.

Existem muitas formas de definição para os parâmetros de regra de mistura,  $a_{k_m}$  e  $b_{k_m}$ . A regra de mistura clássica de Van der Waals constitui uma das mais importantes e é definida segundo as equações abaixo.

$$a_{k_m} = \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{j=1}^{N_c} a_{ij} x_{k_i} x_{k_j} \quad (3.6.5)$$

$$b_{k_m} = \sum_{i=1}^{N_c} x_{k_i} b_i \quad (3.6.6)$$

onde:  $N_c$  representa o número de componentes na mistura,  $x_{k_i}$  ou  $x_{k_j}$  é a fração molar de um componente representado pelos índices  $i$  e  $j$  numa dada fase e os parâmetros  $a_{ij}$  e  $b_i$  são dados por:

$$a_{ij} = a_{ji} = \sqrt{a_i a_j} (1 - k_{ij}) \quad (3.6.7)$$

$$b_i = 0,0778 \frac{\Re T_{c_i}}{P_{c_i}} \quad (3.6.8)$$

sendo os parâmetros  $a_i$  (ou  $a_j$ ) calculados na forma:

$$a_i(T) = 0,45724 \frac{\Re^2 T_{c_i}^2}{P_{c_i}} \Omega_i^2 \quad (3.6.9)$$

sendo

$$\Omega_i = \left( 1 + m_i \left( 1 - \sqrt{\frac{T}{T_{c_i}}} \right) \right) \quad (3.6.10)$$

Com  $m_i$  dado por:

$$m_i = \begin{cases} 0,37464 + 1,54226\omega_i - 0,26992\omega_i^2, & \omega_i \leq 0,491 \\ 0,3796 + 1,4850\omega_i - 0,1644\omega_i^2 + 0,01667\omega_i^3, & \omega_i > 0,491 \end{cases} \quad (3.6.11)$$

É possível observar a dependência dos parâmetros  $a_{ij}$  e  $b_i$  com a temperatura crítica ( $T_c$ ) e a pressão crítica ( $P_c$ ) dos respectivos componentes  $i$ . Também, pode-se notar a dependência funcional de  $a_{ij}$  (através do  $a_i$ ) com a temperatura, com o fator acêntrico ( $\omega_i$ ) dos componentes e com os parâmetros de interação binária representados por  $k_{ij}$ .

Os parâmetros de interação binária ( $k_{ij}$ ) caracterizam as interações moleculares entre os componentes  $i$  e  $j$ , sendo nulo quando  $i$  é igual a  $j$  ( $k_{ii} = k_{jj} = 0$ ). A obtenção destes parâmetros constitui uma tarefa difícil mesmo para sistemas simples e, em geral, tais parâmetros são estimados levando-se em conta dados experimentais de Equilíbrio Líquido-Vapor (ELV), para o sistema escolhido.

A partir da equação de estado de Peng-Robinson, diversas variáveis necessárias para a determinação do escoamento, como a massa específica, a entalpia e o calor específico podem ser determinadas. A determinação dessas propriedades é descrita a seguir. Adicionalmente, apresenta-se a fugacidade, a qual é necessária para prever a formação de condensado, como será visto na seção 3.6.2.

### 3.6.1.1 Massa específica e variáveis relacionadas

Uma vez determinado o coeficiente de compressibilidade para cada fase, a massa específica da fase é facilmente obtida com

$$\rho_k = \frac{P}{Z_k} \frac{MM_k}{\mathfrak{R} T} \quad (3.6.12)$$

Assim como a sua derivada em relação a pressão e temperatura para a determinação da velocidade do som isotérmica e coeficiente de expansão térmico de cada fase

$$\left(\frac{\partial \rho_k}{\partial P}\right)_T = \frac{\rho_k}{P} \left[1 - \frac{P}{Z_k} \left(\frac{\partial Z_k}{\partial P}\right)_T\right] \quad (3.6.13)$$

$$\left(\frac{\partial \rho_k}{\partial T}\right)_P = -\frac{\rho_k}{T} \left[1 + \frac{T}{Z_k} \left(\frac{\partial Z_k}{\partial T}\right)_P\right] \quad (3.6.14)$$

Resultando nas seguintes expressões para a velocidade do som e coeficiente de expansão térmica da fase  $k = L$  ou  $G$

$$a_k^2 = \frac{1}{\left(\frac{\partial \rho_k}{\partial P}\right)_T} = \frac{Z_k \mathfrak{R} T}{MM_k \left(1 - \frac{P}{Z_k} \frac{\partial Z_k}{\partial P}\right)} \quad (3.6.15)$$

$$\beta_k = -\frac{1}{\rho_k} \frac{\partial \rho_k}{\partial T} = \frac{1}{T} \left(1 + \frac{T}{Z_k} \frac{\partial Z_k}{\partial T}\right) \quad (3.6.16)$$

onde as derivadas do fator de compressibilidade podem ser obtidas das seguintes expressões

$$\left(\frac{\partial Z_k}{\partial T}\right)_P = \frac{\Pi_T}{\Lambda_d}; \quad \left(\frac{\partial Z_k}{\partial P}\right)_T = \frac{1}{P} \frac{\Pi_P}{\Lambda_d} \quad (3.6.17)$$

sendo

$$\Pi_T = \left(\frac{\partial A_k}{\partial T}\right)_P (B_k - Z_k) + \left(\frac{\partial B_k}{\partial T}\right)_P \Lambda_n \quad (3.6.18)$$

$$\Pi_P = A_k(B_k - Z_k) + B_k \Lambda_n \quad (3.6.19)$$

$$\Lambda_d = 3Z_k^2 + 2Z_k(B_k - 1) + (A_k - 2B_k - 3B_k^2) \quad (3.6.20)$$

$$\Lambda_n = 2Z_k(3B_k + 1) - Z_k^2 + (A_k - 2B_k - 3B_k^2) \quad (3.6.21)$$

onde

$$\left(\frac{\partial A_k}{\partial T}\right)_P = -2 \frac{a_{k_m} P}{\mathfrak{R}^2 T^3} + \frac{P}{(\mathfrak{R} T)^2} \left(\frac{\partial a_{k_m}}{\partial T}\right)_P = \frac{A_k}{T} \left[-2 + \frac{T}{a_{k_m}} \left(\frac{\partial a_{k_m}}{\partial T}\right)_P\right] \quad (3.6.22)$$

$$\left(\frac{\partial A_k}{\partial P}\right)_T = \frac{a_{k_m}}{(\mathfrak{R} T)^2} = \frac{A_k}{P} \quad (3.6.23)$$

$$\left(\frac{\partial B_k}{\partial T}\right)_P = -\frac{B_k}{T} \quad ; \quad \left(\frac{\partial B_k}{\partial P}\right)_T = \frac{B_k}{P} \quad (3.6.24)$$

sendo a derivada do coeficiente  $a_{k_m}$  em relação a temperatura obtida com

$$T \frac{da_{k_m}}{dT} = \sum_{i=1}^{N_c} \sum_{j=1}^{N_c} \frac{x_{k_i} x_{k_j} \sqrt{a_i a_j}}{2} \left( \frac{da_i}{dT} \frac{T}{a_i} + \frac{da_j}{dT} \frac{T}{a_j} \right) (1 - k_{ij}) \quad (3.6.25)$$

$$\frac{T}{a_i} \frac{da_i}{dT} = - \sqrt{\frac{T}{T_{c_i}}} \frac{m_i}{\Omega_i} \quad (3.6.26)$$

Na próxima seção, será visto que, para avaliação da entalpia, é necessário avaliar a derivada segunda do coeficiente  $a_{k_m}$  com relação a temperatura, sendo, portanto, apresentado a seguir. Tem-se que

$$T^2 \frac{d^2 a_{k_m}}{dT^2} = \sum_i^{N_c} \sum_j^{N_c} \frac{x_{k_i} x_{k_j} \sqrt{a_i a_j}}{2} \left[ \left( \frac{d^2 a_i}{dT^2} \frac{T^2}{a_i} + \frac{T^2}{a_j} \frac{d^2 a_j}{dT^2} \right) - \frac{1}{2} \left( \frac{da_i}{dT} \frac{T}{a_i} - \frac{T}{a_j} \frac{da_j}{dT} \right)^2 \right] (1 - k_{ij}) \quad (3.6.27)$$

$$\frac{T^2}{a_i} \frac{d^2 a_i}{dT^2} = \frac{m_i (1 + m_i)}{2} \sqrt{\frac{T}{T_{c_i}}} \frac{m_i}{\Omega_i^2} \quad (3.6.28)$$

### 3.6.1.2 Entalpia e capacidade térmica

A partir da equação de estado de Peng-Robinson, a entalpia na base molar  $\hat{h}_k$ , assim como o calor específico na base molar  $\widehat{c_p}_k$  de cada fase  $k$  também podem ser calculados. O valor absoluto da entalpia  $\hat{h}_k$  para uma substância não pode ser medido e apenas mudanças na entalpia são significativas, dessa forma utiliza-se uma condição de referência com pressão igual a  $P_0$  e temperatura  $T_0$ .

A entalpia e o calor específico correspondente a um determinado valor de pressão e temperatura, podem ser obtidos somando-se seus valores residuais ( $\hat{h}_k^R$  e  $\widehat{c_p}_k^R$ ), obtidos em relação a propriedade de referência de pressão,  $P_0$ , a seus valores de gás ideal ( $\hat{h}_k^{GI}$  e  $\widehat{c_p}_k^{GI}$ ) obtidas nas condições de referência de

temperatura  $T_0$ , para cada fase  $k$ .

$$\hat{h}_k = \hat{h}_k^{GI} + \hat{h}_k^R \quad (3.6.29)$$

$$\widehat{c}p_k = \widehat{c}p_k^{GI} + \widehat{c}p_k^R \quad (3.6.30)$$

A uma dada temperatura  $T$ , a variação de entalpia do fluido pode ser determinada a partir da derivada da entalpia com pressão a uma temperatura fixa  $(\partial \hat{h}_k / \partial P)_T$ . A variação de entalpia molar entre a pressão  $P$  e a pressão de referência  $P_0$  é denominada de entalpia molar residual, e para uma fase  $k$ , é dada por: (Smith *et al.*, 2005)

$$\hat{h}_k^R = [\hat{h}_{kP} - \hat{h}_{kP_0}]_T = \int_{P_0}^P \left( \frac{\partial \hat{h}_k}{\partial P} \right)_T dP \quad (3.6.31)$$

onde  $\hat{h}_{kP}$  é a entalpia molar da fase  $k$ , na pressão  $P$ ,  $\hat{h}_{kP_0}$  é a entalpia molar na pressão de referência  $P_0$ .

A variação de entalpia molar com a pressão a temperatura constante é dada pela Eq. (3.6.31), a qual combinada com as Eq.(3.6.16) e (3.6.2) pode ser escrita como:

$$\left( \frac{\partial \hat{h}_k}{\partial P} \right)_T = \hat{V}_k [1 - T \beta_k] = \frac{\Re T^2}{P} \left( \frac{\partial Z_k}{\partial T} \right)_P \quad (3.6.32)$$

Para o cálculo da entalpia molar residual o termo  $(1/P) (\partial Z_k / \partial T)_P$  deve ser integrado em  $P$ . Utilizando a Eq. (3.6.27), obtém-se

$$\hat{h}_k^R = \Re T (Z_k - 1) + \frac{T}{2\sqrt{2} b_{km}} \frac{d a_{km}}{dT} - a_{km} \ln \left( \frac{Z_k + (1 + \sqrt{2}) B_k}{Z_k + (1 - \sqrt{2}) B_k} \right) \quad (3.6.33)$$

Para obter a capacidade térmica residual é suficiente derivar a expressão acima em função da temperatura, mantendo a pressão constante:

$$\widehat{c}p_k^R = \left( \frac{d \hat{h}_k^R}{dT} \right)_P = \Re \left[ (Z_k - 1) + T \left( \frac{dZ_k}{dT} \right)_P \right] + \frac{T}{2\sqrt{2} b_{km}} \frac{d^2 a_{km}}{dT^2} \ln \left( \frac{Z_k + (1 + \sqrt{2}) B_k}{Z_k + (1 - \sqrt{2}) B_k} \right) - \frac{T}{b_{km}} \frac{d a_{km}}{dT} - a_{km} \left[ \frac{Z_k + T \left( \frac{dZ_k}{dT} \right)_P}{(Z_k + (1 + \sqrt{2}) B_k)(Z_k + (1 - \sqrt{2}) B_k)} \right] \frac{B_k}{T} \quad (3.6.34)$$

As derivadas do coeficiente  $a_{k_m}$  com relação a temperatura encontram-se na seção 3.6.1.1.

Quando a pressão é nula, os fluidos se comportam como gás ideal, e consequentemente a entalpia não varia com a pressão, logo, para determinar a variação da entalpia com a temperatura, utiliza-se o estado de referência correspondente a pressão zero, determinando-se a entalpia de gás ideal  $\hat{h}_k^{GI}$

$$\hat{h}_k^{GI} = \left[ \hat{h}_{kT}^0 - \hat{h}_{kT_0}^0 \right]_P = \int_{T_0}^T \widehat{c}p_k^{GI} dT \quad (3.6.35)$$

onde  $\hat{h}_{kT}^0$  é a entalpia molar de gás ideal na temperatura  $T$ ,  $\hat{h}_{kT_0}^0$  é a entalpia molar de gás ideal na temperatura  $T_0$ , definida para ser zero,  $T_0$  é a temperatura de referência,  $\widehat{c}p_k^{GI}$  é a capacidade térmica de gás ideal.

A capacidade térmica molar da fase  $k$ , pode ser obtida a partir da capacidade térmica molar de cada uma das espécies  $i$ , ponderadas pela composição molar da fase  $k$

$$\widehat{c}p_k^{GI} = \sum_i x_{i_k} \widehat{c}p_i^{GI} \quad (3.6.36)$$

A capacidade térmica molar de gás ideal de cada espécie  $i$  pode ser obtida em função da temperatura, sendo a correlação escolhida da seguinte forma:

$$\widehat{c}p_i^{GI} = \Re(a_{i0} + a_{i1}T + a_{i2}T^2 + a_{i3}T^3 + a_{i4}T^4) \quad (3.6.37)$$

onde as constantes  $a_{i,0}, a_{i,1}, a_{i,2}, a_{i,3}$  e  $a_{i,4}$  são determinadas por dados experimentais, para cada uma das espécies  $i$ , podendo ser obtidas por exemplo do livro *Properties of Gases and Liquids* de Poling *et al.* (2001). Uma tabela com seus dados para as espécies utilizadas nesta dissertação encontra-se no Apêndice B.

Logo, a entalpia de gás ideal, para cada uma das espécies  $i$ , obtida integrando a correlação para o  $\widehat{c}p_i^{GI}$

$$\hat{h}_i^{GI} = \Re \left( a_{i0}T + \frac{a_{i1}}{2}T^2 + \frac{a_{i2}}{3}T^3 + \frac{a_{i3}}{4}T^4 + \frac{a_{i4}}{5}T^5 \right) \quad (3.6.38)$$

e finalmente a entalpia de gás ideal da fase  $k$  é

$$\hat{h}_k^{GI} = \sum_i x_{i_k} \hat{h}_i^{GI} \quad (3.6.39)$$

### 3.6.1.3 Coeficiente de fugacidade

Para avaliar o equilíbrio de fase, é preciso conhecer o coeficiente de fugacidade, como será mostrado na seção 3.6.2. O coeficiente de fugacidade  $\phi$  de cada componente  $i$  em cada fase  $k$  depende da equação de estado. No caso da equação de Peng-Robinson, a fugacidade pode ser obtida por (Sandler, 2006).

$$\ln \phi_i^k = \frac{b_i}{b_{k_m}} (Z_k - 1) - \ln(Z_k - 1) + \frac{A_k}{2\sqrt{2}B_k} \left[ \frac{2 \sum_{j=1}^{N_c} x_{k_i} \sqrt{a_i a_j} (1 - k_{ij})}{a_{k_m}} - \frac{b_i}{b_{k_m}} \right] \ln \left[ \frac{Z_k + (1 + \sqrt{2})B_k}{Z_k + (1 - \sqrt{2})B_k} \right] \quad (3.6.40)$$

### 3.6.2 Mudança de fase

Conforme apresentada na formulação das equações de conservação, a fração molar de cada uma das fases  $\chi_k$  é necessária para a determinação das propriedades de mistura. Conforme mencionado, em um escoamento de gás ( $\chi_G = 1$ ), dependendo dos valores de pressão e temperatura, pode ocorrer mudança de fase com formação de condensado ( $\chi_L \neq 0$ ). Para a determinação das frações molares, um modelo de mudança de fase se torna necessário.

O primeiro passo para determinar a formação de condensado, consiste em analisar o diagrama de fases, ou envelope de fases, e avaliar se para os valores reinantes de pressão e temperatura existe mais de uma fase presente. Após a identificação da existência de mais de uma fase, é necessário determinar as frações molares de cada componente em cada fase, o que pode ser feito assumindo a condição de equilíbrio termodinâmico entre as fases.

A seguir, o procedimento para identificar a quantidade de fases e o modelo de equilíbrio termodinâmico são apresentados.

#### 3.6.2.1 Identificação da quantidade de fases

No presente trabalho, considera-se que a composição global é mantida constante ( $z_i$  é constante), e existe apenas uma ou duas fases.

Segundo Michelsen e Mollerup (2007), o comportamento de uma mistura pode ser descrito por meio de um diagrama de fases, como representado na Figura 3.3. Porém, cada mistura possui o seu próprio diagrama de fases.

Analisando a Figura 3.3, observa-se que esta apresenta duas curvas: curva de pontos de bolha e curva de pontos de orvalho. Observa-se ainda um ponto identificado como ponto crítico.

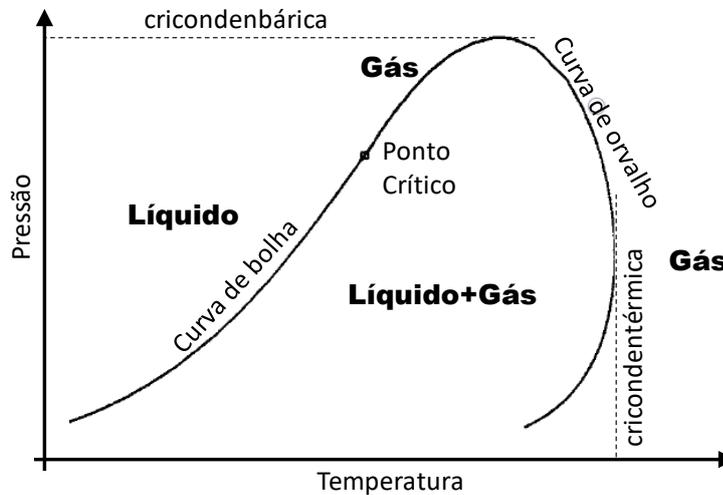


Figura 3.3 – Diagrama de fases de uma mistura

O ponto de bolha é o primeiro ponto no qual gás é formado quando um líquido é aquecido a pressão constante. Enquanto que o ponto de orvalho é o ponto em que a primeira gota de líquido é formada quando um gás é resfriado a pressão constante.

A região delimitada pela curva dos pontos de bolha e a curva dos pontos de orvalho é a área de coexistência das duas fases, que são uma mistura com uma parte em estado líquido em equilíbrio com parte em estado gasoso. Como ilustrado na Figura 3.3, a esquerda da curva de pontos de bolha se encontra a região das misturas líquidas e a direita da curva de pontos de orvalho se encontra a região das misturas gasosas. O ponto crítico é o ponto limite entre a curva do ponto de bolha e do ponto de orvalho, onde têm-se a temperatura crítica e a pressão crítica. O diagrama de fases pode ser construído a partir de curvas de bolha e de orvalho (Michelsen e Mollerup, 2007).

Ainda sobre o diagrama, pode-se observar uma linha tangente à curva dos pontos de orvalho e perpendicular ao eixo das temperaturas, que é chamada de cricondentérmica. Esta linha representa a maior temperatura que se obtém quando coexistem as duas fases. Já a linha tangente à curva dos pontos de bolha e perpendicular ao eixo das pressões, representa a maior pressão em que coexistem as duas fases. Essa linha tangente é chamada de cricondenbárica.

A partir de uma determinada composição, constrói-se um envelope de fases e, ao ser fornecido um par pressão e temperatura, é verificado se para a condição dada de  $(P, T)$ , este par está dentro ou fora do envelope. Se estiver dentro existem

duas fases e fora só existe uma, que pode ser gasosa ou líquida.

No procedimento de cálculo para a construção do envelope de fases, a curva de bolha é construída primeiro a partir de uma pressão baixa até o ponto crítico e, em seguida, a curva de orvalho é gerada. Para iniciar o processo, pressão ou temperatura é escolhida como variável independente. Por exemplo, selecionando a temperatura com variável independente, as pressões no ponto de bolha são calculadas a cada temperatura ao longo do envelope de fases, até que o ponto crítico seja atingido. O envelope de fases é gerado por um processo no qual a estimativa inicial é resultado do cálculo anterior. Para a curva de orvalho o procedimento é semelhante.

Para determinar a variável  $\theta$ , a qual pode ser  $T$  ou  $P$ , pode-se utilizar o método de Newton no formato

$$\theta_{new} = \theta_{old} - \frac{f}{f'} \quad (3.6.41)$$

Para os pontos de bolha a função  $f$  e sua derivada são

$$f = \sum_i x_{L_i}(K_i - 1) \quad ; \quad f' = \sum_i x_{L_i} \left( \frac{dK_i}{d\theta} \right) \quad (3.6.42)$$

onde  $K_i$  é a volatilidade do componente  $i$  entre as fases gasosa e líquida.

$$K_i = \frac{x_{G_i}}{x_{L_i}} \quad (3.6.43)$$

Já, para os pontos de orvalho a função  $f$  e sua derivada  $f'$  são:

$$f = \sum_i x_{G_i} - \frac{x_{G_i}}{K_i} \quad ; \quad f' = - \sum_i \frac{x_{G_i}}{K_i^2} \left( \frac{dK_i}{d\theta} \right) \quad (3.6.44)$$

sendo a derivada  $dK_i/d\theta$  resolvida numericamente.

A determinação do envelope de fases, a partir da criação das curvas de bolha e de orvalho foi obtida com procedimento desenvolvida por Carmo RP do (2016).

### 3.6.2.2 Equilíbrio líquido-vapor

A partir do equilíbrio líquido-vapor (ELV), pode-se calcular o *flash*. O nome *flash* se origina do fato que um líquido a uma pressão igual ou maior que sua pressão no ponto de bolha, parcialmente evapora (*flashes*) quando a pressão é reduzida, produzindo um sistema de duas fases com vapor e líquido em equilíbrio

(Smith *et al.*, 2004). Para determinar a fração de gás ou líquido, assim como a composição de cada fase, algoritmos para o cálculo de flash são necessários. A seguir será apresentada a metodologia para determinar esse cálculo.

Inicialmente, considera-se a existência de uma mistura de  $N_c$  componentes com uma composição global  $z$ , onde a fração molar das fases líquida e gasosa são denominadas  $\chi_L$  e  $\chi_G$ , respectivamente. Do ponto de vista termodinâmico, para haver condição de equilíbrio, é necessário que o potencial químico  $\mu_i^k$  para cada componente seja o mesmo em ambas as fases (Michelsen, 1982; Smith *et al.*, 2004), i.e.,  $\mu_i^L = \mu_i^G$ ,  $i = 1, 2, \dots, N_c$ . A igualdade do potencial químico no equilíbrio termodinâmico de uma mistura gás-líquido implica em igualdade das fugacidades do gás e do líquido para cada componente. Trabalhar com a fugacidade pode ser mais simples do que trabalhar com o potencial químico. Fugacidade é uma pressão termodinâmica, mas não tem significado físico estrito e pode ser refletido como uma “tendência de fuga”, ou seja, o quanto se afasta da condição de gás ideal (Smith *et al.*, 2004). No equilíbrio, tem-se:

$$f_{L_i} = f_{G_i}, \quad i = 1, 2, \dots, N_c \quad (3.6.45)$$

onde  $f_{G_i}$  é a fugacidade do componente  $i$  na fase gasosa,  $f_{L_i}$  é a fugacidade do componente  $i$  na fase líquida.

A fugacidade pode ser determinada em função da pressão e do coeficiente de fugacidade de cada componente de cada da fase  $k$ ,  $\phi_i^k$  (Eq. (3.6.40), sendo definida por

$$f_{k_i} = x_{k_i} \phi_{k_i} P, \quad i = 1, 2, \dots, N_c \quad (3.6.46)$$

onde  $x_{k_i}$  é a fração molar do componente  $i$  na fase  $k$ ,  $\phi_{k_i}$  é o coeficiente de fugacidade da fase  $k$  e  $P$  é a pressão do sistema. Os coeficientes de fugacidade  $\phi_{G_i}$  e  $\phi_{L_i}$  podem ser calculados em função da equação de estado como indicado na seção 3.6.1.3.

Combinando as equações (3.6.45) e (3.6.46), obtém-se que para cada componente  $i$ , a volatilidade de fases,  $K_i$  é igual a razão da frações molares da fase gás pela líquida, que também deve ser igual a razão do inverso dos coeficientes de fugacidade das fases.

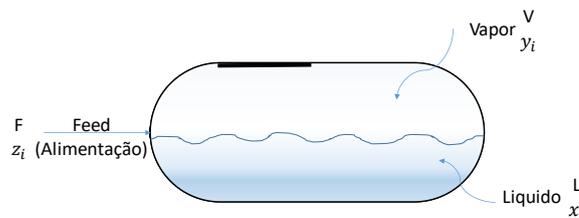
$$K_i = \frac{x_{G_i}}{x_{L_i}} = \frac{\phi_{L_i}}{\phi_{G_i}} \quad (3.6.47)$$

sendo utilizada como base para o cálculo do equilíbrio líquido-vapor. Note que a equação resultante é não linear, pois o coeficiente de fugacidade depende das frações molares. Logo, para determinar as frações molares, torna-se necessário utilizar um procedimento iterativo.

Considere um simples processo, no qual uma alimentação (*feed*) é separada em fase gasosa e fase líquida com as fases indo para equilíbrio, como apresentado na Figura 3.4. Logo, como indicado na seção 3.1, um balanço material por componente pode ser escrito como:

$$z_i = x_{iG} \chi_G + x_{iL} \chi_L ; i = 1, N_c \quad (3.6.48)$$

onde  $x_{ik}$ , é composição da espécie  $i$  numa fase  $k$ , i.e., é a razão da quantidade de matéria da espécie  $i$  na fase  $k$ , pela quantidade total de matéria da fase  $k$ , Eq. (3.1.2).  $\chi_G$  e  $\chi_L$  são conhecidas como razão de vapor e *feed* e razão de líquido e *feed*, respectivamente, e correspondem a fração molar de cada uma das fases, Eq. (3.1.5) e  $N_c$  é o número de componentes.



**Figura 3.4 – Equilíbrio líquido-vapor (adaptado de Smith, 2005)**

Rescrevendo a Eq. (3.6.47), pode-se relacionar as composições do componente  $i$  em cada fase com o coeficiente  $K_i$ :

$$x_{iG} = K_i x_{iL} \quad (3.6.49)$$

Combinando as equações (3.6.48) e (3.6.49), pode-se obter as composições molares em função da composição do fluido  $z_i$ .

$$x_{Li} = \frac{z_i}{1 - \chi_G + \chi_G K_i} \quad (3.6.50)$$

$$x_{Gi} = \frac{K_i z_i}{1 - \chi_G + \chi_G K_i} \quad (3.6.51)$$

Deseja-se determinar  $\chi_G$  tal que satisfaça as equações acima, porém garantindo as seguintes restrições

$$\sum_{i=1}^{N_c} z_i = \sum_{i=1}^{N_c} x_{Gi} = \sum_{i=1}^{N_c} x_{Li} = 1 \quad (3.6.52)$$

Rachford e Rice (1952) apresentaram uma forma muito eficiente de resolver este problema, sugerindo combinar a restrição para a fase gás com a da fase líquida, como:

$$\sum_{i=1}^{N_c} (x_{Gi} - x_{Li}) = 0 \quad (3.6.53)$$

Ao introduzir a definição das composições molares de cada fase, em função da fração molar de gás, Eqs. (3.6.50) e (3.6.51), na Eq. (3.6.53), obtém-se a equação denominada de função de Rachford-Rice (RR) para determinar  $\chi_G$ , a qual é dada por:

$$F(\chi_G) = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{z_i(K_i - 1)}{1 + \chi_G(K_i - 1)} = 0 \quad (3.6.54)$$

Esta equação é altamente não linear e difícil de convergir, precisando de diferentes estratégias para auxiliar na convergência.

Para facilitar a solução desta equação, Nichita e Leibovici (2013) sugeriram uma primeira mudança de variáveis, antes utilizada por Muskat *et al.* (1949).

$$c_i = \frac{1}{K_i - 1} \quad (3.6.55)$$

Permitindo rescrever a função “alvo” ou função de RR como

$$F(\chi_G) = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{z_i}{c_i + \chi_G} = 0 \quad (3.6.56)$$

A função de RR é monotonicamente decrescente, já que  $F'(\chi_G) < 0$  para  $\chi_G \in R$ , com  $N_c$  assíntotas verticais em  $\chi_{Gi}^{as} = c_i = 1/(1 - K_i)$ ;  $i = 1, N_c$ .

Definindo  $K_1 = \max(K_i)$  e  $K_n = \min(K_i)$ , tem-se que a raiz de interesse está localizada na janela de *flash* negativo,  $\chi_G \in (c_1, c_n)$ , ou seja, o domínio matemático de solução inclui o domínio físico  $\chi_G \in (0,1)$ . Utilizando os valores limites da função  $c_i$ , introduz-se uma nova mudança de variáveis

$$a = \frac{\chi_G - c_1}{c_n - \chi_G} \rightarrow \chi_G = \frac{c_1 + ac_n}{1 + a} \quad (3.6.57)$$

O que permite rescrever a função alvo como

$$F(a) = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{z_i a}{d_i + a(1 + d_i)} = 0 \quad (3.6.58)$$

onde

$$d_i = \frac{c_1 - c_i}{(c_n - c_1)} ; i = 2, n - 1 \quad (d_1 = 0; d_{nc} = -1) \quad (3.6.59)$$

Para resolver a equação de Rachford-Rice, Eq.(3.6.58), é utilizado o método de substituição sucessiva combinada com o método de Newton.

$$F(a) = 0 = F(a^*) + (a - a^*) F'(a^*) + \dots \rightarrow a = a^* - \epsilon ; \epsilon = \frac{F(a^*)}{F'(a^*)} \quad (3.6.60)$$

onde

$$F'(a) = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{z_i d_i}{[d_i + a(1 + d_i)]^2} = 0 \quad (3.6.61)$$

No entanto, como a derivada de primeira ordem de  $F$  não é sempre monotônica, desde  $d_i > 0$  se  $K_i > 1$  e  $d_i < 0$  se  $K_i < 1$ ; isto pode exibir um máximo em  $a \in (\max a_i^{as}, +\infty)$  que pode ocorrer para  $a > 0$ .

Como o método de Newton depende muito da inicialização, em muitos casos, o método de Newton não pode ser utilizado sem controle. ( $F$  não é convexa nem monotônica), assim, duas funções convexas foram sugeridas por Nichita e Leibovici (2013).

O algoritmo utilizado é baseado em pares de funções convexas ( $G$  e  $H$ ). A função  $G(a)$  é obtida ao se multiplicar a função  $F(a)$  por  $(1 + a)/a$  e a função  $H(a)$  é obtida ao se multiplicar  $G(a)$  por  $a$ .

$$G(a) = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{z_i(1 + a)}{d_i + a(1 + d_i)} = 0 \rightarrow a = a^* - \epsilon ; \epsilon = \frac{G(a^*)}{G'(a^*)} \quad (3.6.62)$$

$$H(a) = - \sum_{i=1}^{N_c} \frac{z_i a(1 + a)}{d_i + a(1 + d_i)} = 0 \rightarrow a = a^* - \epsilon ; \epsilon = \frac{H(a^*)}{H'(a^*)} \quad (3.6.63)$$

O método de Newton é utilizado para resolver tanto  $G(a)$  para qualquer valor inicial  $a_0 \in [a_L, a^*]$  ou  $H(a)$  para qualquer valor inicial  $a_0 \in [a^*, a_R]$ , onde  $a^*$  é a

solução.

O valor inicial  $a_0$  utilizado foi proposto por Nichita e Leibovici (2013) foi:

$$a_0 = \frac{a_L - F(a_L)}{m} \quad (3.6.64)$$

onde  $m$  é a inclinação da aproximação linear.

$$m = \frac{F(a_R) - F(a_L)}{a_R - a_L} \quad (3.6.65)$$

e os limites  $a_L$  e  $a_R$  são definidos como:

$$a_L = \frac{z_1}{1 - z_1} \quad ; \quad a_R = \frac{1 - z_n}{z_n} \quad (3.6.66)$$

A seguir, é apresentado o passo-a-passo do algoritmo de resolução do cálculo da fração molar de gás  $\chi_G$  e composição das fases gasosa e líquida, e na Figura 3.5 um fluxograma em blocos, do procedimento desenvolvido neste trabalho, para facilitar a compreensão:

- (1) Estima as constantes de equilíbrio  $K_i$  com a equação de Wilson (Smith *et al.*, 2004)

$$K_i = \exp \left\{ \ln \left[ \frac{P_{c_i}}{P} + 5,373(1 + \omega_i) \left( 1 - \frac{T_{c_i}}{T} \right) \right] \right\} \quad (3.6.67)$$

- (2) Define o componente mais leve e mais pesado em relação ao valor de  $K_i$ :

$$K_i = K_{max} ; i = \text{componente mais leve}$$

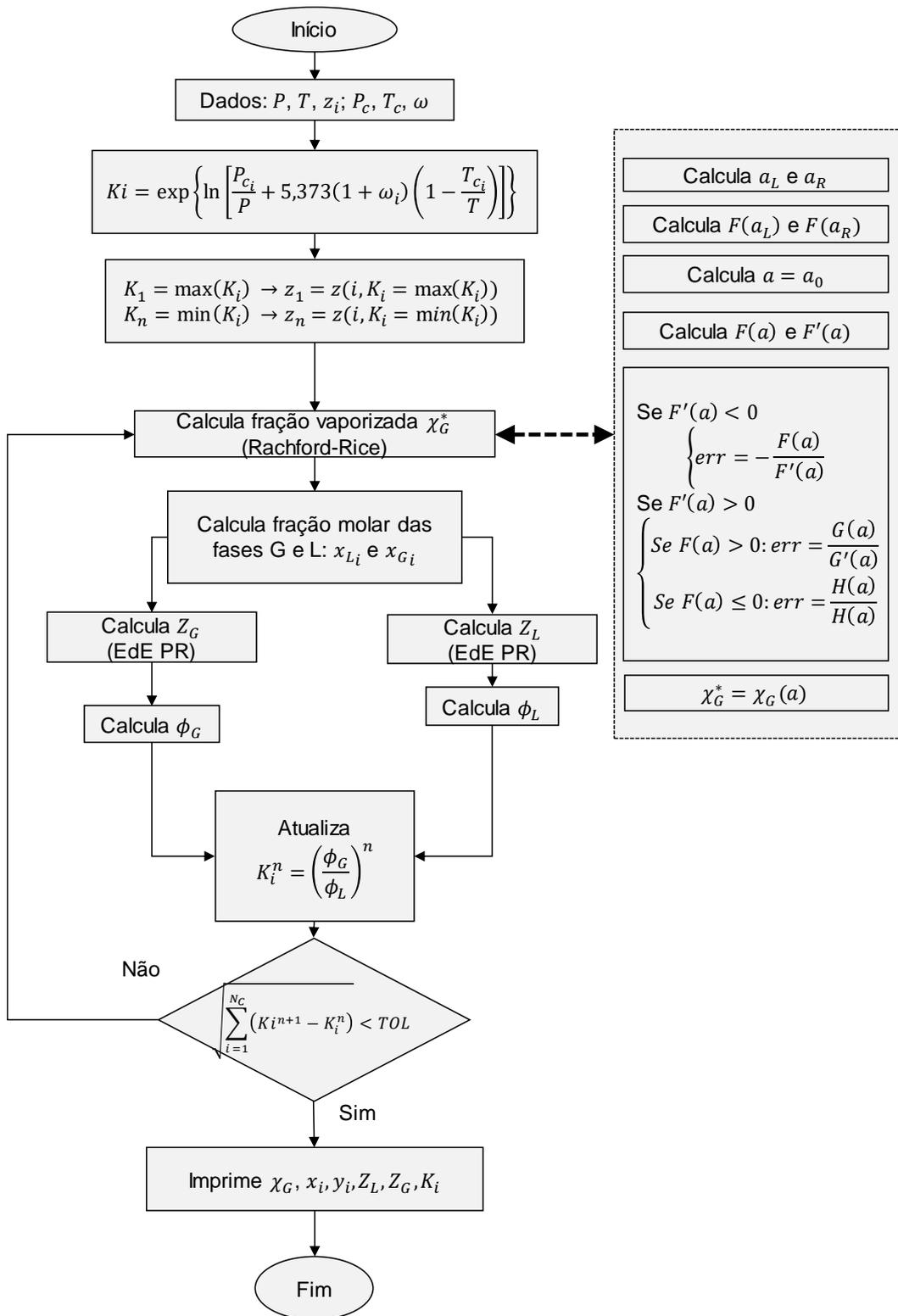
$$K_i = K_{min} ; i = \text{componente mais pesado}$$

- (3) Entra no loop interno para cálculo do  $\chi_G$

- I. Calcular a janela de solução  $a_L$  e  $a_R$  conforme Nichita e Leibovici (2013)
- II. Calcular  $F(a_L)$  e  $F(a_R)$  utilizando a equação (3.6.58)
- III. Calcula o valor inicial  $a = a_0$  com as equações (3.6.64) e (3.6.65)
- IV. Calcula  $F(a)$  e  $F'(a)$ 
  - a. Se  $F'(a) < 0$ , correção é  $\epsilon = -\frac{F(a_k)}{F'(a_k)}$
  - b. Se  $F'(a) > 0$ , verifica sinal da função  $F(a)$ :

$$\begin{cases} \text{Se } F(a) > 0 \rightarrow \epsilon = -\frac{G(a_k)}{G'(a_k)} \\ \text{Se } F(a) \leq 0 \rightarrow \epsilon = -\frac{H(a_k)}{H'(a_k)} \end{cases}$$

- V. Atualiza o valor de  $a$ :  $a_{k+1} = a_k - \epsilon$  e volta para o passo IV
- VI. Verifica a convergência, se erro relativo  $\epsilon$  for menor que uma certa tolerância, calcula  $\chi_G^* = \chi_G(a^*)$  e sai do loop interno.
- (4) Calcula as composições das fases  $x_{G_i}$  e  $x_{L_i}$
- (5) Calcula os coeficientes de fugacidade  $\phi_{G_i}$  e  $\phi_{L_i}$
- (6) Atualiza a constante  $K_i^{k+1} = \phi_{L_i}/\phi_{G_i}$
- (7) Verifica o erro  $\epsilon = \sqrt{\sum_i (K_i^k - K_i^{k+1})^2}$ , se for menor que a tolerância, solução encontrada, se não, volta para o passo (3).



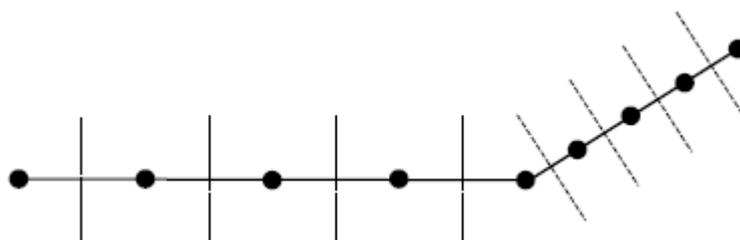
PUC-Rio - Certificação Digital Nº 1612786/CA

Figura 3.5 – Fluxograma do FlashPR [Fonte: autoria própria]

## 4 MÉTODO NUMÉRICO

No presente trabalho, introduziu-se a modelagem de escoamento bifásico em um código desenvolvido pelo Grupo de Dinâmica dos Fluidos Computacional do Departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio. A seguir, uma breve descrição da modelagem numérica é apresentada. Maiores informações podem ser obtidas nos trabalhos de Camargo, R., *et al.* (2011) e Gonçalves, Camargo, *et al.* (2012) e na dissertação de Tolmasquim (2004).

O domínio computacional é subdividido em elementos. Cada elemento pode ter características diferentes ao longo da tubulação; como, por exemplo, diâmetro, espessura da parede, inclinação em relação ao eixo horizontal, material da tubulação condições ambientais externas. Estes elementos são subdivididos em volumes de controle, com um ponto nodal principal designado no seu interior e com as faces a meia distância entre os pontos nodais, conforme ilustrado de forma esquemática na Figura 4.1.



**Figura 4.1 – Distribuição dos elementos e volumes de controle**

Na abordagem apresentada, as velocidades, temperaturas e frações volumétricas são armazenadas nas faces dos volumes de controle, enquanto que as pressões nos pontos nodais principais, no interior do volume. Utiliza-se uma malha concentrada ao redor do *pig/plug*, para prever com maior precisão o seu deslocamento.

Para a solução numérica das equações de conservação, foi utilizado o método das diferenças finitas. As equações discretizadas são aproximações das equações diferenciais nos pontos onde as variáveis de interesse são armazenadas. Para a discretização das variações espaciais, aplicou-se esquema de diferenças centrais, e, para tratar as derivadas temporais, utilizou-se o procedimento Euler implícito de 1ª ordem (Patankar, 1980).

Devido ao deslocamento do *pig/plug* ao longo da tubulação, utiliza-se um

sistema de coordenada móvel centrado na posição do *pig/plug*. A medida que o *pig/plug* se desloca, avalia-se a necessidade de migração de pontos de montante para jusante do *pig/plug*, de forma a garantir uma distribuição aproximadamente uniforme nos dois lados do *pig/plug*.

#### 4.1 Sistema de Coordenadas Móvel

Devido ao movimento da malha, as equações de conservação precisam ser reescritas no sistema de coordenadas móveis  $(\eta, T)$ . A posição do *pig/plug* é coincidente com uma face do volume de controle. Seu comprimento não é modelado. O sistema de coordenadas móvel acompanha o deslocamento do *pig/plug* a cada instante de tempo, ou seja,

$$s = s(\eta, t) \quad (4.1.1)$$

onde  $(\eta, t)$  são as coordenadas computacionais. Para um observador localizado sobre a malha, tem-se que a derivada material da coordenada  $\eta$  deve ser nula, i.e.

$$\frac{d\eta}{dt} = \frac{\partial \eta}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial \eta}{\partial t} = 0 \quad (4.1.2)$$

Porém,  $t = t$ ,  $h_\eta = \partial s / \partial \eta$  é a métrica (relação entre a variação da posição física e posição numérica) e a velocidade da malha é descrita como

$$V_{grid} = \left. \frac{\partial s(\eta, t)}{\partial t} \right|_\eta \quad (4.1.3)$$

logo

$$\left. \frac{\partial \eta}{\partial t} \right|_\eta = -\frac{V_{grid}}{h_\eta} \quad (4.1.4)$$

As equações de conservação apresentadas no Capítulo 3 dependem da derivada material, reescrita aqui, por conveniência

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + u_m \frac{\partial \phi}{\partial s} \quad (4.1.5)$$

Esta derivada precisa ser reescrita no novo sistema de coordenadas móvel, e para isso, emprega-se a regra da cadeia, onde  $t = t$  e  $h_\eta = \partial s / \partial \eta$  é a métrica, logo

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} \Big|_{\eta} + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial t} = -\frac{V_{grid}}{h_{\eta}} \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\partial}{\partial t} \quad (4.1.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial s} = \frac{1}{h_{\eta}} \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (4.1.7)$$

resultando em

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\tilde{V}}{h_{\eta}} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \quad (4.1.8)$$

onde  $\tilde{V}$  é a velocidade relativa

$$\tilde{V} = u_m - V_{grid} \quad (4.1.9)$$

## 4.2 Solução do Sistema Algébrico

O conjunto de equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear e energia podem ser escritos como

$$\left( \frac{\partial P}{\partial t} - \xi \beta_m \frac{\partial T}{\partial t} \right) + \tilde{V} \left( \frac{\partial P}{\partial s} - \xi \beta_m \frac{\partial T}{\partial s} \right) = -\xi \left[ \frac{\partial u_m}{\partial s} + \frac{u_m}{A} \frac{\partial A}{\partial s} + \frac{(\rho_G - \rho_L) D \alpha_G}{\rho_m} \frac{D \alpha_G}{Dt} \right] \quad (4.2.1)$$

$$\frac{\partial u_m}{\partial t} + \tilde{V} \frac{\partial u_m}{\partial s} = - \left[ \frac{1}{\rho_m} \frac{\partial P}{\partial s} + g \text{sen } \theta + \frac{1}{2} \frac{f |u_m| u_m}{D} + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial s} \left( \alpha_L \alpha_G \frac{\rho_L \rho_G}{\rho_m^2} u_r^2 A \right) \right] \quad (4.2.2)$$

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\hat{\beta} T}{\rho_m c p_m} \frac{\partial P}{\partial t} \right) + \tilde{V} \left( \frac{\partial T}{\partial s} - \frac{\hat{\beta} T}{\rho_m c p_m} \frac{\partial P}{\partial s} \right) \\ = \frac{4U}{\rho_m c p_m D} (T_{\infty} - T) + \frac{1}{2} \frac{f |u_m| u_m^2}{c p_m D} - \frac{\lambda}{c p_m} \frac{D \chi_G}{Dt} \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

Estas equações são acopladas com a equação de balanço de força no pig/plug, considerando  $u_m = V_{pig}$

$$\frac{dV_p}{dt} = (P_1 - P_2) \frac{A}{m_p} - g \text{sen } \theta - \frac{F_{at}(V_p)}{m_p} \quad (4.2.4)$$

Para determinar o campo de velocidade, pressão e temperatura de forma acoplada, pode-se criar um vetor incógnita

$$\Phi = \begin{pmatrix} P \\ u_m \\ T \end{pmatrix} \quad (4.2.5)$$

e reescrever o conjunto de equações de conservação na forma vetorial como

$$\mathbf{M} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \tilde{v} \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right) = \mathbf{S} \mathbf{c} + \mathbf{S} \mathbf{p} \Phi \quad (4.2.6)$$

onde

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\xi \beta_m \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{\hat{\beta} T}{\rho_m c p_m} & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.2.7)$$

$$\mathbf{S} \mathbf{c} = \begin{pmatrix} -\xi \left[ \frac{\partial u_m}{\partial s} + \frac{u_m}{A} \frac{\partial A}{\partial s} + \frac{(\rho_G - \rho_L) D \alpha_G}{\rho_m} \frac{D \alpha_G}{Dt} \right] \\ - \left[ \frac{1}{\rho_m} \frac{\partial P}{\partial s} + g \operatorname{sen} \theta + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial s} \left( \alpha_L \alpha_G \frac{\rho_L \rho_G}{\rho_m^2} u_r^2 A \right) \right] \\ \frac{4 U T_\infty}{\rho_m c p_m D} + \frac{1}{2} \frac{f |u_m| u_m^2}{c p_m D} - \frac{\lambda}{c p_m} \frac{D \chi_G}{Dt} \end{pmatrix} \quad (4.2.8)$$

$$\mathbf{S} \mathbf{p} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{1}{2} \frac{f |u_m|}{D} \\ \frac{4 U}{\rho_m c p_m D} \end{pmatrix} \quad (4.2.9)$$

O sistema algébrico resultante é hepta-diagonal, sendo resolvido por um algoritmo direto hepta-diagonal desenvolvido de forma otimizada a partir do método de Eliminação de Gauss, análogo ao algoritmo de Thomas para matrizes tri-diagonais (Patankar, 1980).

Para cada passo de tempo, foi imposta uma tolerância máxima de  $10^{-5}$  para o resíduo máximo das equações de conservação. O passo de tempo foi controlado de forma a manter o número de Courant  $Co = u_{max} \Delta t / \Delta x = 1$ , onde a velocidade máxima possível  $u_{max}$  é baseada na velocidade do som do gás.

## 5 VALIDAÇÃO

Neste capítulo, são apresentados os testes de validação da modelagem desenvolvida. Inicialmente é apresentada a validação do modelo termodinâmico. Nesta etapa, o modelo de *Flash* implementado é avaliado, incluindo a avaliação da determinação de propriedades termodinâmicas. A seguir, apresenta-se uma validação da modelagem do escoamento, isto é, da solução acoplada das equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear e energia. Para este tipo de validação, investigou-se inicialmente um escoamento monofásico e a seguir um escoamento bifásico. O escoamento monofásico selecionado é o caso clássico de escoamento de Fanno (Fox *et al.*, 2018), i.e., um gás ideal escoando ao longo de um duto horizontal, isolado, com atrito. Este caso é especialmente interessante devido a possibilidade de comparação com a solução exata. Para o teste de escoamento bifásico, comparou-se os resultados obtidos com dados da literatura.

### 5.1 Validação do Modelo Termodinâmico

Para validar o modelo termodinâmico, baseado na equação de Peng-Robinson, comparou-se os resultados obtidos com o modelo implementado com os resultados do trabalho de Barbosa Neto (2015). Neste trabalho, apresentam-se as frações de gás e líquido, assim como a volatilidade em função de pressão e temperatura para um fluido com uma determinada composição. Os fatores de compressibilidade para ambos os fluidos também são disponibilizados na referência. Para a validação da implementação do cálculo do calor específico à pressão constante, utilizou-se duas ferramentas computacionais comerciais (HYSYS® e VRTherm®). Finalmente, é apresentada a validação da determinação da velocidade do som isotérmica  $a$ , assim como o coeficiente de expansão térmico  $\beta$ .

#### 5.1.1 Modelo *Flash*

Como descrito no Capítulo 3, foi desenvolvida uma rotina em Fortran referenciada como FLASHPR, apresentada na forma de fluxograma no item

3.6.2.2 , para o cálculo da fração molar das fases líquido e gás, onde é calculada a composição de cada uma das fases e a volatilidade  $K_i$  de cada um dos componentes para uma dada condição de pressão e temperatura.

Para validar essa rotina, foi utilizado como comparativo o resultado do trabalho de Barbosa Neto (2015), que desenvolveu um programa denominado PVTpetro para cálculo de *flash* bifásico.

O fluido utilizado possui a composição apresentada na Tabela 5.1. Os valores da composição molar dos fluidos apresentadas são referentes à condição de reservatório, na qual o fluido está na fase líquida.

**Tabela 5.1 – Composição Molar do fluido utilizado na validação do FLASHPR**

Componentes	Fração Molar(%)
CO <sub>2</sub>	0,02
N <sub>2</sub>	0,61
CH <sub>4</sub> (C <sub>1</sub> )	64,69
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (C <sub>2</sub> )	8,21
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> (C <sub>3</sub> )	4,99
i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (i-C <sub>4</sub> )	1,04
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (n-C <sub>4</sub> )	1,80
i-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> (i-C <sub>5</sub> )	0,65
n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> (n-C <sub>5</sub> )	0,75
n-C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> (C <sub>6</sub> )	1,03
n-C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> (C <sub>7</sub> )	1,09
n-C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> (C <sub>8</sub> )	1,61
n-C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> (C <sub>9</sub> )	1,41
n-C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> (C <sub>10</sub> )	1,17
n-C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> (C <sub>11</sub> )	0,99
n-C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> (C <sub>12</sub> )	0,86
n-C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> (C <sub>13</sub> )	0,91
n-C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> (C <sub>14</sub> )	0,76
n-C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> (C <sub>15</sub> )	0,71
n-C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> (C <sub>16</sub> )	0,53
n-C <sub>17</sub> H <sub>36</sub> (C <sub>17</sub> )	0,50
n-C <sub>18</sub> H <sub>38</sub> (C <sub>18</sub> )	0,49
n-C <sub>19</sub> H <sub>40</sub> (C <sub>19</sub> )	0,45
n-C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> (C <sub>20</sub> )	4,73
<b>Total</b>	<b>100,00</b>

As propriedades termodinâmicas (massa molecular  $MM$ , Temperatura Crítica –  $T_c$ , Pressão Crítica –  $P_c$ , Volume Crítico –  $V_c$ , Fator de Compressibilidade Crítico –  $Z_c$  e Fator acêntrico -  $\omega$ ) dos componentes puros presentes na composição do fluido, utilizadas nos procedimentos de cálculos realizados, são apresentadas na Tabela 5.2. É importante ressaltar que estas propriedades são provenientes do banco de dados do PVTpetro.

Tabela 5.2 – Propriedades Termodinâmicas

Componente	MM (kg/kmol)	$T_c$ (K)	$P_c$ (bar)	$V_c$ (cm <sup>3</sup> /mol)	$Z_c$	$\omega$
CO <sub>2</sub>	44,010	304,120	73,74	94,1	0,274	0,225
N <sub>2</sub>	28,014	126,200	33,98	90,1	0,289	0,037
CH <sub>4</sub> (C <sub>1</sub> )	16,043	190,560	45,99	98,6	0,286	0,011
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (C <sub>2</sub> )	30,070	305,320	48,72	145,5	0,279	0,099
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> (C <sub>3</sub> )	44,097	369,830	42,48	200,0	0,276	0,152
i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (i-C <sub>4</sub> )	58,123	407,850	36,40	262,7	0,278	0,186
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (n-C <sub>4</sub> )	58,123	425,120	37,96	255,0	0,274	0,200
i-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> (i-C <sub>5</sub> )	72,150	460,390	33,81	308,3	0,272	0,229
n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> (n-C <sub>5</sub> )	72,150	469,700	33,70	311,0	0,268	0,252
n-C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> (C <sub>6</sub> )	86,177	507,600	30,25	368,0	0,264	0,300
n-C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> (C <sub>7</sub> )	100,204	540,200	27,40	428,0	0,261	0,350
n-C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> (C <sub>8</sub> )	114,231	568,700	24,90	492,0	0,259	0,399
n-C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> (C <sub>9</sub> )	128,258	594,600	22,90	555,0	0,257	0,445
n-C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> (C <sub>10</sub> )	142,285	617,700	21,10	624,0	0,256	0,490
n-C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> (C <sub>11</sub> )	156,312	639,000	19,80	689,0	0,257	0,537
n-C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> (C <sub>12</sub> )	170,338	658,000	18,20	754,0	0,251	0,576
n-C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> (C <sub>13</sub> )	184,365	675,000	16,80	823,0	0,246	0,618
n-C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> (C <sub>14</sub> )	198,392	693,000	15,70	894,0	0,244	0,644
n-C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> (C <sub>15</sub> )	212,419	708,000	14,80	966,0	0,243	0,685
n-C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> (C <sub>16</sub> )	226,446	723,000	14,00	1034,0	0,241	0,718
n-C <sub>17</sub> H <sub>36</sub> (C <sub>17</sub> )	240,473	736,000	13,40	1103,0	0,242	0,753
n-C <sub>18</sub> H <sub>38</sub> (C <sub>18</sub> )	254,500	747,000	12,90	1189,0	0,247	0,800
n-C <sub>19</sub> H <sub>40</sub> (C <sub>19</sub> )	268,527	755,000	11,60	1130,0	0,224	0,845
n-C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> (C <sub>20</sub> )	482,000	860,042*	6,92*	1808,6*	0,175*	1,396*

\*propriedades estimadas a partir da ferramenta de caracterização do pseudo-componente disponível no PVTpetro (Barbosa Neto e Bannwart, 2016).

O fluido escolhido é composto por 24 componentes: 22 da classe de hidrocarbonetos e 2 compostos inorgânicos (CO<sub>2</sub> e N<sub>2</sub>).

Para comparar os resultados entre a rotina FLASHPR e o programa PVTpetro, fez-se necessário equiparar todas as propriedades de fluidos utilizadas no procedimento de cálculo realizado. Nesta etapa do trabalho, todos os parâmetros de interação binária ( $k_{ij}$ ) foram desconsiderados no estudo realizado com o PVTpetro, e por razão de comparação, foi adotado o mesmo procedimento.

O PVTpetro utiliza a equação de estado cúbica de Peng-Robinson com a regra de mistura clássica de Van der Waals. Para o cálculo do FLASHPR é utilizada a equação de Rachford-Rice resolvido por método de Newton com tolerância de 10<sup>-6</sup>. Na correção da volatilidade  $K_i$ , é utilizada a razão entre fugacidade vezes o valor antigo com tolerância de convergência de 10<sup>-12</sup>.

O FLASHPR utiliza a mesma equação de estado com a mesma regra de mistura. Já para o cálculo do *flash*, a equação de Rachford-Rice é calculada utilizando o algoritmo segundo Nichita e Leibovici (2013) com convergência dentro da tolerância de  $10^{-10}$ , e para a atualização do  $K_i$  é utilizada a razão entre os coeficientes de fugacidade com tolerância de  $10^{-6}$ .

Na Tabela 5.3 é apresentada a composição inicial, também conhecida como *feed*,  $z_i$ , e são comparadas a composição de líquido e de gás obtidas por cada um dos modelos (FLASHPR e PVTpetro) assim como o erro relativo entre esses para a condição de temperatura e pressão de 60°C e 150bar. Pode-se observar que erros muito pequenos ( $\varepsilon_{x_{L_i}} < 0,8\%$  e  $\varepsilon_{x_{G_i}} < 6,8\%$ ) foram obtidos. Somente o pseudo-componente C20+, que apresenta baixíssima concentração, obteve-se um desvio maior ( $\varepsilon \sim 47\%$ ).

**Tabela 5.3 – Comparação entre a composição das fases (FLASHPR e PVTpetro)**

Comp.	$z_i$ (%) (Feed)	$x_{L_i}$ (%) (FlashPR)	$x_{L_i}$ (%) (PVTpetro)	$x_{G_i}$ (%) (FlashPR)	$x_{G_i}$ (%) (PVTpetro)	Erro - $x_{L_i}$ (%)	Erro - $x_{G_i}$ (%)
CO <sub>2</sub>	0,0200	0,02029	0,02030	0,01964	0,01960	0,064%	0,215%
N <sub>2</sub>	0,6100	0,33288	0,33540	0,95558	0,95660	0,750%	0,106%
C <sub>1</sub>	64,6900	47,77316	47,98150	85,78644	85,78400	0,434%	0,003%
C <sub>2</sub>	8,2100	8,74528	8,74380	7,54247	7,53600	0,017%	0,086%
C <sub>3</sub>	4,9900	6,37016	6,35420	3,26884	3,26770	0,251%	0,035%
i-C <sub>4</sub>	1,0400	1,45439	1,44910	0,52322	0,52360	0,365%	0,072%
n-C <sub>4</sub>	1,8000	2,60251	2,59210	0,79922	0,80000	0,401%	0,097%
i-C <sub>5</sub>	0,6500	1,00051	0,99580	0,21289	0,21340	0,473%	0,239%
n-C <sub>5</sub>	0,7500	1,17312	1,16740	0,22234	0,22300	0,490%	0,294%
C <sub>6</sub>	1,0300	1,69364	1,68470	0,20240	0,20340	0,530%	0,492%
C <sub>7</sub>	1,0900	1,85081	1,84070	0,14121	0,14230	0,550%	0,764%
C <sub>8</sub>	1,6100	2,79055	2,77500	0,13777	0,13920	0,560%	1,026%
C <sub>9</sub>	1,4100	2,47670	2,46290	0,07976	0,08080	0,560%	1,290%
C <sub>10</sub>	1,1700	2,07280	2,06120	0,04414	0,04480	0,563%	1,469%
C <sub>11</sub>	0,9900	1,76448	1,75470	0,02417	0,02460	0,557%	1,743%
C <sub>12</sub>	0,8600	1,53811	1,52960	0,01436	0,01470	0,556%	2,346%
C <sub>13</sub>	0,9100	1,63135	1,62240	0,01043	0,01070	0,552%	2,521%
C <sub>14</sub>	0,7600	1,36449	1,35700	0,00616	0,00630	0,552%	2,170%
C <sub>15</sub>	0,7100	1,27618	1,26920	0,00394	0,00410	0,550%	3,944%
C <sub>16</sub>	0,5300	0,95335	0,94810	0,00205	0,00210	0,554%	2,150%
C <sub>17</sub>	0,5000	0,89985	0,89490	0,00135	0,00140	0,554%	3,233%
C <sub>18</sub>	0,4900	0,88221	0,87740	0,00088	0,00090	0,549%	1,736%
C <sub>19</sub>	0,4500	0,81032	0,80590	0,00065	0,00070	0,549%	6,733%
C <sub>20+</sub>	4,7300	8,52286	8,47660	0,00005	0,00010	0,546%	47,043%

Na Figura 5.1 é apresentado o resultado do  $K_i$  na mesma condição de  $P$  e  $T$  anteriores. É possível verificar na Figura 5.1 que os resultados do FLASHPR se aproximam do resultado do PVTpetro. Como  $K_i > 1$  para  $N_2$  e  $C_1$  esses se concentram na fase gasosa, como esperado para essa condição de operação avaliada. Os componentes mais pesados tendem a ficar na fase líquida, como apresentado pelos dados da simulação. No caso específico do  $CO_2$  o valor de  $K_i$  é muito próximo de 1, mas com uma concentração maior na fase líquida.

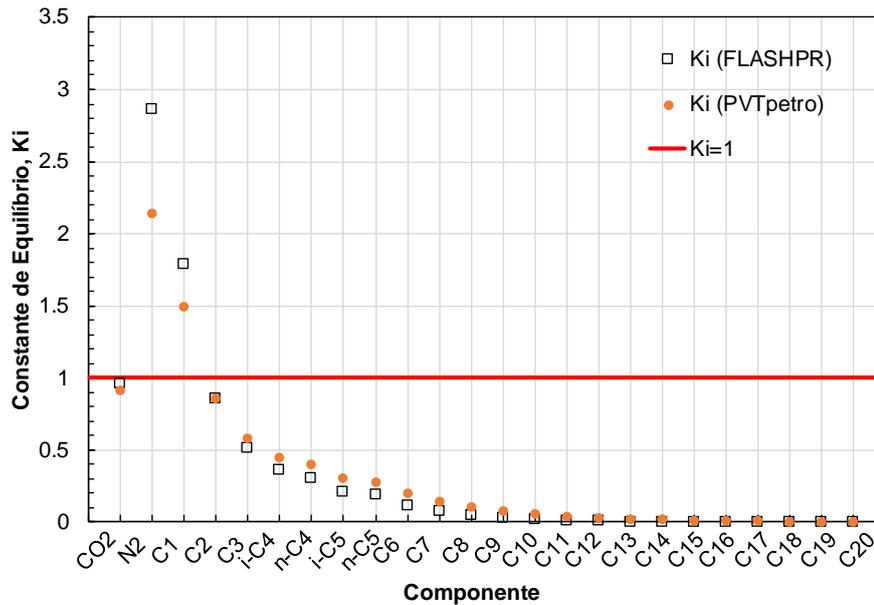


Figura 5.1 – Volatilidade a  $P=150\text{bar}$  e  $T=60^\circ\text{C}$

Na Tabela 5.4 e na Tabela 5.5, são comparados os fatores de compressibilidade  $Z_L$  e  $Z_G$  do líquido e do gás, respectivamente.

Tabela 5.4 – Fator de Compressibilidade do Líquido

P (bar)	T ( $^\circ\text{C}$ )	$Z_L$ (PVTpetro)	$Z_L$ (FLASHPR)	Erro (%)
36	30	0,3730	0,3730	2,69E-03
81		0,6439	0,6439	2,29E-03
186		0,9696	0,9697	-7,16E-03
66	60	0,5866	0,5866	-6,29E-03
131		0,8792	0,8792	-3,44E-05
241		1,1071	1,1071	-1,17E-03
21	90	0,2494	0,2495	-2,20E-02
146		0,9580	0,9580	1,56E-03
256		1,1662	1,1662	7,99E-04

Tabela 5.5 – Fator de Compressibilidade do Gás

P (bar)	T (°C)	$Z_G$ (PVTpetro)	$Z_G$ (FLASHPR)	Erro (%)
36	30	0,8982	0,8982	2,89E-03
81		0,8061	0,8061	1,70E-03
186		0,7332	0,7332	1,35E-03
66	60	0,8702	0,8702	-1,52E-03
131		0,8055	0,8055	4,49E-03
241		0,8168	0,8169	-7,18E-03
21	90	0,9580	0,9580	-4,18E-03
146		0,8435	0,8435	1,73E-03
256		0,8678	0,8679	-6,38E-03

É possível verificar que  $Z_L$  está com erros abaixo de 2,3% e  $Z_G$ , abaixo de 0,72%.

A Figura 5.2 apresenta as curvas de fração vaporizada e condensada por pressão para duas isotermas (333,15K e 363,15K). Já a Figura 5.3 apresenta o envelope de fase do presente caso.

Avaliando da maior pressão para a menor, é possível observar que se inicia com apenas a fase líquida. Quando a pressão diminui de 250 bar para a isoterma 333,15K e de 280 bar da isoterma 363,15K é observada a formação da fase vapor, e caracterizada a região bifásica. Quanto menor a pressão, neste caso, maior a fração de gás, chegando a no máximo aproximadamente 85% de gás a 333,15K e 1 bar e 87% a 363,15K e 1 bar. Os resultados deste trabalho foram comparados com o programa PVTpetro adotando-se a mesma equação de estado de Peng-Robinson, apresentando uma boa concordância entre as soluções para toda a faixa de pressão avaliada.

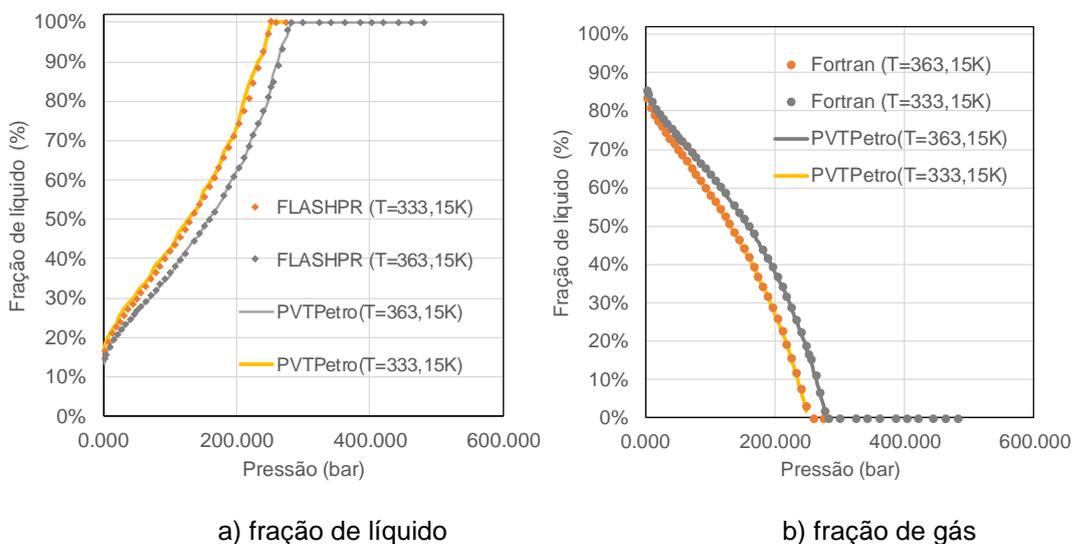
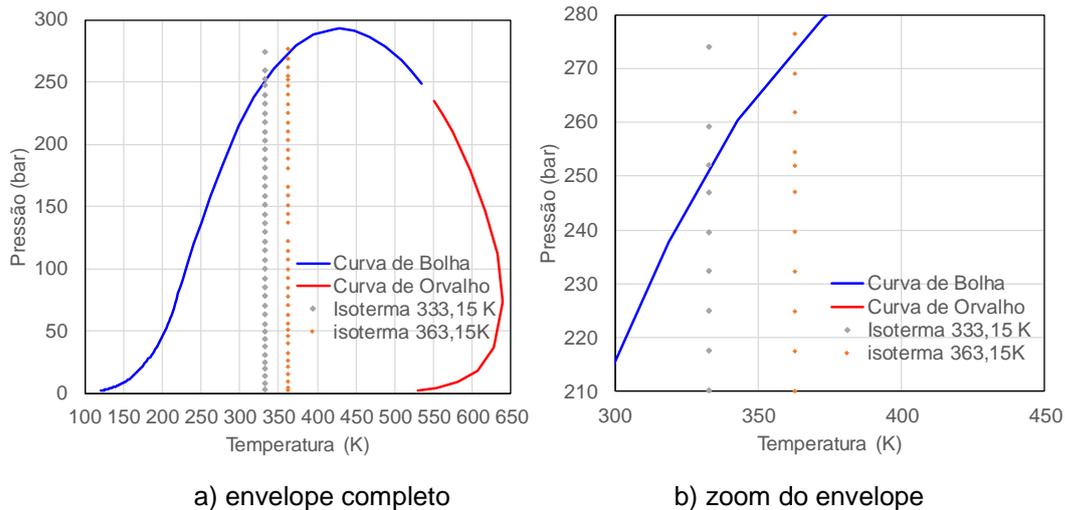


Figura 5.2 – Fração molar a P=150bar e T=60°C a) fração de líquido b) fração de gás



**Figura 5.3 – Envelope de Fases e Pontos testados: a) Envelope completo b) zoom na região de mudança de fases**

### 5.1.2 Cálculo do calor específico

Para a validação do calor específico ( $c_p$ ) foram utilizadas as ferramentas computacionais HYSYS® e VRTherm®.

Primeiramente, foi avaliado o cálculo do  $c_p$  de gás ideal com o VRTherm® utilizando a modelo de gás ideal. Posteriormente, foi avaliado com o modelo de Peng-Robinson do VRTherm® o  $c_p$  total, e para determinar o  $c_p$  residual, foi subtraído o resultado do  $c_p$  calculado por Peng-Robinson do  $c_p$  calculado para gás ideal. Foi analisado também o valor do  $c_p$  calculado pelo HYSYS utilizando o modelo de Peng-Robinson.

No programa desenvolvido o  $c_p$  de gás ideal é calculado utilizando a equação empírica do item 3.6.1.2, e o  $c_p$  residual, calculado utilizando a equação de estado de Peng-Robinson. Calculou-se o  $c_p$  para três temperaturas e três pressões diferentes, considerando três misturas distintas: Fluido A, B e C conforme Tabela 5.6.

**Tabela 5.6 – Composição para validar  $c_p$**

Componente	Sigla	Fluido A (%)	Fluido B (%)	Fluido C (%)
Metano	C <sub>1</sub>	10	100	88,73
Etano	C <sub>2</sub>	-	-	7,10
Propano	C <sub>3</sub>	-	-	1,31
Isobutano	iC <sub>4</sub>	-	-	0,29
N-Bbutano	nC <sub>4</sub>	-	-	0,34
Isopentano	iC <sub>5</sub>	-	-	0,17

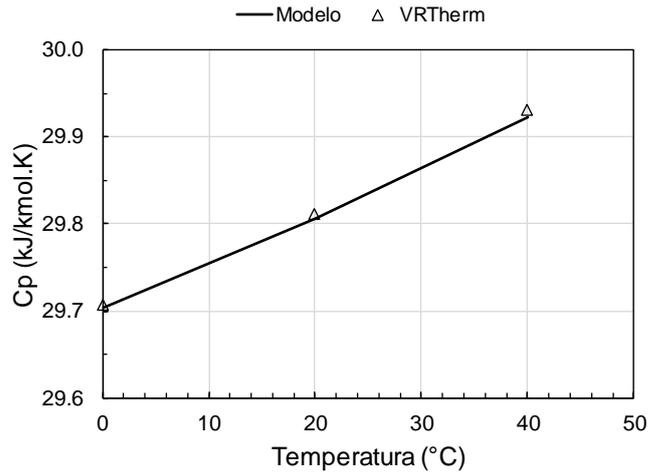
Componente	Sigla	Fluido A (%)	Fluido B (%)	Fluido C (%)
<b>N-pentano</b>	nC <sub>5</sub>	-	-	0,10
<b>Hexano</b>	C <sub>6</sub>	-	-	0,22
<b>Heptano</b>	C <sub>7</sub>	-	-	0,14
<b>Dióxido de carbono</b>	CO <sub>2</sub>	-	-	0,09
<b>Nitrogênio</b>	N <sub>2</sub>	70	-	1,51
<b>Oxigênio</b>	O <sub>2</sub>	20	-	-

Da Figura 5.4 à Figura 5.6, são apresentados o calor específico à pressão constante (de gás ideal, residual e total) para cada um dos fluidos da Tabela 5.6. Já a Tabela 5.7 apresenta o desvio máximo entre as previsões das diferentes ferramentas numéricas.

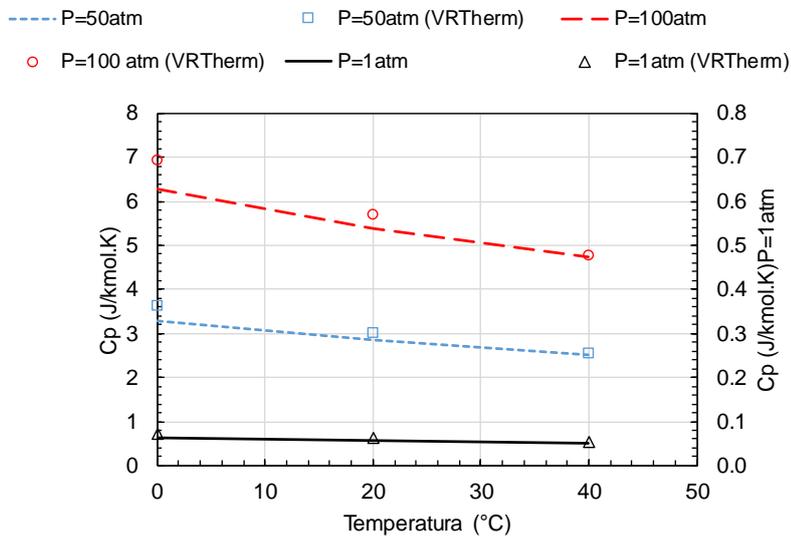
**Tabela 5.7 – Comparação do calor específico. Modelo atual vs VRtherm® e Hysys®**

Mistura	Diferença (%)			
	VRTherm®			Hysys®
	Cp ideal	Cp residual	Cp total	Cp total
<b>Fluido A (%)</b>	0,03	10,00	1,78	1,48
<b>Fluido B (%)</b>	1,19	10,20	4,30	3,29
<b>Fluido C (%)</b>	1,05	11,48	5,53	4,09

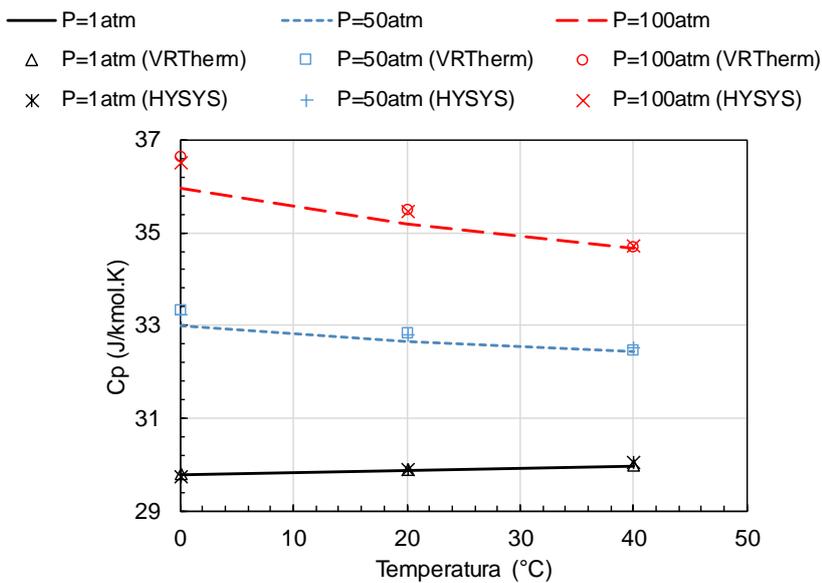
Analisando os resultados para os três fluidos, Figura 5.4, Figura 5.5 e Figura 5.6, observa-se uma excelente concordância para o calor específico de gás ideal. Para todos os casos observa-se um desvio maior na determinação do calor específico residual, o qual, porém influencia muito pouco na determinação do calor específico total que apresenta boa concordância entre as previsões. Observou-se que os maiores desvios para o calor específico residual ocorreram para temperatura de 0°C. Porém, para o fluido A o maior desvio ocorreu a 1 bar enquanto para os outros dois fluidos ocorreu a 100 bar. O par pressão e temperatura correspondente aos maiores desvios é o mesmo, tanto para o calor específico total quanto para o calor específico residual, pois o desvio para esta variável é bem maior do que para o calor específico de gás ideal.



(a) Cp de Gás ideal. Comparação Modelo atual versus VRTherm

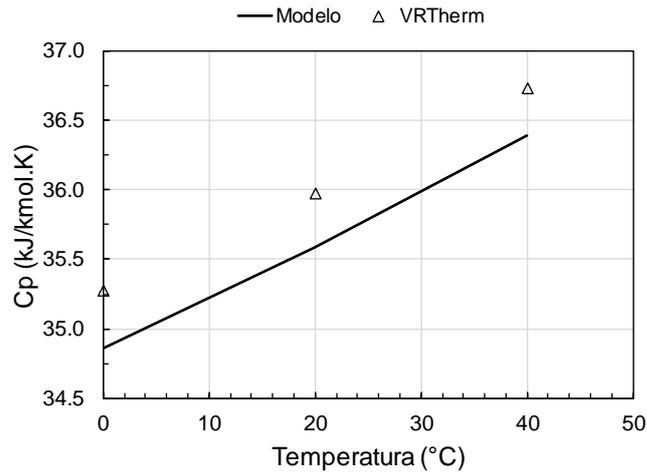


(b) Cp residual. Comparação Modelo atual versus VRTherm

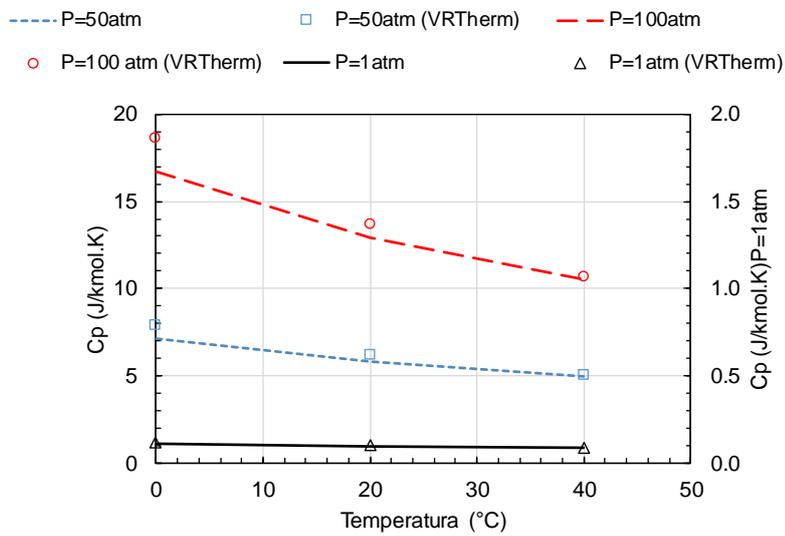


(c) Cp total. Comparação Modelo atual versus VRTherm e versus Hysys

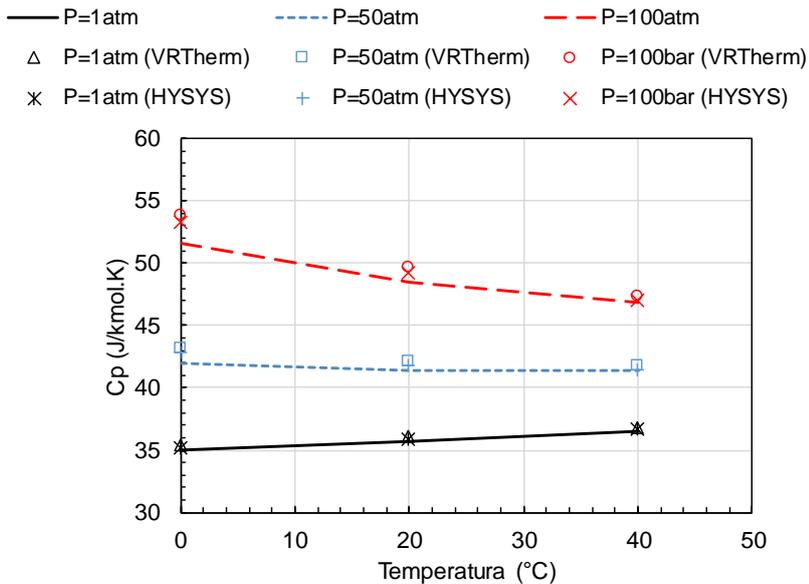
**Figura 5.4 – Comparação do calor específico– Fluido A**



(a) Cp de Gás ideal. Comparação Modelo atual versus VRTherm

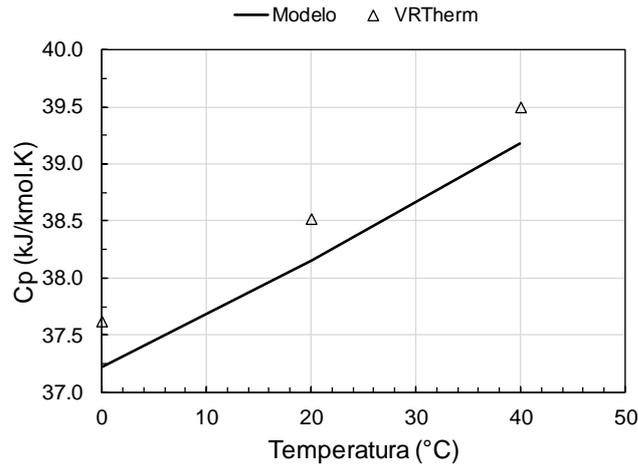


(b) Cp de residual. Comparação Modelo atual versus VRTherm

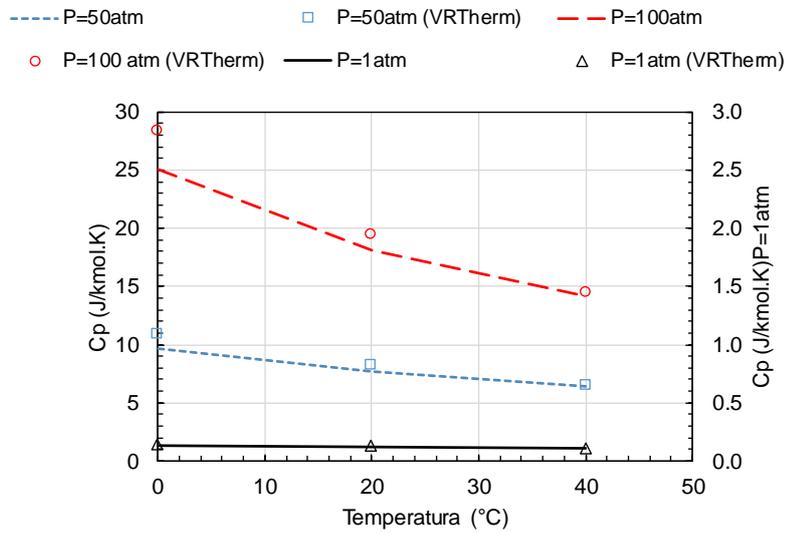


(c) Cp total. Comparação Modelo atual versus VRTherm e versus Hysys

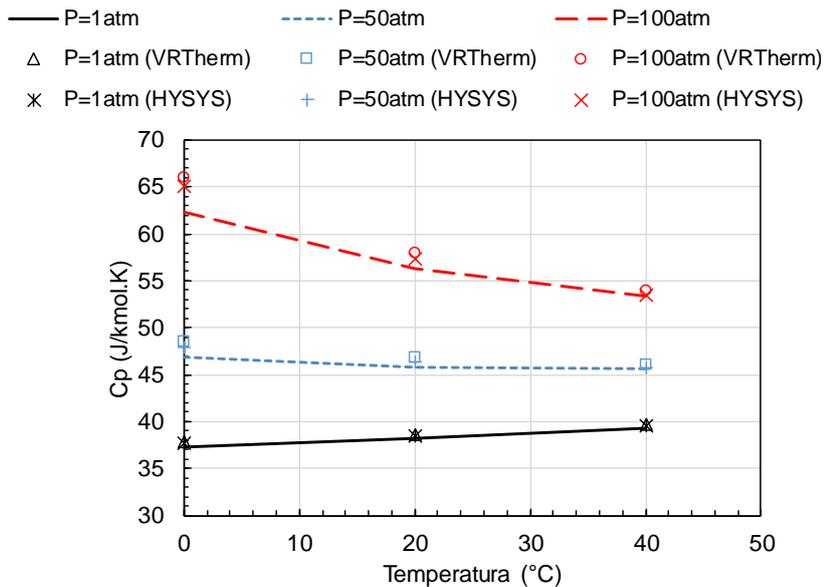
**Figura 5.5 – Comparação do calor específico – Fluido B**



(a) Cp de Gás ideal. Comparação Modelo atual versus VRTherm



(b) Cp de residual. Comparação Modelo atual versus VRTherm



(c) Cp total. Comparação Modelo atual versus VRTherm e versus Hysys

**Figura 5.6 – Comparação do calor específico – Fluido C**

### 5.1.3 Velocidade do som isotérmica e coeficiente de expansão térmica

Como mostrado no Capítulo 3 de modelagem matemática, a velocidade do som isotérmica  $a$ , assim como o coeficiente de expansão térmica  $\beta$  são necessários para avaliação do escoamento. Estas duas grandezas dependem da variação do coeficiente de compressibilidade  $Z$  com pressão e temperatura. Como estas grandezas não se encontram disponíveis nos *softwares* comerciais, adotou-se um procedimento aproximado para estimar essas grandezas, visando avaliar se a tendência e ordem de grandeza destas foi determinada de forma razoável pelo modelo atual.

Para isso, selecionou-se a correlação empírica da *California Natural Gas Association* – CNGA (Ren *et al.*, 2012) para o fator de compressibilidade, a qual é muito utilizada na indústria de óleo e gás para o gás natural.

$$Z_{CNGA} = \frac{1}{Y} \quad ; \quad Y = 1 + \frac{344000 P \times 10^{1,785 \times SG}}{T^{3,825}} \quad (5.1.1)$$

onde  $P$  é a pressão em psi,  $SG$  é a densidade relativa do fluido em relação ao ar seco, que é calculada como a massa molar do fluido dividida pela massa molecular do gás segundo a ABNT NBR 15213:2008 que é de 28,9626 kg/kmol,  $T$  é a temperatura em Rankine, e  $Z$  é o fator de compressibilidade.

A velocidade do som deve ser obtida a partir da variação de  $Z$  com a pressão

$$a_{CNGA}^2 = \frac{Z_{CNGA} R T}{1 - \left(\frac{P}{Z} \frac{dZ}{dP}\right)_{CNGA}} \quad ; \quad \left(\frac{P}{Z} \frac{dZ}{dP}\right)_{CNGA} = -(1 - Z_{CNGA}) \quad (5.1.2)$$

Já o coeficiente de expansão térmica depende da variação com a temperatura

$$\beta_{CNGA} = \frac{1}{T} \left[ 1 + \left(\frac{T}{Z} \frac{dZ}{dT}\right)_{CNGA} \right] \quad ; \quad \left(\frac{T}{Z} \frac{dZ}{dT}\right)_{CNGA} = 3,825 (1 - Z_{CNGA}) \quad (5.1.3)$$

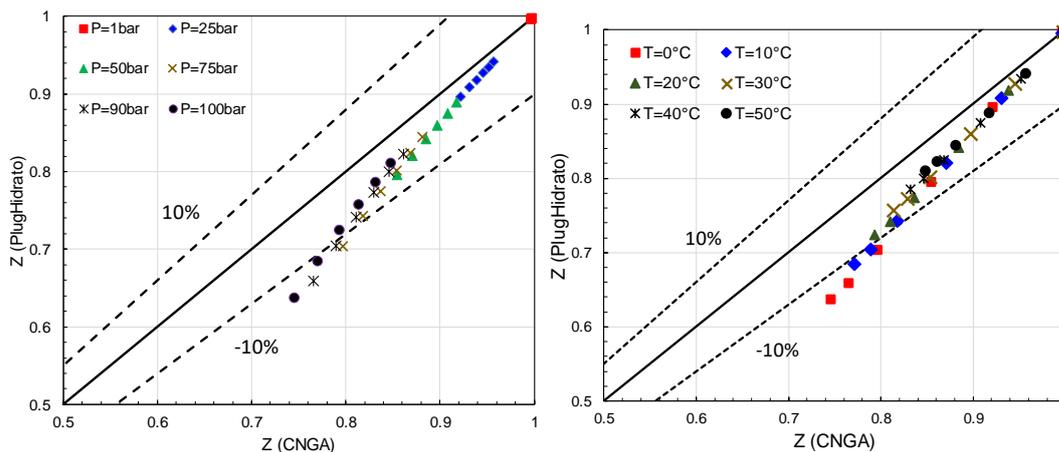
Na Tabela 5.4 e Tabela 5.5, apresentou-se uma excelente concordância entre o fator de compressibilidade calculado com o Modelo atual e os dados do PVT Petro, com diferenças percentuais muito pequenas. Aqui, compara-se os dados do Modelo atual,  $Z_{PH}$ , com a correlação aproximada do CNGA,  $Z_{CNGA}$ , na Figura 5.7, mantendo a pressão constante e variando a temperatura e invertendo essa combinação. Para esta validação, foi selecionado o produto com a composição descrita na Tabela 5.8. Selecionou-se uma combinação de seis

pressões (1, 25, 50, 75, 90 e 100 bar) e temperaturas (0, 10, 20, 30, 40 e 50°C) diferentes de forma a se ter um espectro amplo para comparação.

**Tabela 5.8 – Composição para validar equação de estado**

Componente	Sigla	Porcentagem (%)
Metano	C1	88,73
Etano	C2	7,10
Propano	C3	1,31
Isobutano	iC4	0,29
N-butano	nC4	0,34
Isopentano	ic5	0,17
N-pentano	nC5	0,10
Hexano	C6	0,22
Heptano	C7	0,14
Dióxido de carbono	CO2	0,09
Nitrogênio	N2	1,51

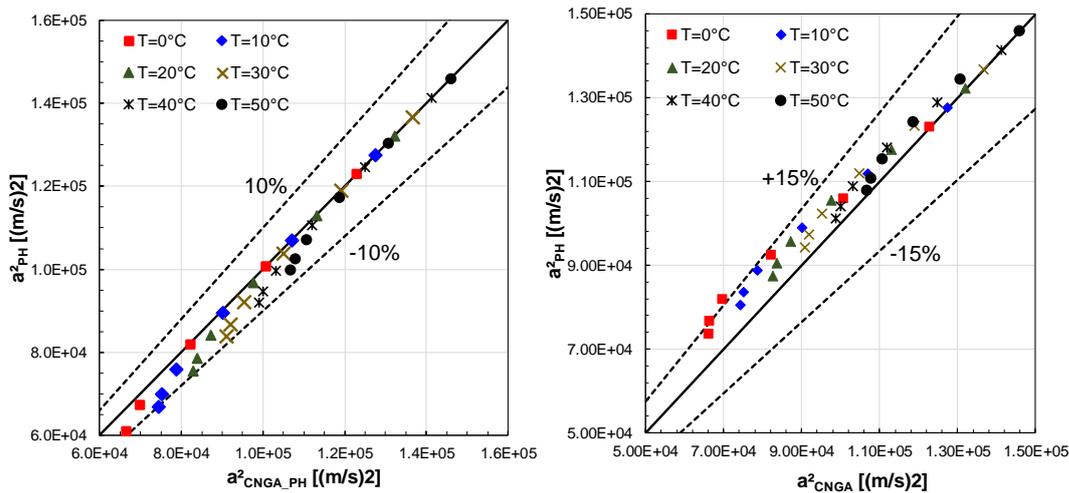
Analisando a Figura 5.7, observa-se diferenças inferiores a 10%. Observa-se ainda que as diferenças crescem com o aumento de pressão e diminuição de temperatura. Apesar das diferenças serem maiores do que as obtidas com o Modelo atual, a correlação de CNGA será utilizada para auxiliar na avaliação da velocidade do som isotérmica, assim como o coeficiente de expansão térmico, ambas grandezas dependentes das variações do fator de compressibilidade com a pressão e temperatura, respectivamente.



a) Pressão constante variando temperatura b) Temperatura constante variando pressão

**Figura 5.7 – Comparação Z, Modelo atual vs CNGA; a) Pressão constante variando temperatura b) Temperatura constante variando pressão**

A apresentação das avaliações de  $a^2$  e  $\beta$  encontram-se na Figura 5.8 e Figura 5.9, com a comparação dos resultados obtidos pelo Modelo atual que utiliza Peng-Robinson ( $a_{PH}^2$  e  $\beta_{PH}$ ) e pelo CNGA, este último apresentado de duas formas, uma utilizando o  $Z$  calculado pelo Modelo atual e utilizando as equações das derivadas de  $Z$  do CNGA ( $a_{CNGA\_PH}^2$  e  $\beta_{CNGA\_PH}$ ) e outra utilizando tanto o  $Z$  calculado quanto as equações das derivadas do próprio CNGA ( $a_{CNGA}^2$  e  $\beta_{CNGA}$ ).



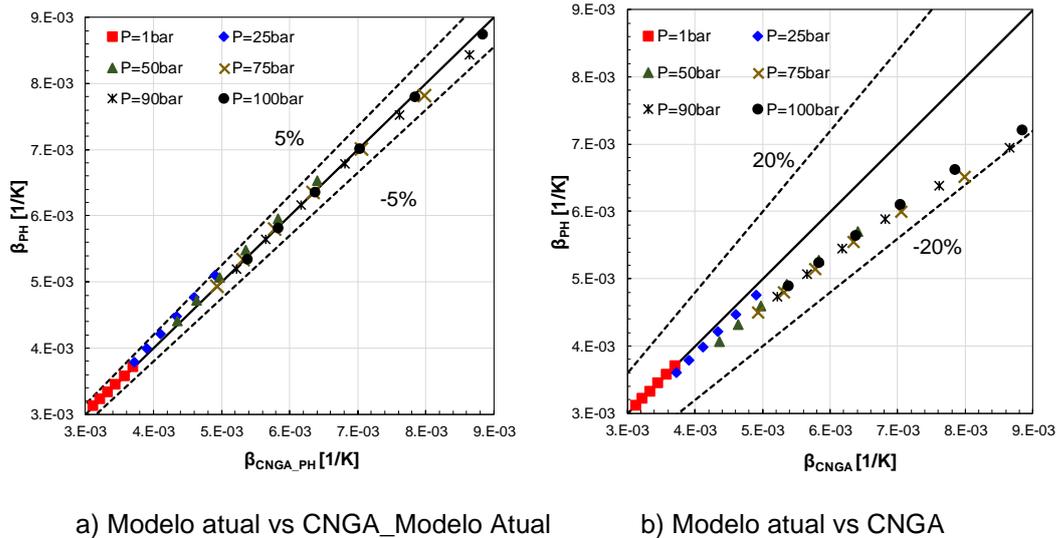
a) Modelo atual vs CNGA\_ModeloAtual

b) Modelo atual vs CNGA

**Figura 5.8 – Comparação  $a^2$ : a) Modelo atual vs CNGA\_ModeloAtual; b) Modelo atual vs CNGA**

Observando as Figura 5.8a e Figura 5.9a, é possível analisar apenas a influência do cálculo do  $a^2$  por Peng-Robinson e por CNGA, pois o  $Z$  utilizado é o mesmo. Dessa forma há uma divergência de aproximadamente 10% entre os dois cálculos para  $a^2$  e de 5% para  $\beta$ . Já analisando a Figura 5.8b e Figura 5.9b, essa divergência aumenta para aproximadamente 15% para  $a^2$  e de 20% para  $\beta$  pois também é considerado o desvio entre o  $Z$  calculado por Peng-Robinson e o  $Z$  calculado pelo CNGA.

É possível concluir que o cálculo do  $a^2$  é mais sensível à correlação do que ao valor de  $Z$  e que o cálculo de  $\beta$  é mais sensível ao valor de  $Z$  do que à correlação.



**Figura 5.9 – Comparação  $\beta$ : a) Modelo atual vs CNGA\_ModeloAtual; b) Modelo atual vs CNGA**

Os resultados termodinâmicos apresentados demonstram boa concordância, validando, dessa forma, a implementação da equação de estado e a metodologia para o cálculo de condensado, calor específico, velocidade do som isotérmica e coeficiente de expansão térmica.

## 5.2 Validação do Escoamento

Para avaliar a previsão do escoamento, selecionou-se dois testes. O primeiro de escoamento monofásico de gás ideal e o segundo de escoamento bifásico empregando Peng-Robinson como equação de estado.

### 5.2.1 Escoamento de Fanno

A teoria sobre o escoamento de Fanno é apresentada no Apêndice C. Uma vez, que o conjunto de equações a ser resolvido é muito grande, uma forma alternativa para resolver este problema consiste em determinar todas as propriedades do escoamento em relação aos respectivos valores críticos, i.e, valores correspondentes a  $M=1$ . Adicionalmente, tem-se que a temperatura de estagnação isentrópica ( $T_0$ ) que é constante, a qual pode ser obtida por:

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{k-1}{2} M^2 \quad (5.2.1)$$

assim,

$$\frac{T}{T^*} = \frac{T/T_0}{T^*/T_0} = \frac{k+1}{2\left[1 + \frac{k-1}{2}M^2\right]} \quad (5.2.2)$$

As outras propriedades podem ser facilmente obtidas manipulando as equações apresentadas, através das seguintes expressões

$$\frac{V}{V^*} = M \sqrt{\frac{T}{T^*}} \quad ; \quad \frac{\rho}{\rho^*} = \frac{V^*}{V} \quad (5.2.3)$$

$$\frac{P}{P^*} = \frac{1}{M} \sqrt{\frac{T}{T^*}} \quad (5.2.4)$$

Finalmente, integrando a força de atrito ao longo do duto até uma coordenada onde o número de Mach é crítico ( $M = 1$ ), tem-se

$$\frac{f L_{max}}{D} = \frac{1 - M^2}{k M^2} + \frac{k+1}{2k} \ln \left[ \frac{M^2}{\left(\frac{2}{k+1}\right) \left(1 + \frac{k-1}{2}M^2\right)} \right] \quad (5.2.5)$$

onde  $L_{max}$  corresponde ao comprimento de tubulação necessário para atingir o Mach crítico ( $M = 1$ ), partindo de uma seção com Mach  $M$ .

Para uma tubulação de comprimento  $L$ , o número de Mach na saída pode ser obtido, utilizando  $L_{max}$  correspondente aos números de Mach da entrada e da saída, pois

$$\frac{fL}{D} = \left( \frac{f L_{max}}{D} \right)_1 - \left( \frac{f L_{max}}{D} \right)_2 \quad (5.2.6)$$

Na Tabela 5.9, são apresentadas as características da tubulação, fluido e condições de contorno do caso avaliado.

**Tabela 5.9 – Características do caso de Fanno ideal**

Tubulação		Fluido: ar		Condição de contorno	
Diâmetro (mm)	7,16	Composição	77% N <sub>2</sub> 23% O <sub>2</sub>	Velocidade entrada (m/s)	65,3
Comprimento (m)	4,29	Constante do gás, R (Nm/Kg K)	287	Pressão entrada (bar)	0,9815
Fator de atrito	0,0235	k=cp/cv	1,4	Temperatura entrada (K)	294,15

A partir das condições na entrada, pode-se determinar o número de Mach da entrada e todas as propriedades críticas. Para cada coordenada  $x$ , determina-se o número de Mach de forma a satisfazer a Eq. (5.2.6)

Uma comparação dos resultados numéricos para pressão, temperatura, velocidade e número de Mach com a solução das equações de Fanno são apresentados na Figura 5.10 e na Figura 5.11, onde pode-se observar uma excelente concordância entre os resultados. O erro máximo de pressão foi de 0,47% e para a temperatura foi de 0,06%. Os erros máximos para a velocidade e para o número de Mach foi de 0,25% e 0,22%, respectivamente.

Os resultados apresentados validam a implementação das equações de conservação e a metodologia para resolver o acoplamento entre estas para o escoamento monofásico.

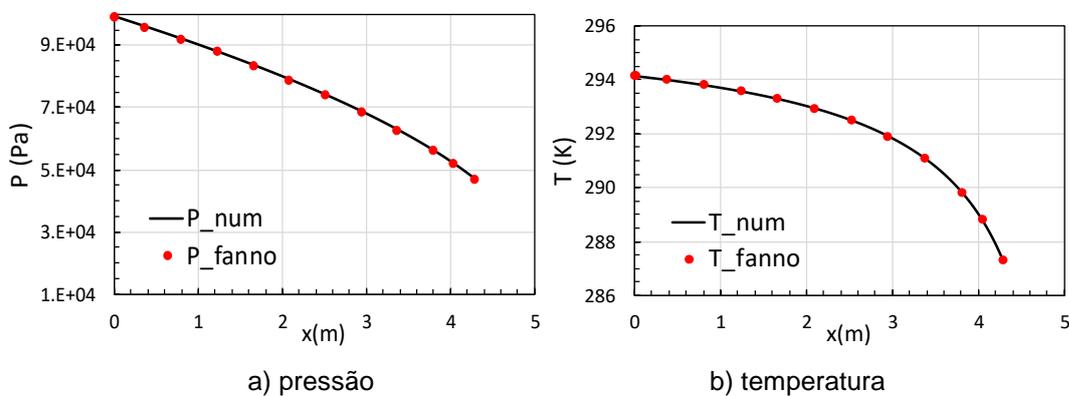


Figura 5.10 – Comparação da pressão e temperatura ao longo da tubulação

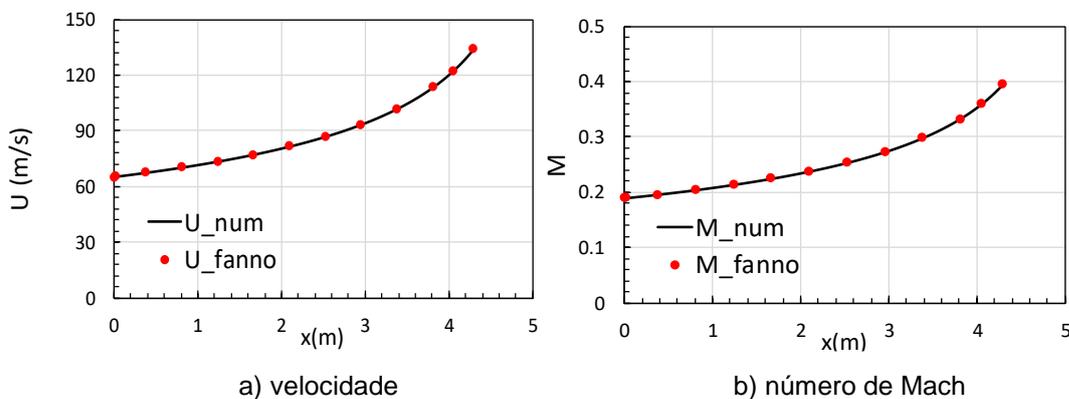


Figura 5.11 – Comparação da velocidade e número de Mach ao longo da tubulação.

## 5.2.2 Escoamento bifásico

Para a análise de escoamento bifásico, foi selecionado o trabalho de AlRaeesi e Al Kaabi (2016), que analisa o escoamento ao longo de um gasoduto, estimando a formação de condensado.

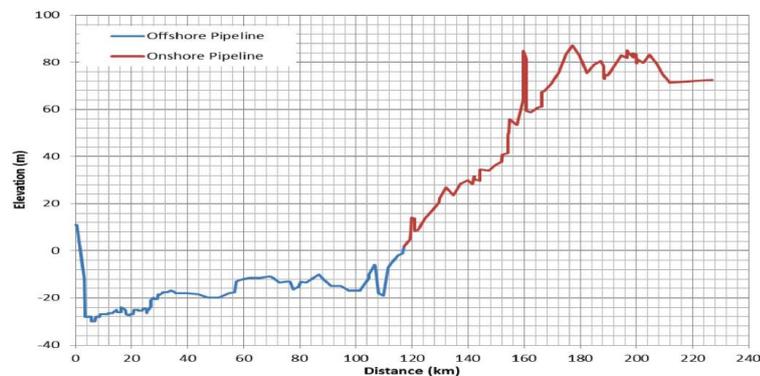
Para a presente comparação, analisa-se o perfil de pressão, temperatura e vazão ao longo do gasoduto e o volume de condensado acumulado, desprezando

a velocidade de deslizamento, ou seja, utilizando um modelo homogêneo.

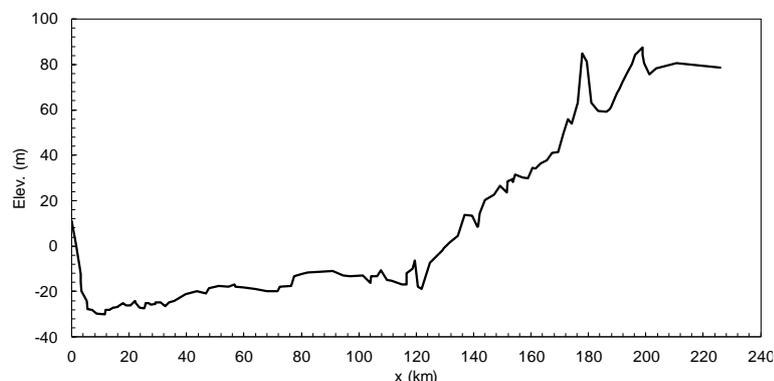
Procurou-se definir o problema da forma mais próxima possível da referência. O perfil do gasoduto estudado é apresentado na Figura 5.12. A Fig.5.12(a) apresenta o perfil retirado da referência e a Fig. 5.12(b), o perfil filtrado por meio de máximos e mínimos, através do utilizado no presente teste. As características da tubulação são apresentadas na Tabela 5.10.

A composição do gás utilizado na referência é apresentada na Tabela 5.11. No presente trabalho, benzeno e tolueno não foram considerados, assim como hidrocarbonetos muito pesados. Dessa forma, foi necessário criar um componente hipotético com a concentração apresentada na Tabela 5.11. Vale mencionar que a concentração dessas espécies é muito baixa, e o impacto na solução deve ser pequeno. A composição do fluido hipotético criado encontra-se na Tabela 5.12. O componente hipotético foi definido de forma a obter o mesmo envelope de fases que o fluido utilizado na referência correspondente a *Winter Lean* (conforme descrito em AIRaeesi e Al Kaabi, 2016), ilustrado na Figura 5.13.

O artigo utiliza o simulador OLGA e o módulo de rastreamento composicional para resolução de seus resultados, onde a análise do fluido e a geração do arquivo PVT é realizada utilizando o PVTsim com a equação de Peng-Robinson.



(a) AIRaeesi e Al Kaabi (2016)



(b) filtrado

Figura 5.12 – Perfil de elevação: (a) AIRaeesi e Al Kaabi (2016), (b) filtrado.

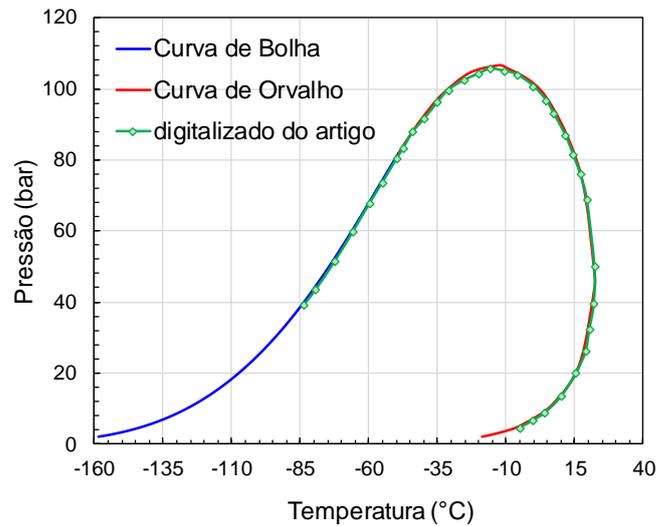
Tabela 5.10 - Características da tubulação

Comprimento (km)	Diâmetro Externo (in)	Rugosidade (mm)	Módulo de Elasticidade (kpsi)	Espessura (in) <sup>(2)</sup>
226	30	0,0457	60 <sup>(1)</sup>	0,9202

Fonte: (AlRaeesi e Al Kaabi, 2016)

<sup>(1)</sup> API 5L X60

<sup>(2)</sup> Espessura calculada utilizando a fórmula de Barlow e somada à sobreespesura de corrosão de 1,5 mm

Figura 5.13 – Envelope de Fases – *Winter Lean*Tabela 5.11 – Composição *Winter Lean* e Composição hipotética

Componente	Composição <i>Winter Lean</i> (%)	Composição hipotética (%)
C <sub>1</sub>	81,447	81,447
C <sub>2</sub>	5,202	5,202
C <sub>3</sub>	2,811	2,811
iC <sub>4</sub>	0,54	0,54
nC <sub>4</sub>	1,07	1,07
iC <sub>5</sub>	0,32	0,32
nC <sub>5</sub>	0,32	0,32
C <sub>6</sub>	0,21	0,21
C <sub>7</sub>	0,10	-
C <sub>8</sub>	0,01	-
Benzeno	0,02	-
Tolueno	0,01	-
H <sub>2</sub> O	0,004	0,004
H <sub>2</sub> S	2,021	2,021
CO <sub>2</sub>	3,452	3,452
N <sub>2</sub>	2,461	2,461
Hipotético	-	0,14

**Tabela 5.12 – Características do componente hipotético**

Componente	$MM$ (kg/kmol)	$T_c$ (K)	$P_c$ (bar)	$V_c$ (cm <sup>3</sup> /mol)	$\omega$
Hipotético	97,474	548,92	29,45	0,4064	0,315

Uma vez que todos os parâmetros necessários para a simulação não foram fornecidos na referência, alguns testes foram realizados, visando minimizar as diferenças entre as modelagens.

### 5.2.2.1 *Escoamento monofásico – comparação com literatura*

Um primeiro teste, consistiu em analisar um caso de escoamento monofásico uma vez que foram apresentados na referência. Este teste também serviu para avaliar o desempenho do modelo para determinar o escoamento monofásico utilizando a equação de estado de Peng-Robinson. Nesta primeira análise correspondendo a um cenário monofásico, as condições de contorno consideradas foram: pressão de envio de 152 bar, e a pressão de recebimento é de 137bar. No trabalho de AlRaeesi, & Al Kaabi (2016), a temperatura de envio foi informada como sendo igual a 47°C, porém não foi informada dados de perda de calor para o ambiente. Com uma pesquisa rápida sobre a meteorologia da região de Abu Dahbi, verificou-se que a temperatura da água e do solo no inverno seria de 15°C, então foi considerada essa temperatura como a temperatura ambiente para o teste. Para a avaliação da troca térmica com o ambiente foi considerado um coeficiente global de transferência de calor constante,  $U_e$  de 11,3 W/m<sup>2</sup>.K para o trecho submarino (água do mar) (Engineering ToolBox, 2003) e de 2,0 W/m<sup>2</sup>K (Teixeiras, 2016) para o trecho terrestre (solo). Ambas grandezas estimadas a partir da literatura disponível para as possíveis condições da região.

A vazão obtida com este primeiro teste foi igual a 188,5 m<sup>3</sup>/s, a qual comparando com 173,7 m<sup>3</sup>/s (530 MMSCFD) da referência, forneceu um erro de 8,5%, o qual pode ser considerado satisfatório, devido as diferenças entre as modelagens e incertezas de parâmetros de definição do problema.

### 5.2.2.2 *Escoamento bifásico*

AlRaeesi e Al Kaabi (2016) apresentou uma outra condição de escoamento em regime permanente, a qual apresentou formação de condensado. Uma vez que as informações das fronteiras precisaram ser lidas de gráficos, obteve-se grande incerteza na obtenção destes valores. Os principais dados obtidos dos

gráficos foram: vazão de 1000 MMSCFD ( $327,7 \text{ m}^3/\text{s}$ ), pressão de envio de 152 bar e de recebimento de 83 bar, sendo a temperatura de envio igual a  $54^\circ\text{C}$ . O volume de condensado obtido por AlRaeesi e Al Kaabi (2016) foi de  $56 \text{ m}^3$ .

Devido às incertezas relacionadas com as condições de contorno deste caso, alguns testes foram realizados. No primeiro, foram impostas pressões na entrada e saída da tubulação de acordo com os dados informados no parágrafo anterior, e a vazão obtida como resultado da presente simulação foi comparada com o valor da referência. Um segundo teste foi realizado, onde a vazão foi imposta na entrada, juntamente com a pressão na saída e a pressão resultante obtida na entrada foi comparada com a referência. Para este caso, para definir a vazão em massa na entrada do duto, considerou-se uma massa específica nas condições padrão ( $1 \text{ atm}$ ,  $20^\circ\text{C}$ ) de  $0,8678 \text{ g/cm}^3$ , o que resultou em uma vazão mássica na entrada igual a  $284,414 \text{ kg/s}$ .

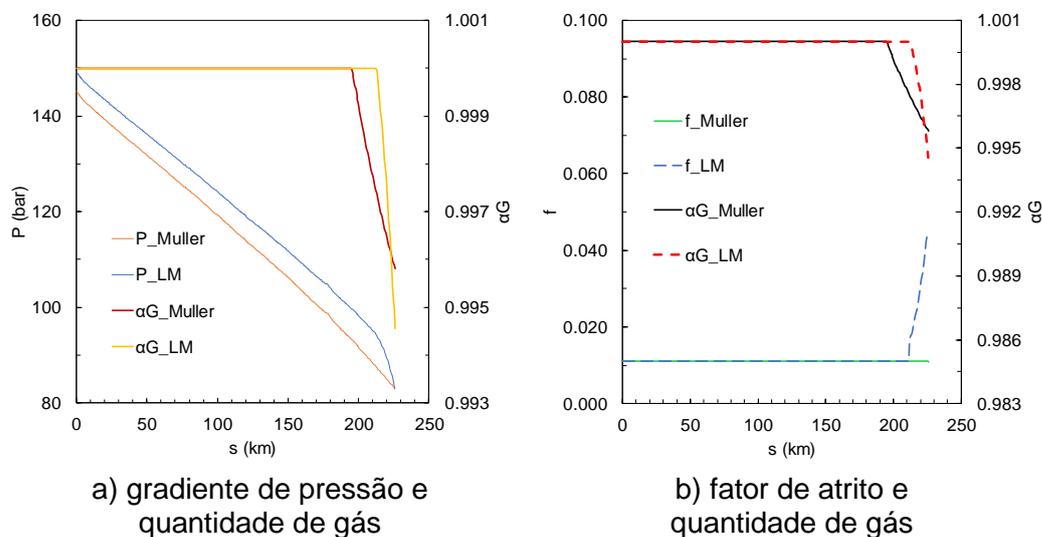
Este exemplo também foi utilizado para avaliar a influência da definição do fator de atrito. Duas correlações foram consideradas no presente trabalho. A primeira é a correlação de Miller (Eq.(3.3.9)), que é recomendada para escoamento monofásico, mas devido a baixa quantidade de condensado, também poderia ser utilizada para um escoamento bifásico. A segunda que foi desenvolvida para escoamentos bifásicos é a correlação de Lockhart-Martinelli (LM) (Eq. (3.3.15)). É importante mencionar, que no presente trabalho, caso a correlação de Lockhart-Martinelli tenha sido selecionada, esta somente é empregada nas regiões da tubulação com a presença de duas fases.

Antes de apresentar a comparação dos resultados obtidos com a literatura foi feita uma comparação entre os resultados obtidos utilizando cada correlação. Para este teste, a vazão na entrada foi imposta, junto com a pressão na saída.

#### **5.2.2.2.1 Influência do fator de atrito**

A variação da pressão ao longo do duto obtida com o emprego das duas correlações de fator de atrito é apresentada na Figura 5.14a. Na Figura 5.14b, a fração de gás também é apresentada, para ressaltar a região onde o condensado foi formado. Na Figura 5.14b, os fatores de atrito correspondentes, juntamente com a fração de gás também são apresentados. É possível observar que o condensado somente é formado no final do duto, conseqüentemente, o escoamento é monofásico na maior parte da tubulação. Quando ocorre a formação de condensado, o fator de atrito dado pela correlação de LM cresce (enquanto que o fator de atrito de Miller permanece constante), induzindo a um aumento significativo na queda de pressão, a qual por sua vez influencia na

formação de condensado. Note que o gradiente de pressão de LM e Miller na parte monofásica são paralelos, sendo o deslocamento observado no gradiente de LM devido ao maior diferencial de pressão observado na parte bifásica no final da tubulação, já que a pressão na saída foi imposta como constante. Este deslocamento no perfil da pressão é resultante do fato de que, para manter uma vazão mássica constante e uma pressão na saída constante, um diferencial de pressão maior é necessário quando se tem um atrito maior. Observando os resultados, conclui-se que mesmo que a quantidade de condensado seja pequena e localizada numa região restrita da tubulação, é necessário utilizar uma correlação que contemple a presença do condensado.



**Figura 5.14 – Comparação Lockhart-Martinelli e Miller**

Visando complementar a análise dos dados deste teste, apresenta-se na Figura 5.15 e na Figura 5.16, os perfis axiais de temperatura e velocidade obtidos ao empregar as duas correlações para o fator de atrito. Analisando o perfil de temperatura ao longo do duto na Figura 5.15, verifica-se que praticamente o mesmo perfil de temperatura foi obtido com as duas correlações, com um pequeno desvio na região de formação de condensado. Este resultado indica que a troca térmica está sendo governada pela perda de calor para o ambiente, e que o trabalho de pressão e a dissipação viscosa são desprezíveis. Já com relação ao perfil de velocidade (Figura 5.16), um pequeno desvio é obtido entre as duas soluções, o qual é consequência da influência da maior pressão obtida com a correção de LM, a qual induz a uma maior massa específica e consequentemente menor velocidade. Como o perfil de temperatura é análogo e as curvas de pressão são paralelas na maior parte do domínio, os perfis de velocidade também só apresentam um deslocamento.

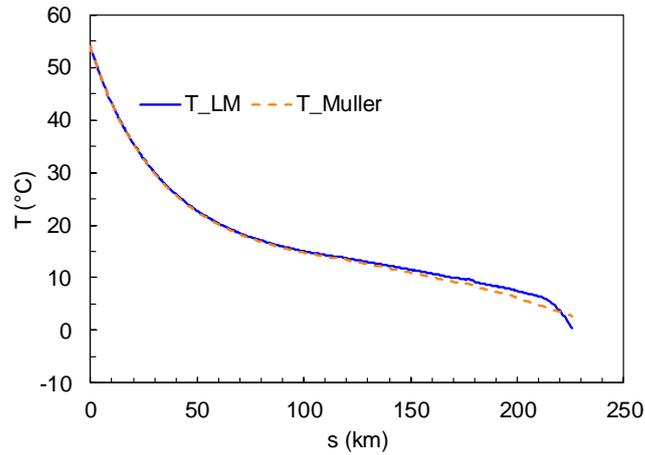


Figura 5.15 – Gradiente de Temperatura - Comparação LM e Miller

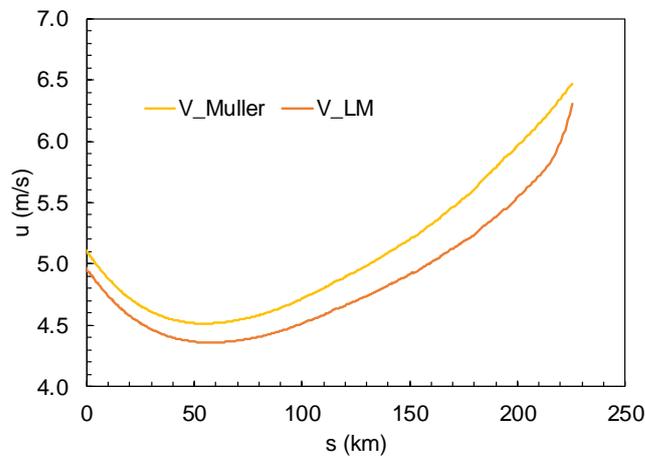


Figura 5.16 – Perfil de Velocidade do escoamento - Comparação LM e Miller

5.2.2.2 Comparação com a literatura

Após essa análise, a seguir compara-se na Figura 5.17, o perfil de pressão obtido utilizando as duas correlações com o resultado de AlRaeesi & Al Kaabi (2016).

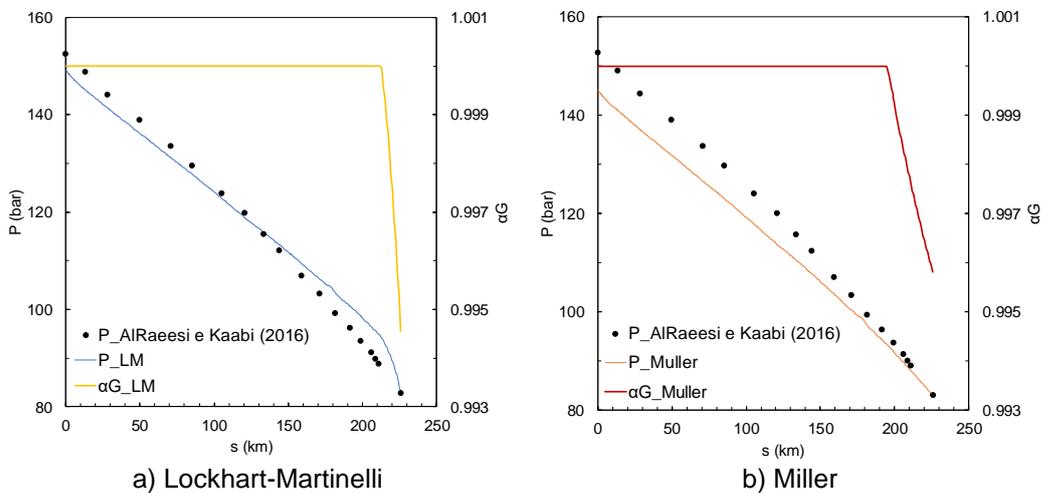


Figura 5.17 – Comparação com a literatura - Gradiente de Pressão

Analisando a Figura 5.17a, observa-se uma boa concordância entre os resultados obtidos no presente trabalho e os dados de AlRaeesi & Al Kaabi (2016). Nota-se que, assim como a referência, o presente modelo prevê um aumento da queda de pressão após a formação do condensado. O desvio obtido entre as soluções pode ser atribuído a dificuldade de impor exatamente as mesmas condições que a referência.

Ainda analisando a Figura 5.17, é possível concluir que o perfil de pressão utilizando LM (Figura 5.17 a) apresenta melhor concordância com os dados de AlRaeesi & Al Kaabi (2016) do que o perfil utilizando a correlação de Miller (Figura 5.17 b), corroborando a discussão anterior, da importância de considerar na avaliação do fator de atrito a presença de condensado.

Devido à incerteza nas condições de contorno, foi realizado um outro teste, onde foi imposta a pressão na entrada constante e igual a 152 bar, ao invés da vazão mássica, de forma a avaliar o erro em relação a vazão obtida. A vazão obtida com o emprego da correlação de LM foi de 1023 MMSCFD, sendo igual a 1072MMSCFD para a correlação de Miller, tendo erros relativos respectivamente de 2,3% e 7,2%, comprovando mais uma vez a importância de utilizar Lockhart-Martinelli ao invés de Miller.

Para os dois tipos de condições de contorno, vazão na entrada e pressão na saída (denominado  $\dot{m}_{in}/P_{out}$ ) e pressão na entrada e saída ( $P_{in}/P_{out}$ ) e para as duas correlações de fator de atrito, avaliou-se o volume de condensado no interior do domínio, assim como a coordenada de início de formação de condensado. Os resultados obtidos foram comparados com os dados apresentados por AlRaeesi, & Al Kaabi (2016). Um resumo dos resultados é apresentado na Tabela 5.13.

Analisando os resultados na Tabela 5.13, observa-se que com relação as condições do escoamento, a concordância com os dados da literatura é muito boa, sendo os resultados obtidos com a correlação de LM melhores. Porém, com relação as comparações referentes ao condensado, uma maior concordância com a literatura foi obtida quando a correlação de Miller foi utilizada. AlRaeesi, & Al Kaabi (2016) informaram que para o produto *Winter Lean*, o escoamento passa a ser bifásico a partir do km 180. Uma distância maior da entrada da tubulação foi prevista correspondente ao início de formação de condensado com a utilização de ambas as correlações, com uma discrepância maior para a correlação de LM. Com relação ao volume de condensado, devido aos níveis mais altos de pressão previstos com a correlação de LM do que com a correlação de Miller, principalmente na região de condensado, um volume significativamente menor de condensado foi formado.

Tabela 5.13 – Resumo dos resultados

Caso	Monofásico	Bifásico	Bifásico	Bifásico	Bifásico
<b>Correlação fator de atrito</b>	Miller	LM	Miller	LM	Miller
<b>CC</b>	$P_{in}/P_{out}$	$P_{in}/P_{out}$	$P_{in}/P_{out}$	$\dot{m}_{in}/P_{out}$	$\dot{m}_{in}/P_{out}$
<b>Vazão (MMSCFD) <sup>(1)</sup></b>	530	1000	1000	-	-
<b>Vazão (MMSCFD) <sup>(2)</sup></b>	575	1023	1072	-	-
<b>Erro Q</b>	8,5%,	2,3%	7,2%	-	-
<b>Pin (bar) <sup>(1)</sup></b>	-	-	-	152	152
<b>Pin (bar) <sup>(2)</sup></b>	152	152	152	145	149
<b>Erro Pin</b>	-	-	-	5%	2%
<b>Pout (bar)</b>	137	83	83	83	83
<b>Qtd. Condensado (m<sup>3</sup>)<sup>(1)</sup></b>	-	56	56	56	56
<b>Qtd condensado (m<sup>3</sup>)<sup>(2)</sup></b>	-	14.21	32.13	12.60	27.76
<b>Erro Qtd. condensado</b>	-	75%	43%	78%	50%
<b>Posição início Condensado (km) <sup>(1)</sup></b>	-	180	180	180	180
<b>Posição início Condensado (km) <sup>(2)</sup></b>	-	212,074	195,297	212,074	194,676
<b>Erro Posição início Condensado</b>	-	18%	8%	18%	8%

<sup>(1)</sup> AlRaeesi, F., & Al Kaabi, N., 2016

<sup>(2)</sup> presente

Apesar da diferença com relação a previsão de condensado ter sido grande, os resultados obtidos nesta seção podem ser considerados satisfatórios, uma vez que boa concordância para os parâmetros do escoamento foram obtidas e as relações termodinâmicas, assim como o Flash apresentaram excelente concordância com a literatura e *software* comercial (nos testes realizados na seção anterior). Pode-se atribuir a presente discrepância às incertezas nas condições de contorno e na utilização do fluido hipotético. Outro fator que pode ter influenciado neste resultado, consiste na hipótese de velocidades iguais para gás e condensado utilizada no modelo atual. Este último é provavelmente a maior incerteza da atual modelagem, pois como não há deslizamento, o modelo não permite acúmulo de líquido nos vales ao longo da tubulação, o que acaba impactando no volume total de condensado acumulado.

## 6 ANÁLISE DE CASOS

Após as análises apresentadas no capítulo anterior que mostraram bons resultados não só para a modelagem de Flash desenvolvida neste trabalho, mas também para a determinação do escoamento na presença de condensado, neste capítulo casos com *pig/plug* de hidrato, com formação de condensado são analisados.

Analisou-se dois casos de escoamento na presença de *pig* baseados em trabalhos da literatura e um caso de despressurização unilateral para deslocar um *plug* de hidrato.

A literatura disponível não é vasta para analisar o problema de interesse deste trabalho. Isto é, somente dois trabalhos foram encontrados na literatura, apresentando deslocamento de *pigs* na presença de condensado. Infelizmente, estes trabalhos falham em detalhar cuidadosamente o problema, e como consequência somente uma comparação qualitativa é realizada aqui. Nenhum trabalho de despressurização de gás na presença de *plug* foi encontrado, sendo este estudo uma contribuição do presente trabalho.

Para todos os casos, utilizou-se a modelagem homogênea, i.e., sem deslizamento de velocidade entre as fases.

Conforme a análise apresentada no capítulo anterior, utilizou-se a correlação de fator de atrito de Lockhart-Martinelli na presença de condensado e a correlação de Miller, na sua ausência.

### 6.1 Caso 1: tubulação horizontal, baixa vazão

Este caso foi selecionado baseado no trabalho de Xu e Gong (2005). Consiste no escoamento em um duto longo e horizontal, onde um *pig* foi inserido. No exemplo da referência, ocorre a formação de condensado. Procurou-se definir este caso teste o mais próximo possível do caso analisado na referência. No entanto, devido à ausência de algumas informações, diversas aproximações foram necessárias.

Inicialmente, será analisado em detalhes o escoamento acoplado ao deslocamento do *pig*. A seguir, devido às incertezas na especificação de todas as variáveis necessárias para a solução do escoamento, somente comparações

qualitativas com a referência são apresentadas.

As características da tubulação estão apresentadas na Tabela 6.1.. A composição do fluido que está sendo transportado encontra-se na Tabela 6.2. Não há informações no artigo do pseudo-componente C7+, apenas é apresentado o envelope de fases. Dessa forma, foram estimadas através de tentativa e erro as características do C7+, apresentadas na Tabela 6.3 de forma a obter um envelope de fases o mais próximo possível do envelope de fases apresentado na Figura 6.1 retirado do artigo de Xu e Gong (2005).

Foi informado por Xu e Gong (2005) que o coeficiente global de troca térmica é de  $U_e = 1,5 \text{ W}/(\text{m}^2.\text{K})$  e que a temperatura ambiente é de  $T_\infty = 3^\circ\text{C}$ . Foi informado que foi utilizada uma tubulação horizontal de aço, a qual pode ser considerada como tubulação rígida.

**Tabela 6.1 – Características da tubulação. Caso 1. (Xu e Gong, 2005)**

Comprimento (km)	Diâmetro Externo (mm)	Rugosidade (mm)	Módulo de Elasticidade (GPa)	Espessura (mm)	Coefficiente de Poisson (-)
199	559	0,0200	211	11,9	1,0

Fonte: Xu e Gong, 2005

**Tabela 6.2 – Composição do gás-condensado. Caso 1.**

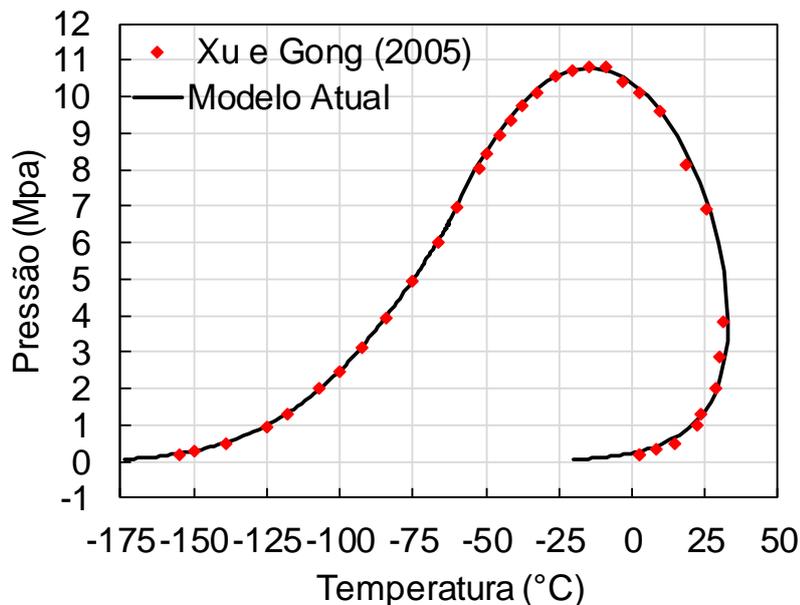
Componente	Composição (%)
C1	88,73
C2	7,10
C3	1,31
iC4	0,29
nC4	0,34
iC5	0,17
nC5	0,10
C6	0,22
C7+	0,14
CO2	0,09
N2	1,51

**Tabela 6.3 – Características do pseudo-componente C7+. Caso 1.**

Componente	$MM$ (kg/kmol)	$T_c$ (K)	$P_c$ (bar)	$V_c$ (cm <sup>3</sup> /mol)	$\omega$
C7+	120,0	576,85	24,31	503,76	0,3935

Visando comparar os resultados da presente metodologia com a referência, estimou-se a força de atrito dinâmico como sendo constante e igual a

$F_{dyn} = 2226 N$ . Esta informação não foi disponibilizada na referência, tendo sido estimada a partir do gráfico de distribuição de pressão ao longo do duto, onde foi calculada a diferença de pressão entre as duas tangentes que podem ser vistas no perfil do OLGa na Figura 6.7 a) correspondente a um instante de tempo que também não foi informado. A massa do *pig* também não foi informada e um valor arbitrário, típico para *pigs*, igual a 614 kg foi definido.



**Figura 6.1 – Envelope de Fases – gás-condensado**

As condições de contorno utilizadas foram de vazão mássica constante na entrada igual a 20,9 kg/s, calculado a partir da vazão volumétrica em condições padrão (1atm, 20°C) de 27,4 m/h conforme dado apresentado na tabela de dados de Xu e Gong (2005). Na saída, a pressão também foi especificada como constante, sendo igual 89,57bar, conforme perfil de pressão apresentado por Xu e Gong (2005), ilustrada na Figura 6.7 a). A temperatura na entrada foi mantida em 20°C, como informado na referência.

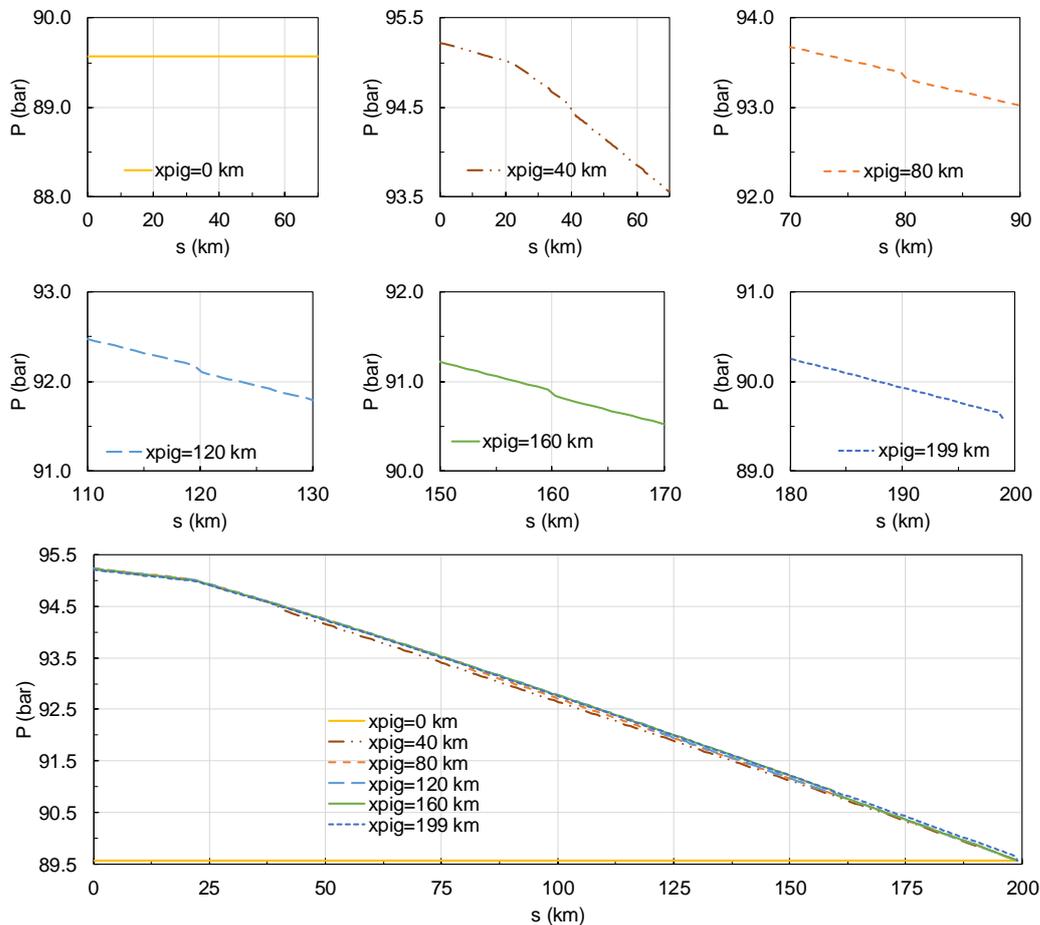
### 6.1.1 Condição inicial de repouso

Considerando que inicialmente, o fluido no interior da tubulação encontra-se em repouso, com pressão constante e igual da saída e em equilíbrio térmico com o meio externo, um *pig* é inserido na entrada do duto, e gás é introduzido na tubulação para deslocar o *pig* e o fluido.

Para a condição inicial de pressão e temperatura, devido ao baixo valor de ambas grandezas, existe condensado ao longo de todo o duto. O escoamento se inicia com a introdução de gás a 20°C, sem condensado. A evolução da solução

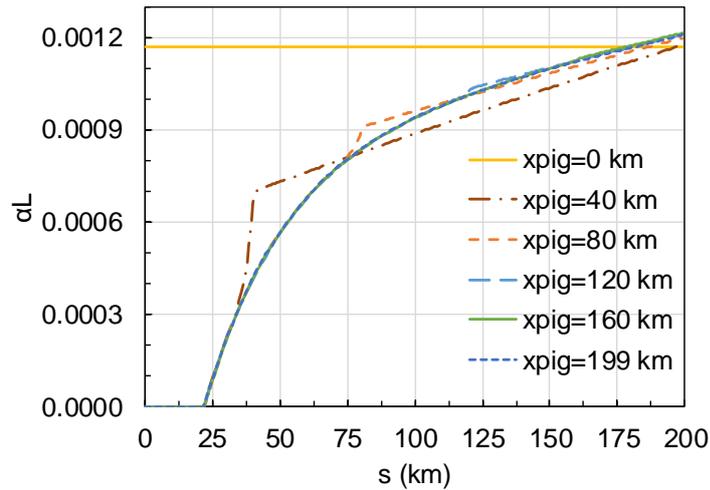
com o tempo ao longo da tubulação é apresentada na Figura 6.2 à Figura 6.5.

A Figura 6.2, corresponde ao campo de pressão. Visando auxiliar na visualização e análise dos resultados, um *zoom* próximo da posição do *pig* é ilustrado para diferentes instantes de tempo. Analisando o perfil de pressão na Figura 6.2, é possível ver uma quebra na posição do *pig*, correspondente a queda de pressão adicional devido a força de contato do *pig*. Este resultado permite observar o deslocamento do *pig*. Pode-se observar também uma diferença na inclinação do perfil, a partir km 25 aproximadamente, a qual está associada a formação de condensado. Nota-se que a inclinação fica mais acentuada devido a uma maior perda de carga correspondente à presença de condensado. Essa formação de condensado é comprovada na Figura 6.3.

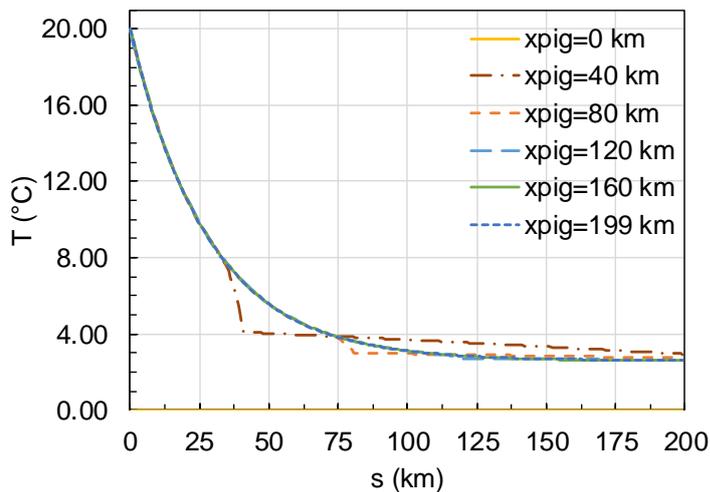


**Figura 6.2 – Perfil de pressão ao longo da tubulação para diferentes instantes de tempo. Caso 1.**

É possível observar que o perfil de condensado é mais afetado pelo comportamento do perfil de temperatura, Figura 6.4, do que pelo perfil de pressão, Figura 6.2, pois a temperatura varia mais do que a pressão ao longo do tempo e espaço.

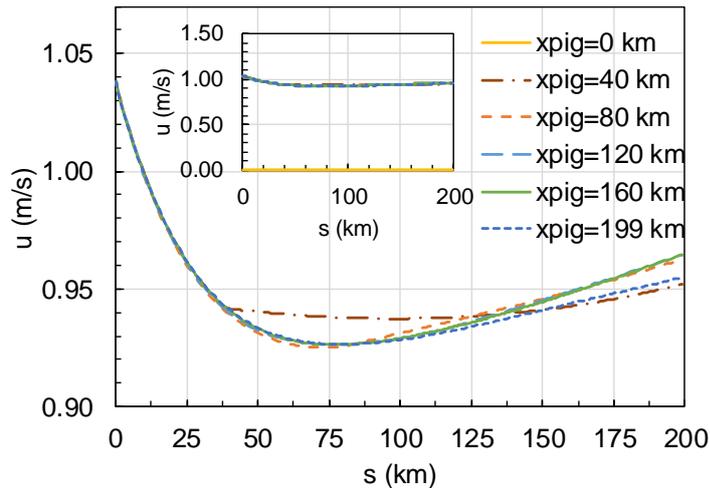


**Figura 6.3 – Perfil de fração de líquido ao longo da tubulação para diferentes instantes de tempo. Caso 1.**



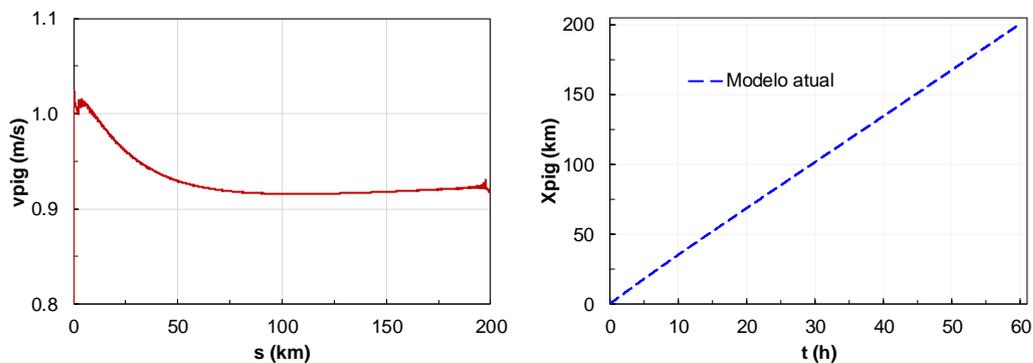
**Figura 6.4 – Perfil de temperatura ao longo da tubulação para diferentes instantes de tempo. Caso 1.**

O perfil de velocidade ao longo do duto para os diferentes instantes de tempo pode ser analisado na Figura 6.5. Devido ao resfriamento do gás, ao perder calor para o ambiente, ocorre uma queda forte da temperatura, aumentando a massa específica. Consequentemente, a velocidade da mistura cai. A massa específica também é aumentada devido a presença de condensado, consequentemente induzindo uma queda na velocidade. Após o equilíbrio térmico do gás com o ambiente, a pressão passa a dominar a massa específica, e a velocidade apresenta uma leve recuperação. É possível observar que a diferença de velocidade no final da tubulação está ligada com a quantidade de condensado formada.



**Figura 6.5 – Perfil de velocidade ao longo da tubulação para diferentes instantes de tempo. Caso 1.**

A variação da velocidade do *pig* ao longo do duto é ilustrada na Figura 6.6 juntamente com a evolução temporal de sua posição. Inicialmente o *pig* é introduzido no repouso. Com a injeção de gás, a pressão cresce até vencer a força de atrito estático, induzindo uma grande aceleração do *pig*, quando este começa a se movimentar. A medida que a temperatura cai e a velocidade de escoamento diminui, a velocidade do *pig* também diminui, e a partir do km 100, se desloca com velocidade aproximadamente constante.



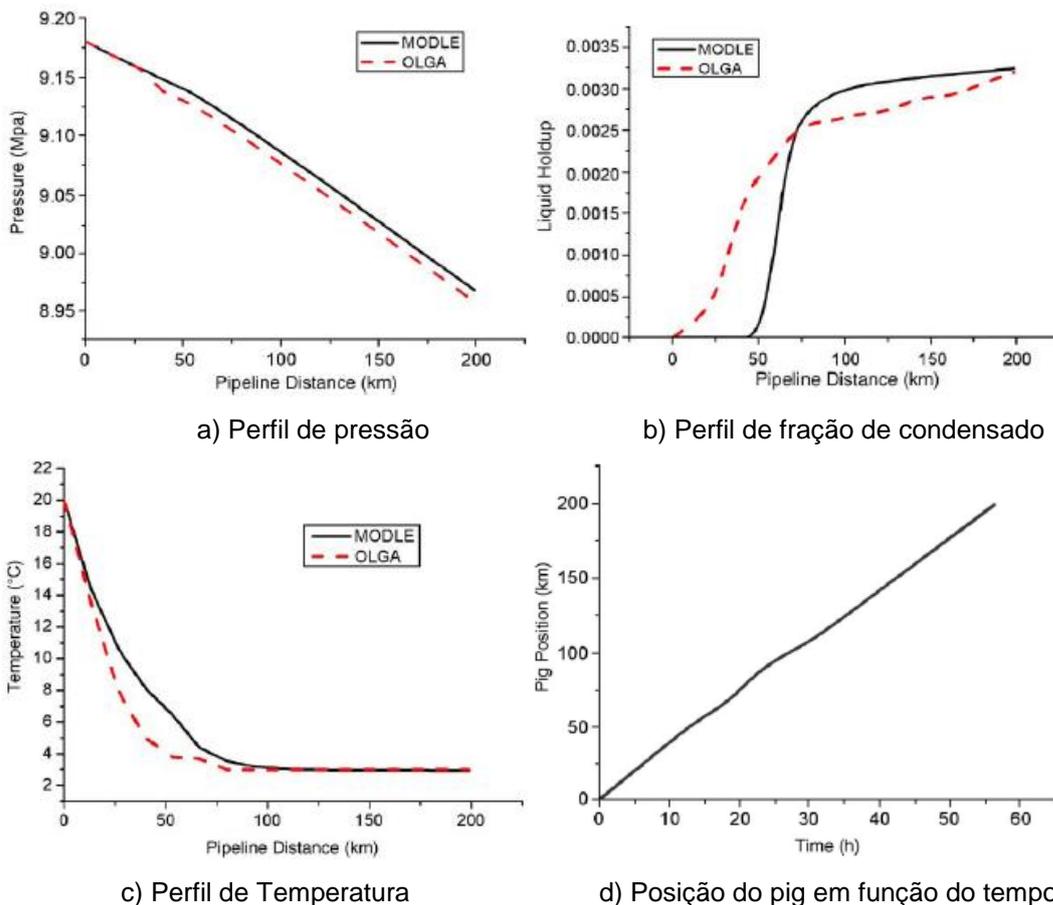
**Figura 6.6 – Velocidade do *pig* ao longo do duto e posição do *pig* com o tempo. Caso1.**

### 6.1.2 Comparação com a literatura

A seguir uma comparação com o trabalho de Xu e Gong (2005) é apresentada. A Figura 6.7 reproduz os principais resultados Xu e Gong (2005), que comparou seus resultados com os dados obtidos utilizando o *software* comercial OLGA. São apresentadas as distribuições axiais de pressão, de fração

de líquido, e de temperatura e a posição do *pig* em função do tempo. Deve-se notar, que a referência não informa a que instante de tempo os resultados correspondem. Dessa forma, analisando a Figura 6.7(a), considerou-se que a descontinuidade no perfil de pressão corresponde ao salto de pressão devido a força de resistência dinâmica do *pig*, o qual foi considerado como localizado na posição igual a aproximadamente 29 km e tempo de 8h (Figura 6.7d).

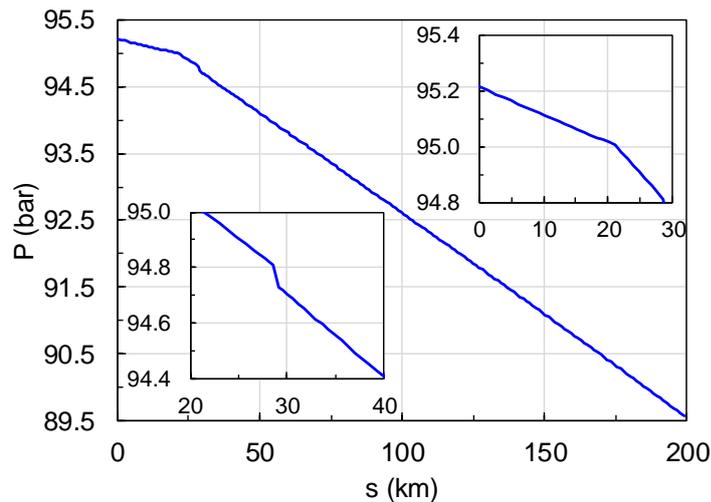
Como mencionado, diversos parâmetros não foram definidos na referência, o que inviabiliza uma comparação direta. Adicionalmente, algumas informações da própria referência são incompatíveis. Como por exemplo, foi informado numa tabela do artigo, uma pressão na entrada constante e igual a 92,19 bar. Porém, ao visualizar o perfil de pressão apresentada, a pressão na entrada possui outro valor, devido a isso foi considerado como condição de contorno vazão mássica na entrada como constante e pressão na saída também constante.



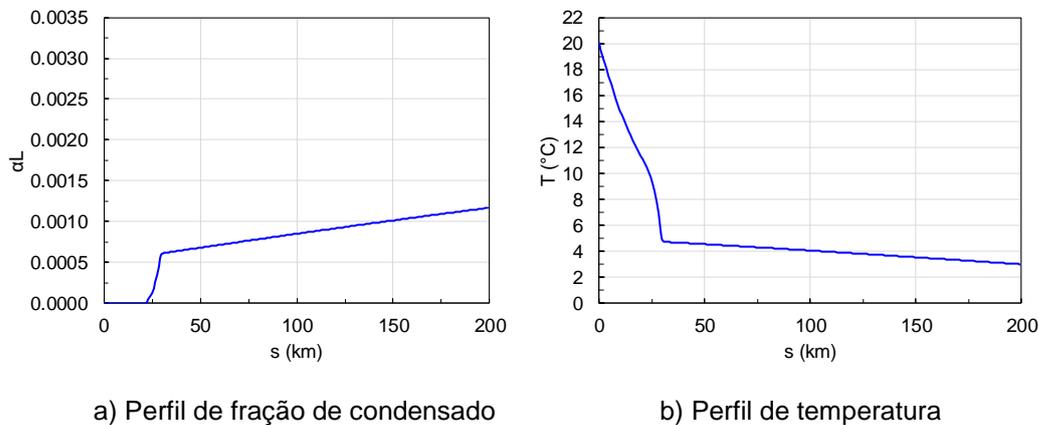
**Figura 6.7 – Resultados da literatura – Fonte: [Xu e Gong (2005)]**

A Figura 6.8 apresenta o perfil de pressão ao longo da tubulação, correspondente ao instante de tempo igual a 8h, obtido com o modelo desenvolvido. Observa-se um pequeno salto de pressão na posição do *pig*

correspondente a força de contato dinâmica, na ordem de grandeza do valor estimado utilizando o perfil da Figura 6.7(a). Comparando-se os resultados observa-se uma mudança de inclinação do perfil pressão da referência, o qual também é captado na presente análise. Analisando a fração de líquido de Xu e Gong (2005) na Figura 6.7(b), e a obtida no presente trabalho na Figura 6.9a, pode-se atribuir este aumento de perda de carga a existência de condensado, o qual apresenta um aumento significativo na mesma coordenada.



**Figura 6.8 – Perfil de pressão em t=8 h, xpig=29 km. Caso 1.**



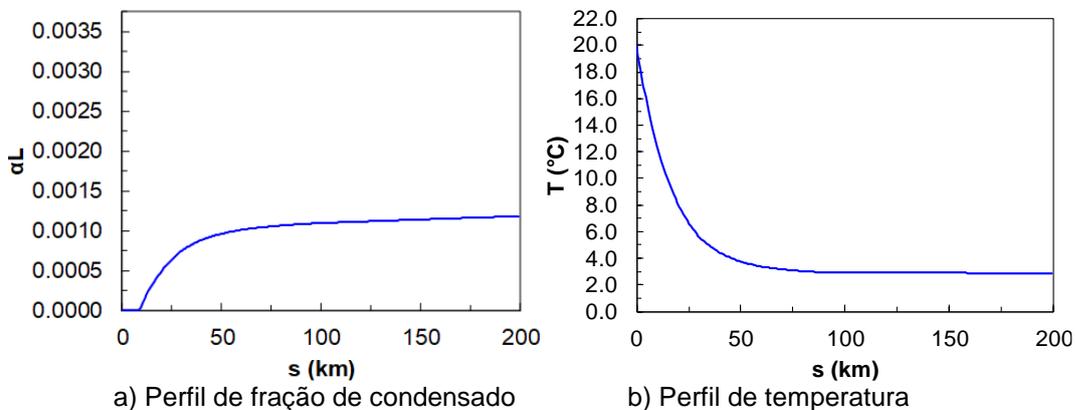
a) Perfil de fração de condensado

b) Perfil de temperatura

**Figura 6.9 – Perfil de fração de líquido e de temperatura em t=8 h, xpig=29 km. Caso 1. Condição inicial repouso.**

O perfil de temperatura ao longo da tubulação no referido instante de tempo, Figura 6.9b, se assemelha aos dados de Xu e Gong (2005)] na Figura 6.7c, somente na região após o *pig*. Como mencionado, à montante do *pig*, o sistema ainda está sendo aquecido com o gás injetado a 20°C, e o perfil obtido reflete este fato. Uma rápida comparação entre essas duas soluções, indica que a introdução do *pig* na tubulação após a obtenção do regime permanente é mais realista para

realizar essa comparação. Dessa forma, uma nova simulação foi realizada, na qual o *pig* só foi introduzido na tubulação após a obtenção do regime permanente, e esta solução foi comparada com os dados da referência. Para esta situação, o perfil axial da temperatura no instante de tempo selecionado pode ser analisado na Figura 6.10b. Observa-se uma grande semelhança entre os resultados obtidos neste trabalho e na referência. Como já mencionado, para este caso em particular, o perfil de temperatura está sendo mais fortemente governado pela troca térmica com o ambiente, uma vez que a queda de pressão através do *pig* é pequena, assim como o volume de condensado. O perfil de fração de líquido que é fortemente dependente da temperatura, ilustrado na Figura 6.10a, também passa a apresentar um comportamento análogo ao da literatura.



**Figura 6.10 – Perfil de fração de líquido e de temperatura em  $t=8$  h,  $x_{pig}=29$  km.**

**Caso 1. Condição inicial de regime permanente.**

No entanto, analisando-se o perfil axial de condensado obtido no presente trabalho, Figura 6.10a, observa-se um volume de líquido bem inferior ao da referência. Note, porém que, de forma análogo aos resultados da literatura, antes da posição do *pig* não há condensado, e após a mesma tendência de perfil de condensado é obtida.

Como comparação final com o artigo, compara-se o deslocamento do *pig* com o tempo na Figura 6.11. Pode-se afirmar que um bom resultado foi obtido. O tempo de deslocamento total do *pig* obtido com o modelo desenvolvido neste trabalho é um pouco maior que o apresentado por Xu e Gong (2005), pois a velocidade média do *pig* prevista pelo modelo atual foi de 0,99m/s e segundo Xu e Gong (2005), esta foi de 0,93m/s (6% menor). Este resultado é muito bom, devido a todas as dificuldades de se impor exatamente as mesmas condições operacionais nos dois modelos.

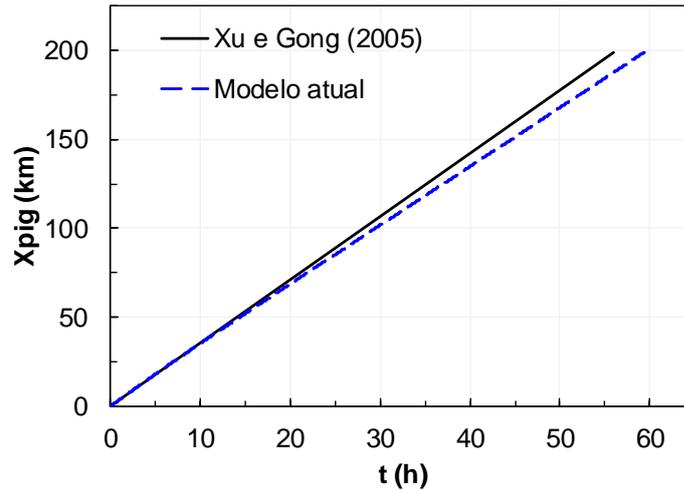
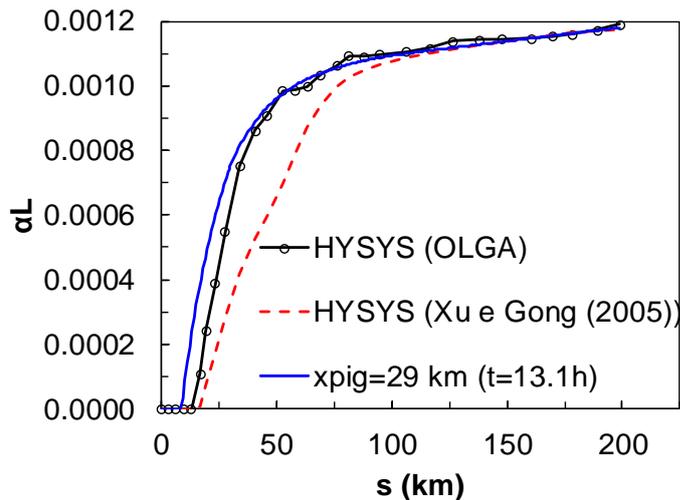


Figura 6.11 – Posição do pig em função do tempo. Caso 1.

Uma vez que a fração de líquido (*liquid holdup*) obtida no presente trabalho foi inferior ao valor apresentado na referência, um novo teste foi realizado visando esclarecer a razão das diferenças obtidas. O teste consistiu em determinar a fração de líquido em função dos valores de pressão e temperatura digitalizados do gráfico de pressão e temperatura do artigo, com o *software* HYSYS® e comparar com os presentes resultados. A Figura 6.12 apresenta essa comparação, onde HYSYS (OLGA) significa que os valores de pressão e temperatura obtidos com o *software* OLGA para o problema em estudo (apresentados na referência) foram utilizados no HYSYS para determinar a fração de líquido. De forma análoga, a legenda HYSUS (Xu e Gong, 2005) indica que os valores de pressão e temperaturas obtidos com o modelo da referência foram utilizados no HYSYS. Observa-se uma excelente concordância entre esses resultados e as previsões do presente modelo.



**Figura 6.12 – Comparação fração de condensado HYSYS® e Modelo atual**

Avaliando a Figura 6.12, acredita-se que as diferenças entre o modelo do Xu e Gong (2005) e o modelo atual, pode ser atribuída a ausência de velocidade de deslizamento, juntamente com a hipótese de composição constante. Estes dois últimos fatores impõem que o volume de condensado só depende da pressão e temperatura, i.e., o volume de líquido adicional que deveria ser empurrado pelo deslocamento do *pig* não existe.

## 6.2 Caso 2: tubulação horizontal: vazão alta

Este segundo caso de escoamento horizontal também é baseado num trabalho encontrado na literatura, o qual foi desenvolvido por Li e Jia (2013). A tubulação é ligeiramente diferente e a vazão é maior. Este trabalho referencia o trabalho de Xu e Gong (2005), utiliza um procedimento semelhante, e também compara seus resultados com os dados obtidos utilizando o *software* comercial OLGA.

Infelizmente, assim como o trabalho de Xu e Gong (2005), diversas grandezas importantes para a simulação não são apresentadas, o que inviabiliza uma comparação direta, e como no caso anterior, realiza-se uma comparação qualitativa entre os resultados.

As características da tubulação fornecida pro Li e Jia (2013) estão apresentadas na Tabela 6.4 e a composição do fluido que está sendo transportado na Tabela 6.5.

**Tabela 6.4 – Características da tubulação. Caso 2. (Li e Jia,2013)**

Comprimento [km]	Diâmetro Externo [mm]	Rugosidade [mm]	Módulo de Elasticidade [GPa]	Espessura (mm)	Coefficiente de Poisson (-)
199	599	0,0200	211	11,9	1,0

Fonte: Li e Jia,2013

**Tabela 6.5 – Composição do gás-condensado – Caso2**

Componente	Composição (%)
C1	88,73
C2	7,10
C3	1,31
iC4	0,29
nC4	0,34
iC5	0,17
nC5	0,10
C6	0,22
C7+	0,14
CO2	0,09
N2	1,51

Não há informações no artigo do pseudo-componente C7+, mas como a composição é a mesma do Caso 1, Tabela 6.2, e os autores informam que utilizaram como base o estudo de Xu e Gong (2005), foram utilizadas para este caso as mesmas características do C7+ apresentadas na Tabela 6.3.

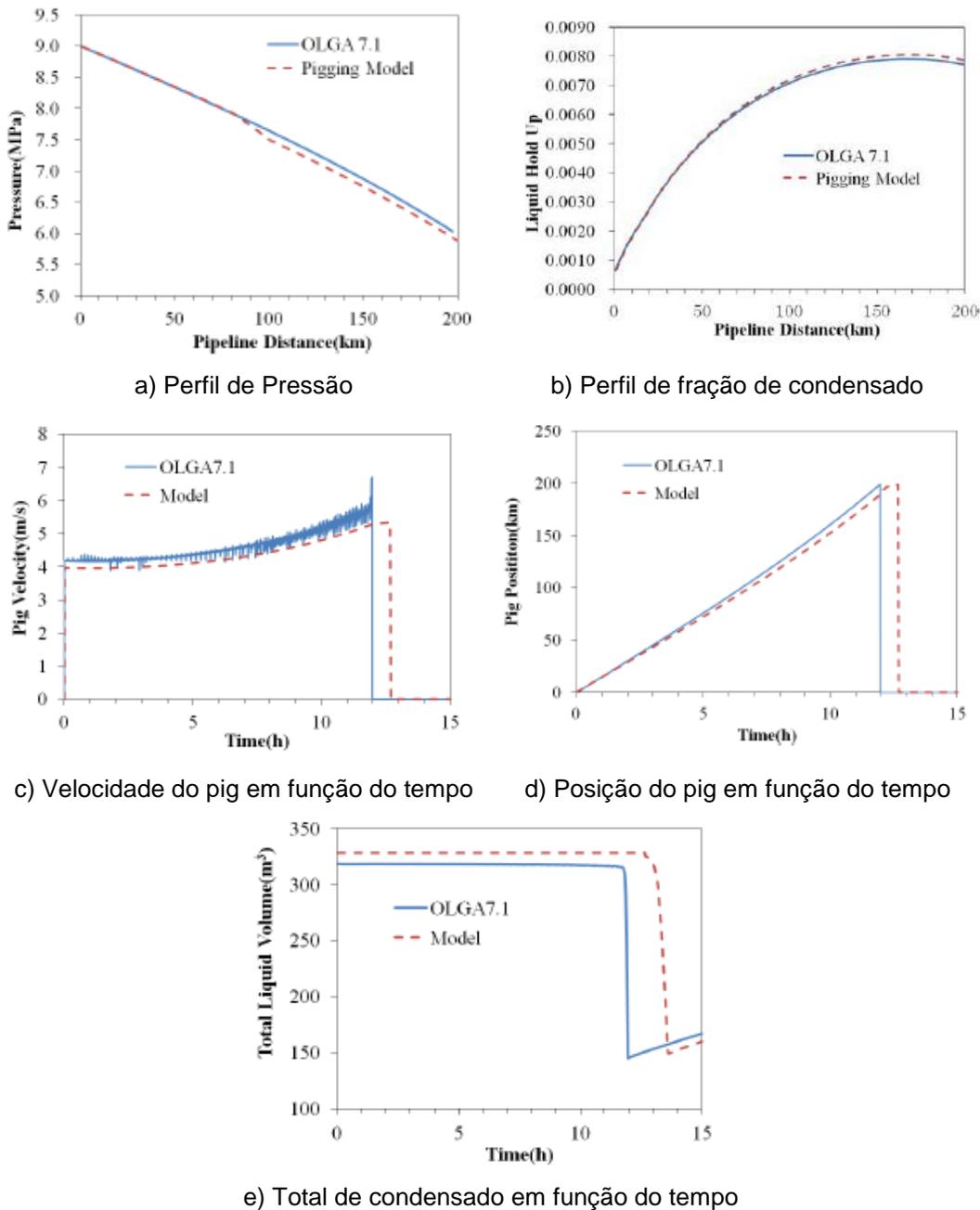
Foi informado por Li e Jia (2013) que o coeficiente global de troca térmica é de  $U_e = 3,0 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$  e que a temperatura ambiente é de  $T_\infty = 3^\circ\text{C}$ .

Foi utilizado como condição de contorno pressão na entrada da tubulação de 90,0 bar, e a pressão de saída igual a 60 bar conforme Li e Jia (2013).

Visando comparar os resultados da presente metodologia com a referência, estimou-se a força de atrito dinâmico como sendo constante e igual a  $F_{dyn} = 10.690 \text{ N}$ . Esta informação não foi disponibilizada na referência, tendo sido estimada a partir do gráfico de distribuição de pressão ao longo do duto, de forma análoga ao utilizado no Caso1. Foi considerado um *pig* com a mesma massa que o *pig* do Caso 1 (614 kg).

Usando o mesmo procedimento que na seção anterior, reproduz-se na Figura 6.13 os principais resultados Li e Jia (2013): distribuição axial de pressão e de fração de líquido, posição e velocidade do *pig* e volume de condensado ao longo do tempo. A partir da descontinuidade no perfil de pressão do modelo de Li e Jia (2013) corresponde ao salto de pressão devido a força de resistência dinâmica do *pig*, na posição igual a aproximadamente 84 km, determinou-se o

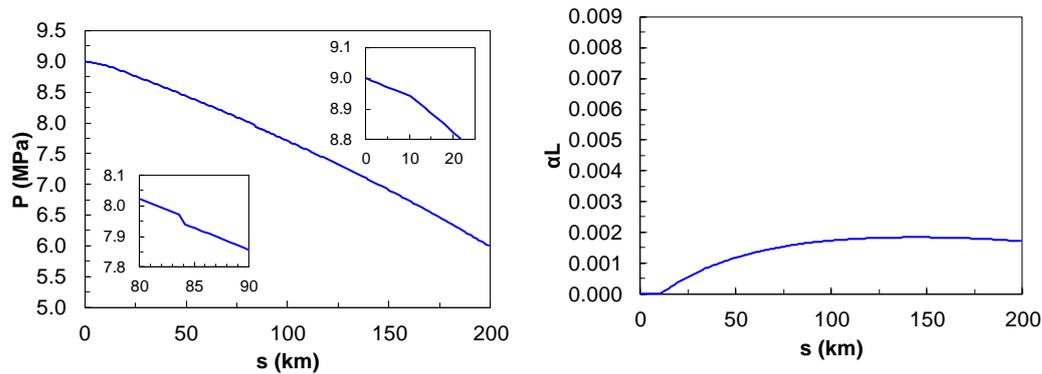
instante de tempo de passagem do *pig* pela referida posição como sendo igual a 9h (Figura 6.13b).



**Figura 6.13 – Resultados da literatura – Fonte: [Li e Jia (2013)]-Caso 2**

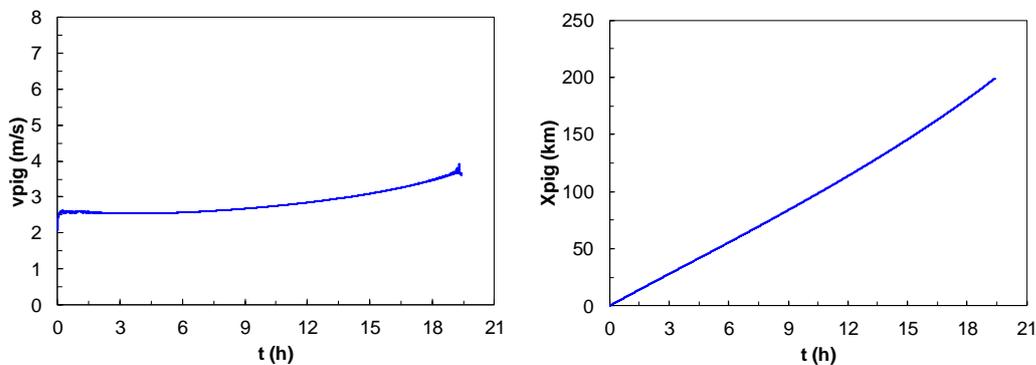
Comparando o perfil de pressão ao longo do duto, Figura 6.14a, com os dados de Ji e Lia (2013), Figura 6.13a, é possível grande semelhança entre as soluções. Neste caso, a influência do volume de condensado não é visível, e para isso foi inserido um *zoom* na figura correspondente à entrada da tubulação, para ser possível visualizar o aumento da perda de carga devido à formação de condensado. Na mesma figura, um outro *zoom* na região do *pig* também foi criado, de forma a permitir visualizar o salto de pressão desvio a força de contato.

Novamente, um perfil semelhante de condensado foi obtido, sendo a quantidade de condensado bem menor, Figura 6.14b.



**Figura 6.14 – Perfil de pressão e fração de líquido em  $t=9$  h,  $x_{pig}=84$  km. Caso 2**

A Figura 6.15a apresenta a variação da velocidade do *pig* com o tempo. Observa-se que o *pig* se desloca com velocidade aproximadamente constante até a metade do intervalo de tempo do percurso, quando então apresenta uma aceleração, a qual ocasiona um aumento na velocidade do *pig* de 1 m/s, de forma análoga ao obtido por Ji e Lia (2013), Figura 6.13c) Uma vez que no presente trabalho a velocidade do *pig* foi menor, naturalmente o *pig* levou mais tempo para chegar ao final do duto. Essas diferenças podem ser atribuídas as diferenças de propriedades do *pig*, pois tanto a força de contato, como a massa do *pig* apresentam grande influência no seu deslocamento.



**Figura 6.15 – Posição e velocidade do pig em função do tempo. Caso 2.**

O volume total de condensado com o tempo é ilustrado na Figura 6.16. Assim como com o modelo do Li e Jia (2013), este volume é constante durante o deslocamento do *pig*, até atingir a saída. Como já mencionado, uma fração de líquido bem inferior foi obtida em relação a referência. Neste caso, as incertezas dos parâmetros das modelagens apresentam um impacto maior, pois o presente modelo termodinâmico (o qual foi bem validado) não apresenta condensado no início do processo (90 bar e 20°C), enquanto o modelo de Li e Jia (2013) já

apresenta uma fração de condensado de 0,0007.

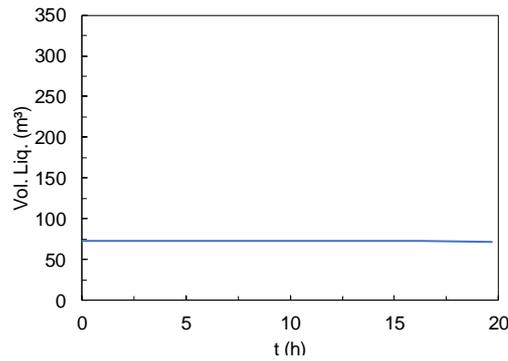


Figura 6.16 –Volume total de condensado ao longo do tempo. Caso 2.

### 6.3 Caso 3: despressurização unilateral

Este caso consiste na análise de um evento de despressurização unilateral para a remoção de um *plug* de hidrato de um *riser*. Como mencionado no Capítulo 1, essa é uma operação frequente para desbloqueio de tubulações. A definição dos níveis de pressão adequados para retirar o *plug* da tubulação é fundamental, para evitar quaisquer danos às instalações.

O perfil de elevação do *riser* é apresentado na Figura 6.17, correspondendo a um perfil tipicamente encontrado na prática. O comprimento total do *riser* é de 11,375 km. A Tabela 6.6 indica as profundidades correspondente a cada extremidade dos elementos do *riser*. As características da tubulação são apresentadas na Tabela 6.7, onde pode-se notar a existência de tubulações com diferentes diâmetros.

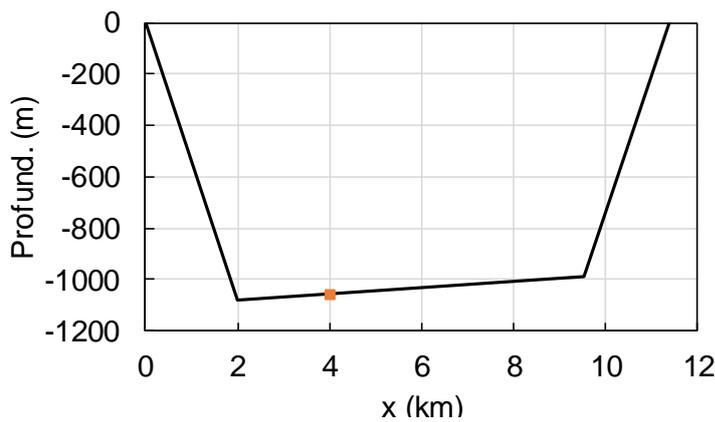


Figura 6.17 – Perfil *riser* e posição inicial do *plug* de hidrato

Tabela 6.6 – Profundidade dos elementos do *riser*

nó	1	2	3	4
Profundidade [m]	0	-1080	-990	0

Tabela 6.7 – Características da tubulação do riser

Comprimento [km]	Diâmetro Interno [mm]	Espessura (mm)	Rugosidade [mm]	Módulo de Elasticidade [GPa]	Coefficiente de Poisson [-]	Condutividade térmica [W/(m k)]
2,000	211	8,89	0,035	211	1,0	15,9
7,530	232	11,0	0,035	211	1,0	15,9
1,850	211	8,89	0,035	211	1,0	15,9

Inicialmente, o gás encontra-se altamente pressurizado e não existe escoamento, devido ao bloqueio da tubulação pelo *plug* de hidrato. O gás no interior do *riser*, encontra-se em equilíbrio térmico com o meio marinho, cuja temperatura varia com a profundidade, conforme apresentado na Figura 6.18. Para estimar o coeficiente de transferência de calor externo entre o *riser* e o meio marinho, considerou o número de Nusselt externo  $Nu_{ex} = h_{ex} D_{ex}/k_{mar} = 140$ , sendo a condutividade da água do mar considerada igual a  $k_{mar} = 0,58 \text{ W/(m.K)}$ . (Incropera, 2008).

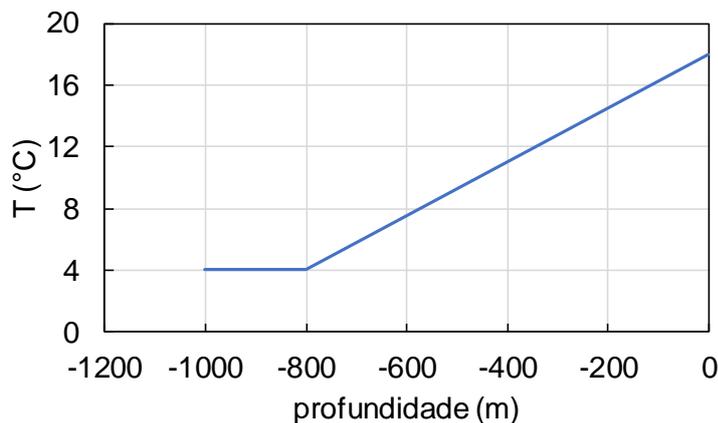


Figura 6.18 – Perfil da Temperatura ambiente

A Tabela 6.8 apresenta as características do *plug* de hidrato (comprimento, massa, força de contato dinâmica, coeficiente de atrito dinâmico). Para a determinação da massa do *plug*, considerou-se a porosidade do mesmo nula, sendo a massa específica do hidrato igual a  $910 \text{ kg/m}^3$ . A posição onde o *plug* de hidrato está preso também é indicada na Figura 6.17.

Tabela 6.8 – Características do plug de hidrato

Comprimento plug (m)	Massa plug (kg)	Força dinâmica (N)	Coefficiente de atrito dinâmico [N/(m/s)]	Posição Inicial (km)
5	192,2	0	250	4

As extremidades do duto são seladas, e reduz-se a pressão em uma das extremidades, com o objetivo de deslocar o *plug* até a saída. Neste processo,

pode ocorrer a formação de condensado. A pressão na extremidade à montante do *plug*, correspondente ao nó 1 é de 196,1 bar. Impõe-se uma pressão de 6,865 bar na extremidade final (nó 4). A distribuição inicial de pressão varia com a profundidade conforme indicado no Capítulo 3.

Devido ao grande diferencial de pressão imposto, assim que a extremidade final da tubulação é despressurizada, o *plug* entra em movimento. A variação de sua posição com o tempo pode ser observada na Figura 6.19, enquanto que sua velocidade de deslocamento é ilustrada na Figura 6.20. Observa-se que devido ao grande diferencial de pressão inicial, o *plug* atinge altas velocidades, apresentando grande deslocamento. No entanto a força de contato do *plug* com a tubulação depende de sua velocidade, i.e., com o aumento da velocidade, a resistência ao seu movimento cresce, e uma desaceleração é induzida. Paralelamente, devido ao deslocamento do *plug*, a pressão de montante é aliviada, reduzindo mais ainda a força para o deslocamento do *plug*. Pode-se observar que após 2 horas do início do deslocamento, o *plug* atinge a base da extremidade final, precisando vencer a resistência gravitacional para chegar na saída, fato este que reduz mais ainda sua velocidade. Após aproximadamente 3 horas do início do processo, a velocidade de deslocamento do *plug* é bem baixa, até este chegar na extremidade de saída, Figura 6.19.

A variação de pressão ao longo do *riser*, para diferentes instantes de tempo pode ser avaliada na Figura 6.21. Na figura, os diferentes instantes de tempo são referenciados com a coordenada onde o *plug* se encontra. Pode-se observa-se a grande diferença de pressão no início do processo, e a rápida despressurização devido ao deslocamento do *plug*, até atingir um novo equilíbrio hidrostático. Analisando a Figura 6.21, o diferencial de pressão devido à força de contato no *plug*, é claramente verificado, o qual, como mencionado, cai com a redução da velocidade do *plug*.

A distribuição de temperatura ao longo do *riser*, assim como a fração de líquido para diferentes posições do *plug* ao longo do *riser* (diferentes instantes de tempo) podem ser analisadas na Figura 6.22 e na Figura 6.23. Analisando o perfil de pressão, juntamente com o de temperatura correspondente a posição do *plug* igual a 6 km, observa-se que devido à grande despressurização, e alta velocidade (dissipação viscosa), ocorre um aumento significativo da temperatura. A medida que o *plug* se desloca, a contínua redução da pressão leva a aumentar a formação do condensado (Figura 6.23).

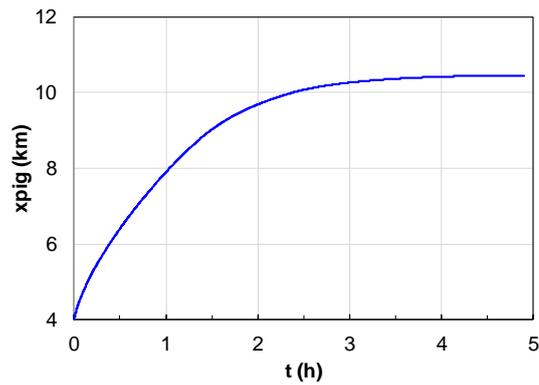


Figura 6.19 – Variação da posição do *plug* com tempo

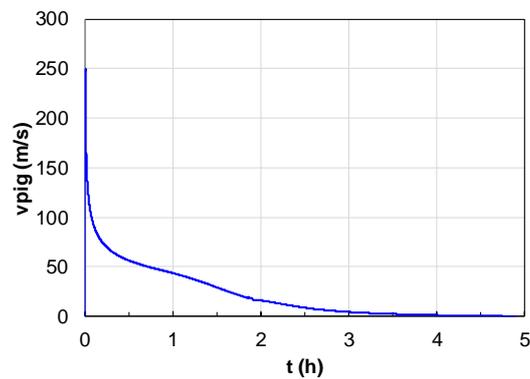


Figura 6.20 – Variação da velocidade do *plug* com tempo

A posição do *plug*, tanto no campo de pressão como no de temperatura pode ser claramente identificada. No primeiro caso, devido a existência do diferencial de pressão relacionado com a força de contato, e no segundo caso, devido aos picos de temperatura, devido a conversão de trabalho de fluxo em energia térmica.

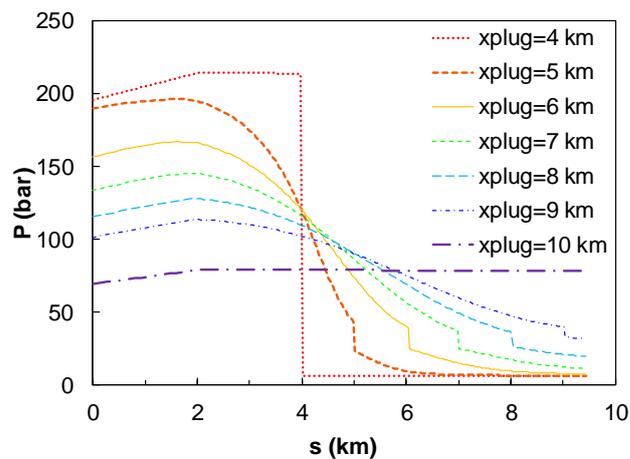
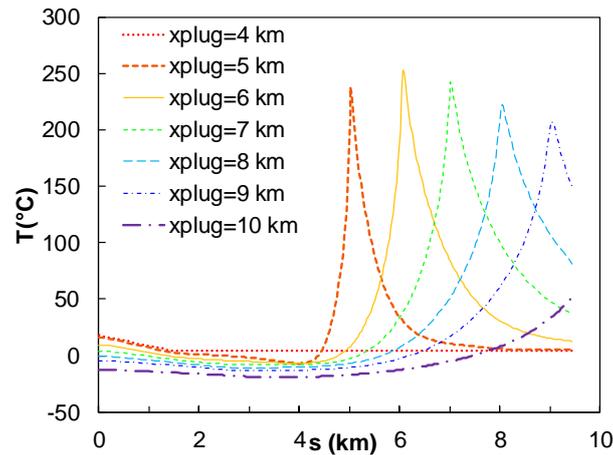
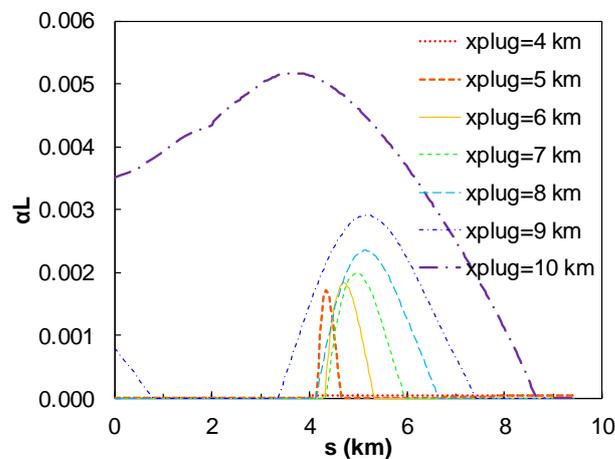


Figura 6.21 – Evolução temporal da pressão ao longo do riser



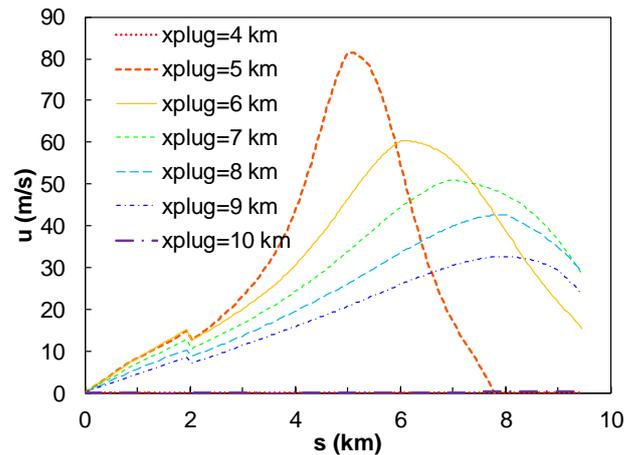
**Figura 6.22 – Evolução temporal da temperatura ao longo do riser**



**Figura 6.23 – Evolução temporal da condensação ao longo do riser**

Analisando a distribuição de condensado ao longo do riser, Figura 6.23, observa-se que inicialmente, o perfil de condensado apresenta uma maior concentração perto do *plug*, mas com a despressurização da tubulação começa a aparecer condensado ao longo de toda a tubulação.

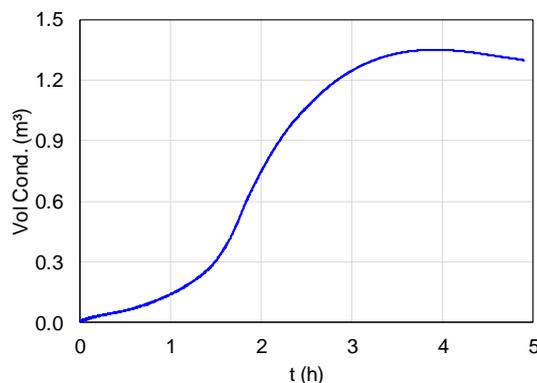
Visando complementar as informações sobre este processo de desbloqueio, apresenta-se na Figura 6.24 o perfil de velocidade do escoamento. Pode-se observar que os picos de velocidade coincidem com a posição do *plug*. É interessante observar a existência de uma queda acentuada de velocidade no km 2. Esta queda localizada ocorre devido ao aumento de diâmetro que ocorre nessa posição, reduzindo assim a velocidade do escoamento.



**Figura 6.24 – Evolução temporal da velocidade ao longo do riser**

Uma vez que a distribuição de condensado foi determinada ao longo do *riser*, pode-se estimar o volume de condensado formado. A Figura 6.25 ilustra o aumento com o tempo da quantidade de condensado formada durante a operação de despressurização. De acordo com as distribuições de temperatura e pressão apresentadas, as quais induziram a formação de condensado, observa-se que após o período inicial de aproximadamente 3 horas, praticamente não há mais formação de condensado, com o volume permanecendo aproximadamente constante. Com a chegada do *plug* na extremidade de saída, observa-se uma pequena redução no volume acumulado de condensado.

Os resultados obtidos com o modelo atual para prever a formação de condensado e o deslocamento do *plug* de hidrato na presença de condensado apresentam-se coerentes, indicando que a presente metodologia pode ser extremamente útil para orientar e planejar operações de despressurização unilateral.



**Figura 6.25 – Evolução temporal do volume de condensado**

## 7 COMENTÁRIOS FINAIS

No presente trabalho, desenvolveu-se uma metodologia para prever o deslocamento de *pig* e *plug* de hidrato na presença de condensados, utilizando o modelo de deslizamento. Esta metodologia possui duas etapas bem distintas: (i) modelo de mudança de fase baseado na equação de estado de Peng-Robinson (ii) acoplamento entre as equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear e energia, com a equação de deslocamento do *pig/plug*, introduzindo todas as não linearidades associadas com as variações das propriedades com o pressão, temperatura e fração de líquido.

O modelo termodinâmico, englobando o equilíbrio de fases e as propriedades termodinâmicas foi validado com dados da literatura e programa comercial de modelos termodinâmicos, com resultados excelentes.

O acoplamento entre as equações de conservação e a equação de estado também foi validado com sucesso. Inicialmente, realizou-se uma validação utilizando a equação de estado de gás ideal, com comparação com solução analítica do problema de Fanno, quando se obteve perfeita concordância entre as soluções.

A seguir, uma segunda validação foi realizada utilizando a equação de Peng-Robinson, e permitindo a formação de condensado, utilizando modelo homogêneo. Esta validação foi realizada comparando-se com dados da literatura, e também apresentou bons resultados.

Uma investigação do desempenho do fator de atrito de Lockhart-Martinelli em comparação com o modelo de fator de atrito de Miller, mostrou a importância de se utilizar um modelo que considere a presença de condensado, representando de forma mais realista o aumento de perda de carga.

Analisou-se dois casos de deslocamento de *pigs* na presença de condensado. Comparações qualitativas com dados da literatura foram realizadas, apresentando resultados satisfatórios. Porém, observou-se que a previsão do volume de condensado foi subestimada, a qual pode em parte ser atribuída ao emprego do modelo homogêneo.

Finalmente, investigou-se uma aplicação de desbloqueio de tubulação com *plug* de hidrato através de depressurização unilateral. Os resultados obtidos

foram totalmente coerentes, indicando um bom desempenho da presente metodologia.

Desse modo, pode-se concluir que o modelo desenvolvido pode ser utilizado para a análise e previsão das operações de passagem de *pig* e de remoção de *plugs* de hidrato na presença de condensado.

Como trabalhos futuros recomenda-se investigar o desempenho do modelo, considerando deslizamento entre as fases. Outra recomendação, consiste na avaliação da hipótese de composição constante. Diferentes correlações para o fator de atrito bifásico também podem ser investigadas.

Recomenda-se ainda, avaliar diferentes cenários de deslocamento de *pigs*, assim como de despressurização unilateral de *plugs* de hidrato.

## Referências bibliográficas

ALRAEESI, F.; AL KAABI, N. **Impacts of Dense Phase Flow on Pipeline Capacity - Case study**. Abu Dhabi International Petroleum Exhibition & Conference. Abu Dhabi: SPE-183358-MS. p. 1-14. 2016.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **NBR 15213: Gás natural e outros combustíveis gasosos - Cálculo do poder calorífico, densidade absoluta, densidade relativa e índice de Wobbe a partir da composição**. Rio de Janeiro. 2008.

BAKER, A.; NIELSEN, K.; GABB, A. Field data teste new holdup, pressure-loss calculation of gas, condensate pipelines. **Oil Gas Journal**, 86:12, 21 Março 1988.

BANKOFF, S. G. A variable density single-fluid model of two-phase flow with particular reference to steam-water flow. **J Heat Transfer**, 82, p. 265-272. 1960.

BARUA, S. **An experimental verification and modification of the McDonald and Baker pigging model for horizontal flow**. Tese de doutorado. Universidade de Tulsa, Texas, EUA. 1982.

BHAGWAT, S.; GHAJAR, A. A flow pattern independent drift flux model based void fraction correlation for a wide range of gas-liquid two-phase flow. **International Journal of Multiphase Flow**, 59, p. 186-205. 2014.

BORUJERDI, A. M.; GHAZANI, A. S. **A non-equilibrium relaxation model for fast depressurization of pipelines**. Annals of Nuclear Energy. [S.l.]: [s.n.]. p. 1-11. 2018.

BURLUTSKIY, E. A one dimensional mathematical model of multi-component fluid flow in pipes and its application to rapid decompression in dry natural gas mixtures. **International Journal of Pressure Vessels and Piping**, p. 30-36. 2013.

BURLUTSKIY, E. Numerical analysis of phase behaviour during rapid decompression of rich natural gases. **Process Safety and Environmental Protection**, 92, n. 6, p. 555-564. 2014.

CAMARGO, R. et al. **On the safety of hydrate remediation by one-sided depressurization**. Proceedings of the 7th International Conference on Gas Hydrates (ICGH). Edinburgh, Scotland, United Kingdom: [s.n.]. p. 1-9. 2011.

CAPUTO, F. et al. Estimation of the damage in a natural gas low line caused by the motion of methane hydrates. **Journal of Natural Gas Science and Engineering**, p. 1222-1231. 2015.

CARMO, R. P. **Algoritmo para cálculo de equilíbrio de fases com precipitação de parafinas**. Dissertação em Engenharia Química - UFRJ. Rio de Janeiro. 2016.

CHEN, J.; RICHARDSON, S.; SAVILLE, G. Modelling of two-phase blowdown from pipelines—I. A hyperbolic model based on variational principles. **Chemical Engineering Science**, v. 50, n. 4, p. 695-713, Fevereiro 1995a.

CHEN, J.; RICHARDSON, S.; SAVILLE, G. Modelling of two-phase blowdown from pipelines—II. A simplified numerical method for multi-component mixtures. **Chemical Engineering Science**, v. 50, n. 13, p. 2173-2187, Julho 1995b.

CHISHOLM, D. A theoretical basis for the Lockhart-Martinelli correlation. **Int. J. Heat Mass transfer**, p. 1767-1778. 1967.

CODDINGTON, P.; MACIAN, R. A study of the performance of void fraction correlations used in the context of drift-flux two-phase flow models. **Nuclear Eng Design**, p. 199-216. 2002.

COELHO, F. M. C. **Simulação numérica de escoamento bifásicos em eventos de despressurização de gasodutos utilizando o modelo homogêneo**. Dissertação em Engenharia Mecânica - PUC-Rio. Rio de Janeiro. 2016.

EGHORIETA, R. A.; AFOLABI, T. A.; PANACHAROENSAWAD, E. Drift flux modeling of transient high-viscosity liquid and gas two-phase flow in horizontal pipes. **J. Petr. Sci. Eng.**, p. 605-617. 2018.

ENGINEERING TOOLBOX. Engineering ToolBox, 2003. Disponível em: <[http://www.engineeringtoolbox.com/overall-heat-transfer-coefficients-d\\_284.html](http://www.engineeringtoolbox.com/overall-heat-transfer-coefficients-d_284.html)>. Acesso em: 10 jul. 2019.

ESMAEILZADEH, F.; MOWLA, D.; ASEMANI, M. Mathematical modeling and simulation of pigging operation in gas and liquid pipelines. **J. Petr. Eng.**, p. 100-106. 2009.

FERNANDES, H. C. S.; NOGUEIRA, J.; ARAÚJO, A. C. B. Resolução de sistemas flash utilizando as equações de estado de Peng-Robinson, Redlich-Kwong e Soave-Redlich-Kwong através do método de substituições sucessivas. **Proc. XX Congr. Bras. Eng. Quím.**, São Paulo - SP, Brasil, p. 15728-15735, 2015.

FOX, R. W. et al. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. 9a. ed. [S.l.]: LTC, 2018.

GEURST, J. A.; VREENEGOR, A. J. N. Nonlinear void-fraction waves in two-phase bubbly flow. **Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP**, v. 39, n. 3, p. 376-386, 1988.

GONÇALVES, M. et al. **Hydrate Plug Movement by One-Sided Depressurization**. Proceedings of the ASME 2012 31st International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering (OMAE2012). Rio de Janeiro: [s.n.]. p. 1-9, 2012.

GROLMAN, E.; FORTUIN, J. M. H. Liquid hold-up, pressure gradient, and flow patterns in inclined gas-liquid pipe flow. **Exp. Therm. Fluid. Sci.**, p. 174-182, 1997.

HAN, Y. F. et al. Differential pressure method for measuring water holdup of oil-water two-phase flow with low velocity and high water-cut. **Exp. Therm. Fluid Sci.**, p. 197-209, 2016.

HANOMA, M. O.; THOMPSON, D. W. Computational of multicomponent phase-equilibria - Part iii: Multiphase equilibria. **CHomp e Chem Eng.**, 8, p. 163-170, 1984.

HARMATHY, T. Z. Velocity of large drops and bubbles in media of infinite or restricted extend. **AIChE J.**, p. 281-288, 1960.

HIRT, C. W.; ROMERO, N. C. **Application of a drift-flux model to flashing in straight pipes.** Los Alamos Scientific Lab. N.Mex. (USA), p. 1-16. 1975.

HONG, Y. R.; CHANG, J. L.; GUO, X. Evaluation of State Equation of natural Gas in Pipeline Transportation. **Advanced Material Research**, p. 936-939, 2012.

HOSSEINALIPOUR, S. M.; SALIMI, A.; KHALILI, A. Z. Transient flow and pigging operation in gas-liquid two-phases pipelines. **Proc. 16th Australasian Fluid Mech Conf.**, Gold Coast, Australia, p. 976-979, 2007.

HUSSAIN, Y. Thermodynamic Models and Physical Properties, Dep. Hem. Eng. Jordan Univ. Sci. Technol, 2008. Disponível em: <[http://www.jusr.edu.jo/~yahussaing/files/Thermodynamic\\_Models.pdf](http://www.jusr.edu.jo/~yahussaing/files/Thermodynamic_Models.pdf)>. Acesso em: 05 out. 2018.

INCROPERA, F.; DEWITT, D. **Fundamentos de Transferência de Calor e Massa.** 7a. ed. [S.l.]: LTC, 2008.

JAMSHIDI, B.; SARKARI, M. Simulation of pigging dynamics in gas-liquid two-phase flow pipelines. **J. Natural Gas Sc. Eng.**, p. 407-414, 2016.

KABADDI, V.; DANNER, R. A modified Souave-Redlich-Kwong Equation of State for Water-Hydrocarbon Phase Equilibria. **Ind Eng Chem Process Des and Dev**, p. 537-541, 1985.

KALLIAPAN, C. S. **Prediction o pressure-temperature phase envelopes of multicomponent hydrocarbon system.** Tese de doutorado - Oklahoma State University. Oklahoma. 1971.

KOHDA, K.; SUZUKAWA, Y.; FURUKAWA, H. New method for analyzing transient flow after pigging scores well. **Oil Gas J**, 1988.

LEE, A. L.; GONZALEZ, M. H.; EARIN, B. E. The viscosity of natural gases. **J Petro Technol - SPE-1340-PA.** p. 997-100, 1966.

LI, Z.; JIA, W. **Dynamic pigging modeling and simulation of condensate gas pipelines.** Proc Pipelines 2013 - ASCE. [S.l.]: [s.n.]. p. 1469-1479. 2013.

LOCKHART, R. W.; MARTINELLI, R. M. Proposed correlation of data for isothermal two-phase flow, two component flow in pipes. **Chem Eng Progr.** p. 39-48, 1976.

LOHRENZ, J.; BRAY, B. G.; CLARK, C. R. Calculating viscosities of reservoir fluids from their compositions. **J Petr Technol - SPE-915-PA**, p. 1171-1176. 1964.

MARÍN, F.; PEREZ, N. Estimación de equilibrio de fases en tuberías de producción de gas natural a través del uso de ecuaciones cúbicas de estado. **Rev. la Fac Ing Univ Central Venezuela**, v. 26, p. 101-109, 2011.

MCDONALD, A. E.; BAKER, O. A method of calculating multiphase flow in pipelines using rubber spheres to control liquid holdup. **Am Pet Inst: API-64-056**, p. 56-68, 1964.

MEHRA, R.; HEIDEMANN, R. A.; AZIZ, K. **Acceleration of the direct substitution method of vapour-liquid equilibrium calculations**. Proc 30th Canadian Ch. Eng. Conf. Edmonton, Canada: [s.n.]. 1980.

MICHELSEN, M. L. Calculation of phase envelopes and critical points for multicomponent mixtures. **Fluid Phase Equilibria**, p. 1-10, 1980.

MICHELSEN, M. L. The isothermal flash problem: part I. Stability. **Fluid Phase Equilibria**, p. 1-19. 1982a.

MICHELSEN, M. L. The isothermal flash problem: Part II. Phase Split Calculation. **Fluid Phase Equilibria**, p. 21-40. 1982b.

MICHELSEN, M. L. Some aspects of multiphase calculations. **Fluid Phase Equilib**, 30, p. 15-29. 1986.

MICHELSEN, M. L.; MOLLERUP, J. M. **Thermodynamic modelling fundamentals and computational aspects**. 2ª. ed. [S.l.]: Tie-Line Publications, 2007.

MUSKAT, M.; MCDOWELL, J. M. An electrical computer for solving phase equilibrium problems. **J. Petr. Tech**, p. 291-298. 1949.

MUZYCHKA, Y. S.; AWAS, M. M. Asymptotic generalizations of the Lockhart-Martinelli method for two phases flows. **J. Fluids Eng.**, 2010.

NETO, A. M. B. **Desenvolvimento de um simulador PVT composicional para fluidos de petróleo**. Dissertação em Engenharia Mecânica - UNICAMP. São Paulo. 2015.

NETO, A. M. B. et al. **Thermodynamic modeling of vapor-liquid equilibrium for petroleum fluids**. Congresso Nacional de Matemática Aplicada à Indústria. São Paulo: [s.n.]. p. 610-619. 2014.

NETO, A. M. B.; BANNWART, A. C. **PVTPetro: A computacional tool for isotherm two-phase PT-Flash calculation in oil-gas system**. COBEQ: Congresso Brasileiro de Engenharia Química. Fortaleza / CE, p. 1-8. 2016.

NGHIEM, Y. S.; AZIZ, K.; LI, Y. K. **A robust iterative method for flash calculations using the Soave-Redlich-Kwong or the Peng-Robinson equation of state**. Soc Petr. Eng. J. - SPE-8285-PA. [S.l.]: [s.n.]. p. 521-530. 1983.

NICHITA, D. V. Phase envelope construction for mixture with many components. **Energy and Fuels**, p. 488-495. 2008.

NICHITA, D. V.; LOIBOVICI, C. F. A rapid and robust method for solving the Rachford-Rice equation using convex transformations, v. 353, p. 38-49, 2013.

NIECKELE, A. O.; BRAGA, A. M.; AZEVEDO, L. F. A. Transient pig motion through gas and liquid pipelines. **J Energy Resour Technol**, v. 123, n. 4, p. 260-269, 2001.

NOVAK, N. et al. Prediction of dew points and liquid dropout of gas condensate mixtures. **Fluid Phase Equilibria**, 457, p. 62-73. 2018.

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**: Series in computational methods in mechanics and thermal sciences. 1ª. ed. [S.I.]: Tayler e Francis, 1980.

PENG, D. Y.; ROBINSON, D. B. A new two-constant equation of state. **Ind Eng Chem Fundam**, 15, p. 59-64. 1976.

PINTO, R. L. A. **Estudo teórico e experimental das forças de resistência do deslocamento de um plugue de gelo em uma tubulação**. Dissertação em Engenharia Mecânica - UFRJ. Rio de Janeiro, p. 1-130. 2015.

POLING, B.; PRAUSNITZ, J.; O'CONNELL, J. **The Properties of Gases and Liquids**. 5a. ed. [S.I.]: McGraw-Hill, 2001.

POWELL, M. J. A hybrid method for nonlinear equation. **Proc Numerical methods for nonlinear algebraic equations**, London: Gordon e Breach. p. 87-117, 1970.

PRAUSNITZ, J. M.; LICHTENTHALER, R. N.; AZEVEDO, E. G. **Termodinamica Molecular de los Equilibrios de Fase**. 3a. ed. Madrid: Hall P, 200.

RACHFORD, H. H.; RICE, J. D. Procedure for use of electronic digital computers in calculating flash vaporization hydrocarbon equilibrium. **J Petr Eng - SPE-952327-G**, p. 136-137. 1952.

ROSA, A. J.; CARVALHO, R.; XAVIER, J. A. D. **Engenharia de reservatórios de petróleo**. [S.I.]: Interciência, 2006.

ROWE, A. M. The critical composition method - A new convergence pressure concept. **Soc Petr Eng J**, p. 54-61. 1967.

SABER, N. **Phase behaviour prediction for ill-defined hydrocarbon mixtures**. University of Alberta. [S.I.]. 2011.

SANDLER, S. I. **Chemical, Biochemical and Engineering Thermodynamics Composites**. 4a. ed. [S.I.]: John Wiley & Sons, 2006.

SHEN, X.-D. et al. Fluids characteristics of methane hydrate slurry in the transition region in a high-pressure flow loop. **J Nat Gas Sci Eng**, p. 66-73. 2018.

SIDDIQUI, F. A derivative-less approach for generating phase envelopes. **Oil Gas Res**, p. 1-6. 2015.

SLOAN, E. D., **Hydrate Engineering**, Monografia 21, Richardson: Society of Petroleum Engineers, 2000

SLOAN, E. D.; KOH, C. A. **Clathrate Hydrate of Natural Gases**. 3ª. ed. Boca Raton: CRC Press, 2008.

SLOAN, E. D.; KOH, C.; SUM, A. K. **Natural Gas Hydrates in Flow Assurance**. 1ª. ed. Burlington: Gulf Prof. Publ., 2011.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. **Introduction of Chemical Engineering Thermodynamics**. 7. ed. [S.l.]: McGraw-Hill, 2004.

SOAVE, G. Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state. **Chem Eng Sci**, p. 1197-1203. 1972.

TAITEL, Y.; DUKLER, A. E. A model for predicting flow regime transitions in horizontal and near horizontal gas-liquid flow. **AIChE J**, p. 47-55. 1976.

TALAIE, M. R.; DEILAMANI, K. S. A new approach for modeling of gas-condensate flow through pipelines under industrial operating conditions. **J Nat Gas Sci Eng**, p. 540-555. 2014.

TEIXEIRA, J. H. C. **Caracterização térmica de tubos de exploração de petrolíferas em águas profundas**. Dissertação - Faculdade de Ciências Exatas e da Engenharia - Univerdade da Madeira. [S.l.]. 2016.

TOLMASQUIM, S. T. **Projeto e controle da operação de passagem de pigs em dutos**. Dissertação em Engenharia mecânica - PUC-Rio. Rio de Janeiro. 2004.

TOLMASQUIM, S. T.; NIECKELE, A. O. Design and control of pig operations through pipelines. **J Petr Sci Eng**, p. 102-110. 2008.

TORBATI, R. Z. **Volume Averaging of multiphase flows with hydrate formation in subsea pipelines**. Dissertação em engenharia - Universidade de Newfoundland. Newfoundland, Canada, p. 1-85. 2015.

TURNEY, D. E. et al. Reform of the drift-flux model of multiphase flow in pipes, wellbores, and reactor vessels. **Chem Eng Sci**, p. 251-258. 2018.

WALLIS, G. B. **One dimensional twophase flow**. 1st. ed. New York, NY, USA: McGraw Hill, 1969.

WYLIE, E. B.; STREETER, V. **Fluid Transient**. [S.l.]: MecGraw-Hill Int Book Co, 1978.

XIAO, J. J. et al. **Predicting hydrate plug movement during subsea flowline depressurization operations**. Proc Offshore Tech Conf - OTC-8728-MS. Houston - Texas, USA: [s.n.]. p. 1-10, 1998.

XU, X. X.; GONG, J. Pigging simulation for horizontal gas-condensate pipelines with low-liquid loading. **Journal Petroleum Science engineering**, 48 (3-4), p. 272-280. 2005.

ZUBER, N.; FIDLAY, J. A. Average volumetric concentration in two-phase flow systems. **Journal Heat Transfer**, 87, n. 4, p. 453-468. 1965.

# Apêndice

## A. Termos de deslizamento

Nas seções deste apêndice apresentam-se relações que relacionam grandezas das fases com variáveis de mistura.

### A.1. Fluxo de Deslizamento de Quantidade de Movimento, J

O fluxo de deslizamento de quantidade de movimento

$$J = \frac{\alpha_G \alpha_L \rho_G \rho_L}{\rho_m} u_r^2 \quad ; \quad u_r = u_G - u_L \quad (\text{A.1})$$

Este termo é definido como

$$J = \alpha_L \rho_L u_L^2 + \alpha_G \rho_G u_G^2 - \rho_m u_m^2 \quad (\text{A.2})$$

Substituindo na equação acima a definição de velocidade de mistura, ponderada pela massa  $u_m$ , Eq. (3.2.4), e multiplicando pela massa específica da mistura,  $\rho_m$ , Eq. (3.2.3),

$$\begin{aligned} \rho_m J &= (\alpha_L \rho_L + \alpha_G \rho_G)(\alpha_L \rho_L u_L^2 + \alpha_G \rho_G u_G^2) \\ &\quad - (\alpha_L \rho_L u_L + \alpha_G \rho_G u_G)(\alpha_L \rho_L u_L + \alpha_G \rho_G u_G) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Expandindo as multiplicações:

$$\begin{aligned} \rho_m J &= (\alpha_L^2 \rho_L^2 u_L^2 + \alpha_L \rho_L \alpha_G \rho_G u_G^2 + \alpha_G \rho_G \alpha_L \rho_L u_L^2 + \alpha_G^2 \rho_G^2 u_G^2) \\ &\quad - (\alpha_L^2 \rho_L^2 u_L^2 + 2\alpha_G \rho_G u_G \alpha_L \rho_L u_L + \alpha_G^2 \rho_G^2 u_G^2) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Organizando:

$$\begin{aligned} \rho_m J &= \alpha_G \rho_G \alpha_L \rho_L u_G^2 + \alpha_G \rho_G \alpha_L \rho_L u_L^2 - 2\alpha_G \rho_G \alpha_L \rho_L u_G u_L \\ &= \alpha_G \rho_G \alpha_L \rho_L (u_G^2 - 2u_G u_L + u_L^2) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$$J = \alpha_G \alpha_L \frac{\rho_G \rho_L}{\rho_m} (u_G - u_L)^2 \quad (\text{A.6})$$

### A.2. Termo de Deslizamento, $\mathbb{K}_2$

O termo  $\mathbb{K}_2$  está associado com a variação espacial da entalpia, e surge ao somarmos os termos convectivos de entalpia das equações de energia de cada fase e subtrairmos de grandezas médias

$$\mathbb{K}_2 = \alpha_G \rho_G h_G u_G + \alpha_L \rho_L h_L u_L - \rho_m h_m u_m \quad (\text{A.7})$$

multiplicando pela massa específica da mistura,  $\rho_m$ , Eq. (3.1.7), substituindo a velocidade e entalpia de mistura, ponderadas pela massa ( $u_m$ , Eq. (3.1.8) e  $h_m$ , Eq. (3.1.33)) tem-se

$$\begin{aligned} \mathbb{K}_2 \rho_m &= (\alpha_L \rho_L + \alpha_G \rho_G) (\alpha_G \rho_G h_G u_G + \alpha_L \rho_L h_L u_L) \\ &\quad - (\alpha_G \rho_G h_G + \alpha_L \rho_L h_L) (\alpha_L \rho_L u_L + \alpha_G \rho_G u_G) \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Expandindo as multiplicações e arrumando:

$$\mathbb{K}_2 \rho_m = \alpha_G \alpha_L \rho_G \rho_L (h_G u_G + h_L u_L - h_G u_L - h_L u_G) \quad (\text{A.9})$$

Organizando:

$$\mathbb{K}_2 = \alpha_G \alpha_L \frac{\rho_G \rho_L}{\rho_m} (h_G - h_L) (u_G - u_L) \quad (\text{A.10})$$

### A.3. Termo de Deslizamento, $\mathbb{H}_2$

Para criar o termo  $\mathbb{H}_2$ , proporcional a gradiente de  $P$ , surge ao somarmos as equações de energia de cada fase e subtrairmos de grandezas médias

$$\mathbb{H}_2 = u_G \alpha_G + u_L \alpha_L - u_m = u_G \alpha_G + u_L \alpha_L - \frac{(\rho_G u_G \alpha_G + \rho_L u_L \alpha_L)}{\rho_m} \quad (\text{A.11})$$

Multiplicando a equação anterior pela massa específica da mistura,  $\rho_m$ , Eq. (3.1.7),

$$\mathbb{H}_2 \rho_m = u_G \alpha_G (\rho_G \alpha_G + \rho_L \alpha_L) + u_L \alpha_L (\rho_L \alpha_L + \rho_G \alpha_G) - (\rho_G u_G \alpha_G + \rho_L u_L \alpha_L) \quad (\text{A.12})$$

Expandindo as multiplicações:

$$\begin{aligned} \mathbb{H}_2 \rho_m &= \rho_G u_G \alpha_G \alpha_G - \rho_G u_G \alpha_G + \rho_L u_G \alpha_G \alpha_L + \rho_L u_L \alpha_L \alpha_L - \rho_L u_L \alpha_L \\ &\quad + \rho_G u_L \alpha_L \alpha_G \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Sabendo que  $\alpha_G + \alpha_L = 1$ , e agrupando  $\alpha_G \alpha_L$

$$\mathbb{H}_2 \rho_m = -\rho_G u_G (\alpha_G \alpha_L) + \rho_L u_G (\alpha_G \alpha_L) - \rho_L u_L (\alpha_G \alpha_L) + \rho_G u_L (\alpha_G \alpha_L) \quad (\text{A.14})$$

obtem-se

$$\mathbb{H}_2 = (\alpha_G \alpha_L) \left( \frac{(\rho_L - \rho_G)}{\rho_m} (u_G - u_L) \right) \quad (\text{A.15})$$

## B. Propriedades Termodinâmicas

Nesse apêndice serão apresentadas as propriedades termodinâmicas dos componentes utilizados.

### B.1. Massa Molecular e Propriedades Críticas

Componente	MM (kg/kmol)	$T_c$ (K)	$P_c$ (bar)	$V_c$ (cm <sup>3</sup> /mol)	$\omega$
CH <sub>4</sub> (C1)	160,430	190,56	45,99	98,60	0,011
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (C2)	300,700	305,32	48,72	145,50	0,099
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> (C3)	440,970	369,83	42,48	200,00	0,152
i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (i-C4)	581,230	407,85	36,40	255,00	0,186
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (n-C4)	581,230	425,12	37,96	262,70	0,200
i-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> (i-C5)	721,500	460,39	33,81	311,00	0,229
n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> (n-C5)	721,500	469,70	33,70	308,30	0,252
n-C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> (C6)	861,770	507,60	30,25	368,00	0,300
n-C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> (C7)	100,204	540,20	27,40	428,00	0,350
CO <sub>2</sub>	440,100	304,12	73,74	98,00	0,225
N <sub>2</sub>	280,140	126,20	33,98	94,07	0,037
H <sub>2</sub>	20,158	32,97	12,93	55,95	-0,216
H <sub>2</sub> S	340,476	337,32	89,40	64,20	0,081
H <sub>2</sub> O	180,153	647,14	220,60	90,10	0,344
O <sub>2</sub>	319,988	154,59	50,43	73,37	0,025

### B.2. Parâmetro Binário

	C1	C2	C3	iC4	nC4	iC5	nC5	C6	C7	CO2	N2	H2	H2S	H2O	O2
C1	0,0000	0,0527	0,0512	0,0497	0,0497	0,0483	0,0483	0,0468	0,0433	0,0512	0,0529	0,0556	0,0522	0,0539	0,0525
C2	0,0428	0,0000	0,0399	0,0384	0,0384	0,0370	0,0370	0,0355	0,0320	0,0399	0,0416	0,0443	0,0409	0,0426	0,0411
C3	0,0315	0,0300	0,0000	0,0271	0,0271	0,0257	0,0257	0,0242	0,0207	0,0286	0,0302	0,0330	0,0296	0,0313	0,0298
iC4	0,0202	0,0187	0,0173	0,0000	0,0000	0,0143	0,0143	0,0129	0,0094	0,0173	0,0189	0,0216	0,0183	0,0200	0,0185
nC4	0,0202	0,0187	0,0173	0,0000	0,0000	0,0143	0,0143	0,0129	0,0094	0,0173	0,0189	0,0216	0,0183	0,0200	0,0185
iC5	0,0089	0,0074	0,0060	0,0045	0,0045	0,0000	0,0000	0,0016	-0,0019	0,0060	0,0076	0,0103	0,0070	0,0087	0,0072
nC5	0,0089	0,0074	0,0060	0,0045	0,0045	0,0000	0,0000	0,0016	-0,0019	0,0060	0,0076	0,0103	0,0070	0,0087	0,0072
C6	-0,0024	-0,0039	-0,0054	-0,0068	-0,0068	-0,0083	-0,0083	0,0000	-0,0133	-0,0054	-0,0037	-0,0010	-0,0043	-0,0026	-0,0041
C7	-0,0297	-0,0312	-0,0326	-0,0341	-0,0341	-0,0356	-0,0356	-0,0370	0,0000	-0,0326	-0,0310	-0,0283	-0,0316	-0,0299	-0,0314
CO2	0,0316	0,0301	0,0286	0,0272	0,0272	0,0257	0,0257	0,0243	0,0208	0,0000	0,0303	0,0330	0,0297	0,0314	0,0299
N2	0,0445	0,0430	0,0415	0,0401	0,0401	0,0386	0,0386	0,0372	0,0336	0,0416	0,0000	0,0459	0,0426	0,0443	0,0428
H2	0,0654	0,0640	0,0625	0,0610	0,0610	0,0596	0,0596	0,0581	0,0546	0,0625	0,0642	0,0000	0,0636	0,0652	0,0638
H2S	0,0396	0,0381	0,0367	0,0352	0,0352	0,0338	0,0338	0,0323	0,0288	0,0367	0,0384	0,0411	0,0000	0,0394	0,0379
H2O	0,0525	0,0511	0,0496	0,0481	0,0481	0,0467	0,0467	0,0452	0,0417	0,0496	0,0513	0,0540	0,0507	0,0000	0,0509
O2	0,0412	0,0398	0,0383	0,0369	0,0369	0,0354	0,0354	0,0340	0,0304	0,0383	0,0400	0,0427	0,0394	0,0410	0,0000

**B.3. Coeficientes correlação capacidade térmica**

<b>Componente</b>	$a_0$	$a_1 \times 10^3$	$a_2 \times 10^5$	$a_3 \times 10^8$	$a_4 \times 10^{11}$
CH <sub>4</sub> (C1)	4,680	-8,975	3,631	-3,407	1,091
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (C2)	4,178	-4,427	5,660	-6,651	2,487
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> (C3)	3,847	5,131	6,011	-7,893	3,079
i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (i-C4)	5,547	5,536	8,057	-10,571	4,134
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (n-C4)	3,351	17,883	5,477	-8,099	3,243
i-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> (i-C5)	7,554	-0,368	11,846	-14,939	5,753
n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> (n-C5)	1,959	38,191	2,434	-5,175	2,165
n-C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> (C6)	8,831	-0,166	14,302	-18,314	7,124
n-C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> (C7)	9,634	4,156	15,494	-20,066	7,770
CO <sub>2</sub>	4,266	-3,438	1,319	-1,331	0,488
N <sub>2</sub>	3,259	1,356	1,502	-2,374	1,056
H <sub>2</sub>	4,395	-4,186	1,405	-1,564	0,632
H <sub>2</sub> S	2,883	3,681	-0,772	0,692	-0,213
H <sub>2</sub> O	3,539	-0,261	0,007	0,157	-0,099
O <sub>2</sub>	3,630	-1,794	0,658	-0,601	0,179

## C.Escoamento de Fanno

As equações que governam o escoamento de Fanno (Fox *et al.*, 2018), i.e., escoamento 1D de gás ideal ao longo de uma tubulação horizontal (com diâmetro  $D$  constante), com atrito e isolado, são apresentadas a seguir.

- Equações de estado para gás ideal

$$\rho = \frac{P}{R T} \quad \rightarrow \quad \frac{P_1}{\rho_1 T_1} = \frac{P_2}{\rho_2 T_2} \quad (\text{C.1})$$

$$h_2 - h_1 = cp (T_2 - T_1) \quad (\text{C.2})$$

- Conservação de massa

$$\rho_1 V_1 = \rho_2 V_2 \quad (\text{C.3})$$

- Conservação de quantidade de movimento linear

$$R_x/A + (P_1 - P_2) = \rho_2 V_2^2 - \rho_1 V_1^2 \quad (\text{C.4})$$

onde

$$\frac{dR_x}{A} = - \frac{\tau_s \pi D}{\pi D^2/4} dx \quad ; \quad \tau_s = - \frac{f}{4} \frac{1}{2} \rho V^2 \quad (\text{C.5})$$

sendo  $\tau_s$  a tensão cisalhante na parede,  $f$  é o fator de atrito, o qual depende do Reynolds ( $Re = \rho V D / \mu$ ). No entanto, considerando a viscosidade dinâmica  $\mu$  aproximadamente constante, o número de Reynolds é constante ao longo do duto, assim como o fator de atrito.

- Conservação de energia

$$h_1 + \frac{V_1^2}{2} = h_2 + \frac{V_2^2}{2} \quad \rightarrow \quad h_{o1} = h_{o2} \quad \rightarrow \quad T_{o1} = T_{o2} \quad (\text{C.6})$$

Como o escoamento é adiabático, a entalpia total  $h_o$  se conserva, logo a temperatura de estagnação  $T_o$  também é constante.

- Segunda lei da termodinâmica

$$ds > 0 \quad ; \quad s_2 - s_1 = cp \ln \left( \frac{T_2}{T_1} \right) - R \ln \left( \frac{P_2}{P_1} \right) \quad (\text{C.7})$$

Devido ao atrito e sendo o duto isolado, a entropia  $s$  deve crescer sempre, podendo ser quantificada em função de pressão e temperatura, pela expressão

indicada na equação acima.

Adimensionalizando as equações de conservação, observa-se que este escoamento é governado pelo número de Mach  $M$

$$M = \frac{V}{c} \quad ; \quad c = \sqrt{k R T} \quad (\text{C.8})$$

onde  $c$  é a velocidade do som,  $k = c_p/c_v$  é a razão dos calores específicos a pressão e volume constantes

Devido à restrição da 2ª lei da termodinâmica para o escoamento de Fanno, pode-se demonstrar que o número de Mach cresce ao longo de um duto, para escoamento subsônico até o Mach crítico igual a 1. Caso o escoamento seja supersônico, o inverso ocorre, isto é, o número de Mach decresce ao longo do duto até o Mach crítico igual a 1.