

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO ESCOLA POLITÉCNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

ESTUDO NUMÉRICO DE ESCOAMENTOS EM SEPARADORES
SUPERSÔNICOS

Caio Innocenti Teixeira

São Paulo

2017

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO ESCOLA POLITÉCNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

ESTUDO NUMÉRICO DE ESCOAMENTOS EM SEPARADORES
SUPERSÔNICOS

Trabalho de formatura apresentado à
Escola Politécnica da Universidade de
São Paulo para obtenção do título de
Graduação em Engenharia

Caio Innocenti Teixeira

Orientador: Prof. Dr. Julio Romano
Meneghini

Área de Concentração: Engenharia
Mecânica

São Paulo

2017

Catálogo-na-publicação

Innocenti Teixeira, Caio

Estudo Numérico de Escoamentos em Separadores Supersônicos / C.
Innocenti Teixeira -- São Paulo, 2017.
86 p.

Trabalho de Formatura - Escola Politécnica da Universidade de São
Paulo. Departamento de Engenharia Mecânica.

1.Dinâmica dos Fluidos Computacional 2.E escoamentos Compressíveis
3.Ondas de Choque 4.Separadores Supersônicos I.Universidade de São Paulo.
Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Mecânica II.t.

RESUMO

A descoberta de grandes quantidades de gás natural em poços de petróleo na região do pré-sal brasileiro tem aumentado e o gás oriundo desses poços apresenta diversos contaminantes, tais como CO_2 , H_2S , vapor d'água e partículas sólidas. Para que esse gás seja eficientemente transportado para unidades de processamento e distribuição onshore, deve-se remover alguns desses contaminantes diretamente nas plataformas offshore.

Assim, torna-se necessário o desenvolvimento de novas soluções tecnológicas compactas e eficientes que realizem a separação dos componentes indesejáveis, uma vez que unidades de processamento de separação tradicionais demandam grande espaço de instalação restringindo sua aplicação em unidades offshore.

O dispositivo chamado separador supersônico tem mostrado grande potencial na separação do gás natural com composição elevada de CO_2 (acima de 20%), característica apresentada pelo gás encontrado nos poços do pré-sal brasileiro. Através do bocal convergente-divergente do separador supersônico, é realizada a expansão do gás, que por sua vez, terá sua temperatura rebaixada permitindo assim a condensação de algumas substâncias indesejáveis, tal como o CO_2 . Por fim, a separação da parcela líquida do fluido é feita por intermédio de uma centrifugação aplicada que possibilita a sua coleta no entorno das paredes do bocal por meio de coletores.

O estudo tem como objetivo investigar, a partir de simulações numéricas, o comportamento do gás natural com diferentes composições de metano (CH_4) e gás carbônico (CO_2) através de separadores supersônicos. O código comercial de simulação numérica de fluidos (*CFD - Computational Fluid Dynamics*) ANSYS Fluent é utilizado para a realização das simulações. Diferentes configurações são empregadas nas simulações possibilitando a análise dos efeitos dos diferentes modelos de gás real, da pressão e da temperatura de entrada, da composição do gás e do modelo de turbulência.

Palavras-chave: Escoamento Compressível. Ondas de Choque. Separadores Supersônicos. Simulação Numérica. Mecânica dos Fluidos Computacional.

ABSTRACT

The discovery of large quantities of natural gas in oil wells in the Brazilian pre-salt region has increased and the gas from these wells has several contaminants, such as CO₂, H₂S, water vapor and solid particles. In order to this gas be efficiently transported to onshore processing and distribution units, it is important that some of these contaminants can be removed directly in offshore platforms.

In this context, it is necessary to develop new compact and efficient technological solutions that perform the separation of undesirable components, since the traditional separation processing units require large installation space, restricting their application in offshore units.

The device called supersonic separator has shown great potential in the separation of natural gas with high CO₂ composition (above 20%), characteristic of the gas found in the Brazilian pre-salt wells. Through the convergent-divergent nozzle of the supersonic separator, the expansion of the gas is achieved, which in turn will have its temperature reduced allowing the condensation of some undesirable substances, such as the CO₂. Finally, the separation of the liquid portion of the fluid is done by means of an applied centrifugation that allows its collection around the walls of the nozzle via collectors.

The study aims to investigate, from numerical simulations, the behavior of natural gas with different compositions of methane (CH₄) and carbon dioxide (CO₂) through supersonic separators. The commercial Fluid Dynamics Simulation (CFD) code ANSYS Fluent is used to perform the simulations. Different configurations are employed in the simulations allowing the analysis of the effects of real gas models, inlet pressure, inlet temperature, gas composition and turbulence models.

Keywords: Compressible Flow. Shock Waves. Supersonic Separators. Numerical Simulation. Computational Fluid Dynamics.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Diagrama de Compressibilidade do Nitrogênio [9].....	15
Figura 2 – Diagrama generalizado de compressibilidade [9].....	17
Figura 3 – Onda de choque normal [10]	25
Figura 4 – Escoamentos unidimensional e quasi-unidimensional [10].....	28
Figura 5 – Bocal (acima) e difusor (abaixo) supersônicos [10].....	29
Figura 6 – Visão geral do método de solução Pressure-Based [13].....	46
Figura 7 – Visão geral do método de solução Density-Based [13].....	47
Figura 8 – Diagrama esquemático do separadore supersônico [15].	51
Figura 9 – Malha computacional na região da onda de choque	56
Figura 10 – Campo de Número de Mach – Pressure-Based, Redlich-Kwong.....	58
Figura 11 – Campo de Pressão Estática (Pa) – Pressure-Based, Redlich-Kwong	59
Figura 12 – Campo de Temperatura estática (K) - Pressure-Based, Redlich-Kwong	59
Figura 13 – Campo de Temperatura Estática (K) – Zoom na Onda de Choque	60
Figura 14 – Diagrama generalizada com propriedades do escoamento	67
Figura 15 – Diagrama de fases do CO ₂	79

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Modelos de Turbulência [12]	40
Tabela 2 – Principais dimensões do separador supersônico	52
Tabela 3 – Propriedades reduzidas a 10 e 100bar em $x = 0,37 m$	66
Tabela 4 – Quadro comparativo entre simulação e diagrama generalizado.....	67
Tabela 5 – Conversão das frações mássicas em frações molares.....	77
Tabela 6 – Estados dos componentes do gás natural	79

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1 – Comparação do perfil de pressão dos modelos.....	51
Gráfico 2 – Número de Mach no eixo em função do refinamento radial	55
Gráfico 3 – Y+ em função do refino da malha no sentido radial.....	55
Gráfico 4 - Y+ em função do refino da malha no sentido radial e do Bias Factor	57
Gráfico 5 – Número de Mach no eixo em função do refinamento longitudinal	57
Gráfico 6 – Número de Mach ao longo da linha de centro do dispositivo.....	63
Gráfico 7 – Pressão estática ao longo da linha de centro do dispositivo	63
Gráfico 8 – Temperatura estática ao longo da linha de centro do dispositivo	64
Gráfico 9 – Massa específica ao longo da linha de centro do dispositivo	64
Gráfico 10 – Fator de compressibilidade no eixo do separador.....	65
Gráfico 11 – Número de Mach a 1bar ao longo da linha central do dispositivo.....	69
Gráfico 12 – Número de Mach a 10bar ao longo da linha central do dispositivo	69
Gráfico 13 – Número de Mach a 100bar ao longo da linha central do dispositivo....	70
Gráfico 14 – Número de Mach a 200bar ao longo da linha central do dispositivo....	70
Gráfico 15 – Número de Mach para diferentes pressões de entrada.....	71
Gráfico 16 – Número de Mach a 288K no eixo do separador supersônico	72
Gráfico 17 – Número de Mach a 313K no eixo do separador supersônico	72
Gráfico 18 – Número de Mach a 343K no eixo do separador supersônico	73
Gráfico 19 – Número de Mach a 373K no eixo do separador supersônico	73
Gráfico 20 – Número de Mach a diferentes temperaturas de entrada.....	74
Gráfico 21 – Efeitos da composição do gás sobre o número de Mach	75
Gráfico 22 – Efeitos da composição do gás sobre a pressão estática.....	76
Gráfico 23 – Efeitos da composição do gás sobre a temperatura estática	76
Gráfico 24 – Efeitos da composição do gás sobre a massa específica.....	77
Gráfico 25 – Pressões parciais dos componentes para diferentes composições	78
Gráfico 26 – Efeitos do modelo de turbulência a 100bar e 288K (metano)	82
Gráfico 27 – Efeitos do modelo de turbulência a 200bar e 343K (60% CH ₄ e 20%CO ₂)	82

LISTA DE SÍMBOLOS

p	Pressão
v	Volume específico
T	Temperatura
R	Constante específica dos gases
e	Energia interna
h	Entalpia
q	Calor recebido pelo sistema
w	Trabalho recebido pelo sistema
s	Entropia
$T_0, h_0, \dot{p}_0$ e ρ_0	Propriedades na estagnação
a	Velocidade do som
M	Número de Mach
M_{th}	Número de Mach na garganta do bocal
u	Velocidade no sentido do escoamento
p_s	Pressão na saída do bocal
p_B	<i>Back pressure</i>
μ_t	Viscosidade do turbilhão
P_{inlet}	Pressão estática na seção de entrada
$P_{inlet,T}$	Pressão total na seção de entrada
P_{outlet}	Pressão estática na seção de saída
$T_{inlet,T}$	Temperatura total na seção de entrada
Z	Fator de Compressibilidade
T_C	Temperatura crítica
P_C	Pressão crítica
V_C	Volume específico crítico
ω	Fator acêntrico

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
2	OBJETIVO	13
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	14
3.1	Escoamento Compressível	14
3.1.1	Termodinâmica	14
3.1.2	Coeficiente de Compressibilidade	21
3.1.3	Equações que regem escoamentos compressíveis	22
3.1.4	Condições de Estagnação	23
3.2	Choque Normal	24
3.3	Equações que regem escoamentos quasi-unidimensionais.....	27
3.4	Escoamento em bocais supersônicos.....	29
3.5	CFD – Computational Fluid Dynamics	31
3.5.1	Código CFD	31
3.5.2	Distância Adimensional da Parede y^+	33
3.5.3	Modelos de Gás Real	34
3.5.4	Modelagem de Turbulência	37
3.5.5	Pressure-Based e Density-Based Solvers	45
4	MATERIAS E MÉTODOS	48
4.1	Materiais	48
4.2	Metodologia.....	48
4.3	Análise dos resultados	49
5	RESULTADOS E ANÁLISES.....	50
5.1	Verificação de Modelo Computacional.....	50
5.2	Geometria Computacional.....	51
5.3	Método Computacional	53

5.4	Malha Computacional	54
5.4.1	Independência da Malha	54
5.5	Análise de Número de Mach, Pressão e Temperatura.....	58
5.6	Efeitos do Modelo de Gás Real	61
5.6.1	Fator de Compressibilidade	65
5.6.2	Comparação com o Diagrama Generalizado	66
5.7	Efeitos da Pressão de Entrada.....	68
5.8	Efeitos da Temperatura de Entrada	71
5.9	Efeitos da Composição do Gás Natural.....	74
5.9.1	Estados dos Gases.....	78
5.10	Efeitos de Modelo de Turbulência	80
6	CONCLUSÕES	83
7	BIBLIOGRAFIA	85

1 INTRODUÇÃO

O uso de gás natural representa o maior aumento no consumo de energia primária no mundo, tendo como maiores produtores mundiais os Estados Unidos e a Rússia. Fontes abundantes e uma produção robusta contribuem para uma posição competitiva do gás natural entre os outros recursos. O gás natural é considerado um combustível chave no setor de geração de energia elétrica e no setor industrial [1].

No Brasil, a utilização de gás natural foi impulsionada na década de 1990, através da importação de gás da Bolívia pelo Gasoduto Bolívia–Brasil (Gasbol) e da privatização das duas maiores distribuidoras de gás canalizado do país, a Ceg e a Comgás [2]. Recentemente, as novas descobertas de reservas de petróleo em conjunto com restrições de emissões de poluentes têm potencializado o desenvolvimento de novas soluções tecnológicas que permitem a extração mais eficiente de gás natural associado ao petróleo e sua utilização como fonte de energia.

O gás natural pode ser encontrado em formações rochosas subterrâneas ou associado a reservatórios de outros hidrocarbonetos (jazidas de petróleo), por acumulações em rochas porosas isoladas do exterior por rochas impermeáveis, associadas ou não a depósitos petrolíferos [3]. Grandes quantidades de gás natural têm sido encontradas associadas ao petróleo na região do pré-sal. Os poços do pré-sal apresentam uma elevada relação de gás-óleo (RGO), sendo superior à 400 Nm³/m³ no campo de Libra e 200 Nm³/m³ no campo de Lula, o que representa um grande potencial de produção [4]. O gás natural, após separado do óleo cru e da água (incluindo sais e sedimentos), pode ser reinjetado nos poços, queimado nas plataformas (“flares”) ou aproveitado como fonte de energia.

O gás natural é uma mistura composta essencialmente de hidrocarbonetos leves, principalmente metano (CH₄), apresentando também uma porcentagem de dióxido de carbono (CO₂), sulfeto de hidrogênio (H₂S) e partículas sólidas, tais como hidrocarbonetos condensados e areia [3]. As partículas sólidas devem ser eliminadas para evitar erosão nas tubulações. A água também deve ser removida, pois hidratos podem ser formados durante o transporte do gás e a combinação da água com CO₂ e H₂S pode formar uma mistura corrosiva causando danos ou desgaste nos dutos [5]. Ele é considerado o mais limpo dos combustíveis fósseis, emitindo cerca de 20 a 30%

menos CO₂ se comparado ao óleo combustível e 40 a 50% menos que combustíveis sólidos como o carvão [6].

Os percentuais de CO₂ encontrados nos poços de petróleo do pré-sal são bastantes elevados, chegando a 44% no campo de Libra e 79% no campo de Júpiter [4]. O CO₂ pode ser reinjetado, usualmente com o gás natural, nos poços como método de recuperação terciária melhorando o aproveitamento da retirada do petróleo ou então separado do gás natural, para que esse gás seja eficientemente transportado para unidades de processamento e distribuição. O excedente de CO₂ pode ainda ser simplesmente liberado na atmosfera causando impactos ambientais.

Um grande desafio tecnológico da exploração de gás natural no pré-sal é a separação eficiente de CO₂ e outros componentes gasosos indesejáveis misturados ao gás natural, especialmente em plataformas offshore, para que o gás natural atenda às normas de transporte e comercialização especificadas pelos órgãos competentes. Por exemplo, a ANP pela resolução N°16 de 17/06/2008 exige que o gás natural contenha no máximo 3% de fração molar de CO₂ para que possa ser comercializado.

As tecnologias já disponíveis para a separação do CO₂ não são muito efetivas. Existem metodologias baseadas em absorção, mas não são adequadas para gases com teor de CO₂ tão elevado quanto o gás natural encontrado na região do pré-sal [7]. Também existem métodos baseados em membranas permeáveis ou então em diferentes pontos de condensação dos diferentes componentes devido à redução de temperatura (Ryan Holmes, criogênico, Sprex), mas demandam muito espaço devido à composição elevada de CO₂, não sendo aplicáveis nas plataformas offshore [8].

Nesse contexto, torna-se necessário o desenvolvimento de novas soluções tecnológicas compactas e eficientes que realizem a separação dos componentes indesejáveis. O dispositivo chamado separador supersônico tem mostrado grande potencial na separação do gás natural com composição elevada de CO₂ (acima de 20%), característica apresentada pelo gás encontrado nos poços do pré-sal brasileiro. Através de um bocal convergente-divergente supersônico, é realizada a expansão do gás, que por sua vez apresentará uma temperatura mais baixa permitindo assim a condensação das substâncias indesejáveis, tal como o CO₂. Por fim, a separação da parcela condensada do fluido é feita por intermédio de uma centrifugação aplicada que possibilita a sua coleta no entorno das paredes do bocal por meio de coletores.

2 OBJETIVO

O estudo tem como objetivo contribuir com o desenvolvimento tecnológico do separador supersônico, visando uma exploração de gás natural offshore mais eficiente. O trabalho apresentado investiga, a partir de simulações numéricas, o comportamento do gás natural com diferentes composições de metano (CH_4) e gás carbônico (CO_2) através de um dispositivo separador supersônicos. O código comercial de simulação numérica de fluidos (*CFD - Computational Fluid Dynamics*) ANSYS Fluent é utilizado para a realização das simulações. Diferentes configurações são empregadas nas simulações possibilitando a avaliação dos efeitos dos diferentes modelos de gás real, da pressão e temperatura de entrada, da composição do gás natural e dos modelos de turbulência.

Esse estudo está inserido no contexto do projeto “Numerical Simulations and Modelling for Engineering and Physical Chemistry” pertencente ao Programa de Engenharia do centro de pesquisas denominado RCGI – “Research Centre for Gas Innovation”. O RCGI tem como missão desenvolver pesquisa e inovação para o uso sustentável do gás natural, biogás, hidrogênio e gestão, transporte e armazenamento de CO_2 em escala global. Além disso, visa difundir o conhecimento e despertar o Brasil e outros países para o potencial econômico e energético do gás natural e do hidrogênio. O centro de pesquisa é patrocinado pela agência de fomento Fapesp e pelo grupo Shell.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 Escoamento Compressível

Um dos principais fatores para se considerar os efeitos de compressibilidade de um escoamento (que se denomina escoamento compressível) é a variação da massa específica do fluido em questão e o seu impacto no comportamento do escoamento e nas suas condições termo-fluido dinâmicas. Além da compressibilidade, eles são caracterizados por possuírem altos níveis de energia envolvido nos processos. Como nesse tipo de escoamento as transformações energéticas e as mudanças de temperatura são consideráveis, uma revisão de Termodinâmica será feita inicialmente.

3.1.1 Termodinâmica

Esta seção tem como objetivo revisar os princípios fundamentais e equações que são diretamente utilizadas no estudo de escoamentos compressíveis.

3.1.1.1 Gás Perfeito

Um gás perfeito ou ideal tem a sua pressão p , seu volume específico v , sua temperatura T relacionados segundo a equação de estado:

$$pv = RT \quad (1)$$

onde R é a constante específica do gás, com diferentes valores para diferentes gases. Para ar nas condições normais de temperatura e pressão temos que $R = 287J/(kg.K)$.

3.1.1.2 Fator de Compressibilidade

O fator de compressibilidade é um fator de correção que descreve o desvio do comportamento de um gás real em relação a um gás ideal. No geral, esse desvio se

acentua conforme o gás se aproxima de uma zona de mudança de fase, quando a temperatura se torna muito baixa ou então a pressão se torna muito elevada.

Logo, uma análise quantitativa da adequabilidade do modelo de gás ideal pode ser realizada com a ajuda desse fator, que é definido pela relação:

$$Z = pv/RT \quad (2)$$

Observa-se que para um gás ideal temos que $Z = 1$. Portanto, o afastamento de Z em relação a unidade mede o desvio do comportamento do gás real em relação ao previsto pela equação de estado de um gás ideal.

A Figura 1 mostra um digrama da compressibilidade do nitrogênio. A partir dele nota-se que para todas as temperaturas $Z \rightarrow 1$ quando $P \rightarrow 0$, ou seja, o comportamento do nitrogênio se aproxima muito daquele de um gás ideal quando a pressão tende a 0. Além disso, para $T = 300K$ (temperatura ambiente), Z é muito próximo da unidade para até pressões de ordem de 10 MPa , consequentemente a equação dos gases ideais pode ser usada para o nitrogênio (e para o ar) com boa precisão nessa faixa. Finalmente, para temperaturas muito baixas ou a pressões muito altas, o fator de compressibilidade se afasta consideravelmente do valor unitário.

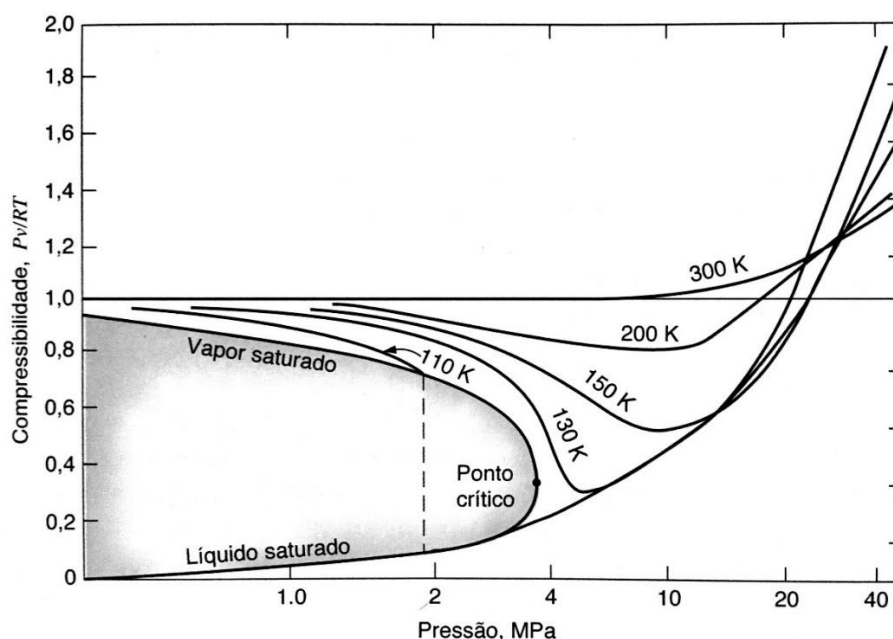


Figura 1 – Diagrama de Compressibilidade do Nitrogênio [9]

3.1.1.3 Diagrama Generalizado de Compressibilidade

Os diagramas de compressibilidade para outras substâncias puras são todos qualitativamente semelhantes ao do nitrogênio analisado na seção anterior. Do ponto de vista quantitativo, os diagramas diferem porque as temperaturas e pressões críticas das substâncias variam em uma faixa muito extensa como pode ser visto na Tabela A2 do Van Wylen [9]. Afim de colocar todas as substâncias em um mesmo diagrama, as propriedades são reduzidas com respeito aos valores no ponto crítico:

$$P_r = \frac{P}{P_c} \quad (3)$$

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad (4)$$

onde P_r e T_r são a pressão e temperatura reduzidas respectivamente, e P_c e T_c são a pressão e temperatura críticas respectivamente.

Construindo linhas de linhas T_r constante em um diagrama de Z em função de P_r obtém-se um diagrama de compressibilidade como mostrado na Figura 2 . Ao fazer esse procedimento para várias substâncias, percebe-se que todos os diagramas serão muitos parecidos e quase coincidentes se as substâncias forem compostas por moléculas simples. Logo, a Figura 2 é um diagrama generalizado porque representa o comportamento médio de diversas substâncias simples.

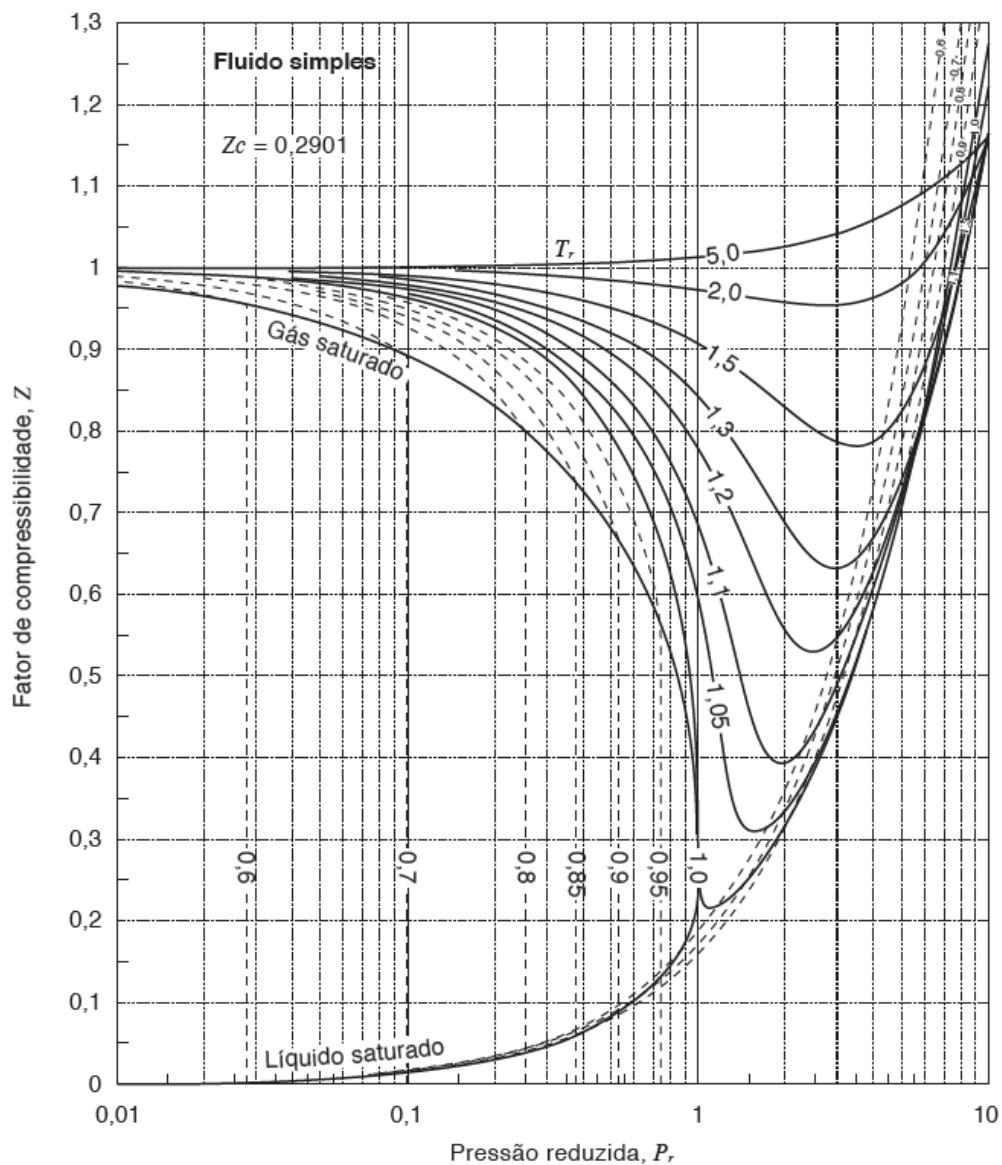


Figura 2 – Diagrama generalizado de compressibilidade [9]

3.1.1.4 Energia Interna e Entalpia

A energia interna de uma dada molécula é a somatória de suas energias de translação, de rotação, de vibração e elétricas. A energia interna por unidade de massa (específica) é denotada por e . Uma propriedade termodinâmica relacionada é a entalpia por unidade de massa (específica), denotada por h e definida como:

$$h = e + pv \quad (5)$$

Para um gás perfeito, energia interna e entalpia dependem somente da temperatura,

$$e = f(T) \quad (6)$$

$$h = e + pv = e + RT = f(T) \quad (7)$$

Sendo de e dh os diferenciais de energia interna e entalpia respectivamente, temos que [9]:

$$de = c_v dT \quad (8)$$

$$dh = c_p dT \quad (9)$$

onde c_v e c_p são os calores específicos a volume constante e a pressão constante respectivamente. Nas equações anteriores, c_v e c_p podem eles mesmos dependerem de T . No entanto, para temperaturas moderadas (para o ar, para $T < 1000K$), os calores específicos podem ser considerados constantes. Para gases ideais com c_v e c_p constantes, por definição de gás caloricamente perfeito, tem-se que [10]:

$$e = c_v T \quad (10)$$

$$h = c_p T \quad (11)$$

Além disso, c_v e c_p relacionam-se através da expressão:

$$c_p - c_v = R \quad (12)$$

Definindo $\gamma = c_p/c_v$ e após uma manipulação algébrica simples chegamos a:

$$c_p = \frac{\gamma R}{\gamma - 1} \quad (13)$$

Ou, alternativamente,

$$c_v = \frac{R}{\gamma - 1} \quad (14)$$

3.1.1.5 Primeira Lei da Termodinâmica

Denotando por δq e δw uma quantidade incremental de calor e trabalho respectivamente recebido por um sistema estacionário do meio, e por de a sua variação de energia interna, temos [10]:

$$\delta q + \delta w = de \quad (15)$$

Três tipos de processos são particularmente pertinentes ao assunto:

- Processo adiabático: Processo no qual calor não é adicionado nem retirado do sistema
- Processo reversível: Processo sem fenômenos dissipativos, onde efeitos de viscosidade, condutividade térmica e difusão de massa não estão presentes.
- Processo isentrópico: Processo adiabático e reversível

Para um processo reversível, tem-se que $\delta w = -p dv$, onde dv é uma mudança incremental de volume do sistema. Assim, a equação acima torna-se:

$$\delta q - p dv = de \quad (16)$$

3.1.1.6 Entropia e Segunda Lei da Termodinâmica

Com o intuito de determinar a direção correta de um processo, define-se a propriedade entropia:

$$ds = \frac{\delta q_{rev}}{T} \quad (17)$$

onde s é a entropia do sistema, δq_{rev} é a quantidade de calor adicionada reversivelmente ao sistema e T a temperatura. A entropia s é uma variável de estado e pode ser usada para definir um sistema não importando o tipo de processo pelo qual ele passa (reversível ou não). Uma relação alternativa e provavelmente mais clara que a anterior para descrever essa propriedade é:

$$ds = \frac{\delta q}{T} + ds_{irrev} \quad (18)$$

Nesta equação, δq é a verdadeira quantidade de calor adicionada ao sistema durante um processo real irreversível e ds_{irrev} é a geração de entropia devido a irreversibilidades. Os fenômenos dissipativos sempre aumentam a entropia:

$$ds_{irrev} \geq 0 \quad (19)$$

O cálculo prático da entalpia é feito da seguinte maneira:

$$Tds - pdv = de \quad (20)$$

Ou então,

$$Tds = de + pdv \quad (21)$$

Utilizando a definição de entalpia $dh = de + pdv + vdp$, temos:

$$Tds = dh - vdp \quad (22)$$

Duas relações práticas importantes para o cálculo de variação de entropia de um gás caloricamente perfeito deduzidas a partir das equações anteriores são mostradas a seguir [10]:

$$s_2 - s_1 = c_p \ln \frac{T_2}{T_1} - R \ln \frac{p_2}{p_1} \quad (23)$$

Ou analogamente,

$$s_2 - s_1 = \frac{c_v \ln T_2}{T_1} + R \ln \frac{v_2}{v_1} \quad (24)$$

3.1.1.7 Relações Isentrópicas

Para um processo isentrópico de um gás caloricamente perfeito, pode-se resumir as relações isentrópicas da seguinte maneira:

$$\frac{p_2}{p_1} = \left(\frac{\rho_2}{\rho_1} \right)^\gamma = \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (25)$$

Muitos problemas práticos de escoamentos compressíveis podem ser assumidos como isentrópicos. É o caso de escoamentos ao redor de aerofólios e em bocais por exemplo, que mesmo com a formação de camadas limites onde os efeitos dissipativos são fortes, existe toda a região fora dessa camada onde tais efeitos são negligenciáveis e que pode ser aproximada por um escoamento isentrópico. Além disso, na maioria dos casos, a camada limite é muito fina quando comparada com o resto do campo de escoamento [10].

3.1.2 Coeficiente de Compressibilidade

Seja uma partícula de fluido de volume v submetida a uma pressão p . Admitindo que a partícula sofra um aumento de pressão infinitesimal dp , então seu volume específico irá reduzir dv . Então, define-se compressibilidade:

$$\tau = - \frac{1}{v} \frac{dv}{dp} \quad (26)$$

Sendo $v = 1/\rho$ e $dv = \left(-\frac{1}{\rho^2}\right) d\rho$, chegamos a:

$$\tau = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dp} \quad (27)$$

Na literatura, um escoamento é considerado compressível quando o número de Mach é maior do que 0,3.

3.1.3 Equações que regem escoamentos compressíveis

As equações que governam o escoamento compressível são dadas abaixo, tanto na forma integral como derivada. [10]

Equação da continuidade na forma integral:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_v \rho dv + \iint_s \rho V \cdot dS = 0 \quad (28)$$

Equação da continuidade na forma diferencial:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho v = 0 \quad (29)$$

Equação da quantidade de movimento na forma integral:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_v \rho V dv + \iint_s (\rho V \cdot dS) V = - \iint_s p dS + \iiint_v \rho f dv \quad (30)$$

Equação da quantidade de movimento na forma diferencial:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = - \frac{\partial p}{\partial x} + \rho f_x \quad (31)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \rho f_y \quad (32)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho f_z \quad (33)$$

Equação da energia na forma integral:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \iiint_v \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) dv + \iint_S \rho \left(e + \frac{V^2}{2} \right) V \cdot dS \\ = \iiint_v \dot{q} \rho dv - \iint_S p V \cdot dS + \iiint_v \rho (f \cdot V) dv \end{aligned} \quad (34)$$

Equação da energia na forma diferencial:

$$\rho \frac{D \left(e + \frac{V^2}{2} \right)}{Dt} = \rho \dot{q} - \nabla \cdot pV + \rho (f \cdot V) \quad (35)$$

Além dessas equações, para gases caloricamente perfeitos usa-se também a eq. (1) e a eq. (8).

3.1.4 Condições de Estagnação

Normalmente quando nos referimos à pressão, temperatura e massa específica, estamos nos referindo às propriedades estáticas do fluido, apesar de estarmos omitindo esse termo. É como se estivéssemos acompanhando a partícula em seu movimento no momento da medição de tais propriedades, resultando nas propriedades estáticas. [11]

A condição de estagnação nos remete a um estado que existiria se levássemos o fluido a um estado de velocidade nula e de energia potencial nula, adiabaticamente e de forma reversível. Denota-se então por T_0 , h_0 , p_0 e ρ_0 a temperatura, a entalpia, a pressão e a massa específica de estagnação (ou total), respectivamente.

A partir das equações da seção anterior e das hipóteses de escoamento estacionário, adiabático e invíscido, demonstra-se que ao longo de uma linha de corrente [10]:

$$h + \frac{V^2}{2} = cte \quad (36)$$

Então, a partir do conceito de condição de estagnação e da equação acima,

$$h + \frac{V^2}{2} = h_0 \quad (37)$$

Para um gás caloricamente perfeito, tem-se que:

$$h_0 = c_p T_0 \quad (38)$$

Para a definição de T_0 e h_0 , é necessário somente levar o fluido à velocidade nula adiabaticamente, já para p_0 e ρ_0 é necessário que o processo seja adiabático e reversível (isentrópico).

De maneira similar, define-se T^* , p^* e ρ^* que são temperatura, pressão e massa específica do fluido quando o levamos a um estado de velocidade sônica ($M = 1$). Além disso, vale lembrar que $a^* = \sqrt{\gamma R T^*}$.

3.2 Choque Normal

No estudo de ondas de choque, o objetivo é descobrir a relação entre as propriedades do fluido anteriormente ao choque e posteriormente ao choque. Tais propriedades são: pressão, massa específica, temperatura, número de Mach, velocidade, pressão total, entalpia total, temperatura total e entropia, como mostrado na figura abaixo.

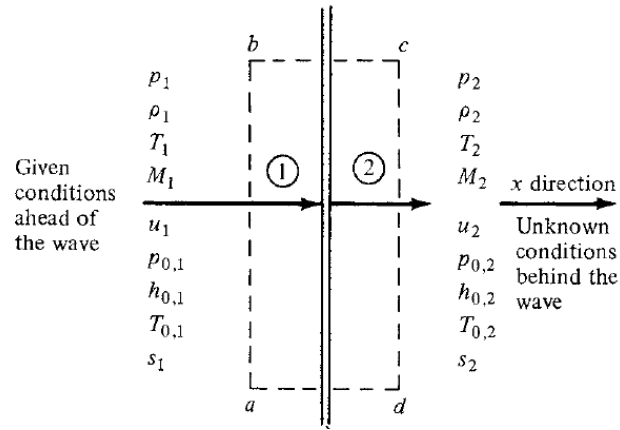


Figura 3 – Onda de choque normal [10]

As seguintes hipóteses simplificadoras são feitas:

- Regime permanente
- Escoamento adiabático
- Efeito viscosos desprezados no volume de controle do choque
- Inexistência de forças externas

A partir da equação da energia aplicada ao volume de controle abcd definido na figura acima, e as aproximações feitas para um gás caloricamente ideal, obtemos as seguintes expressões:

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \quad (39)$$

$$\frac{p_0}{p} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (40)$$

$$\frac{\rho_0}{\rho} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right)^{\frac{1}{\gamma - 1}} \quad (41)$$

Essas relações mostram-se muito úteis para encontrar as propriedades do fluido na seção 1 quando M_1 é conhecido e também são conhecidas as propriedades de estagnação do fluido antes do choque.

Temos ainda outras relações que ligam as propriedades de estagnação com as propriedades do ponto em condição sônica ($M = 1$):

$$\frac{T^*}{T_0} = \frac{2}{\gamma + 1} \quad (42)$$

$$\frac{p^*}{p_0} = \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (43)$$

$$\frac{\rho^*}{\rho_0} = \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{1}{\gamma - 1}} \quad (44)$$

Por definição,

$$M^* \equiv \frac{u}{a^*} \quad (45)$$

Então,

$$M^{*2} = \frac{(\gamma + 1)M^2}{2 + (\gamma - 1)M^2} \quad (46)$$

Agora, utilizando as equações da continuidade (eq. (26)), quantidade de movimento (eq. (28)) e da energia (eq. (32)) no volume de controle abcd definido na fig. 1, as eq. (1) e (9), além das relações isentrópicas (eq. (23)) e algumas manipulações algébricas, obtém-se as seguintes expressões [10]:

$$M_2^2 = \frac{1 + [(\gamma - 1)/2]M_1^2}{\gamma M_1^2 - (\gamma - 1)/2} \quad (47)$$

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{u_1}{u_2} = \frac{(\gamma + 1)M_1^2}{2 + (\gamma - 1)M_1^2} \quad (48)$$

$$\frac{p_2}{p_1} = 1 + \frac{2\gamma}{(\gamma + 1)(M_1^2 - 1)} \quad (49)$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{h_2}{h_1} = \left[1 + \frac{2\gamma}{(\gamma + 1)(M_1^2 - 1)} \right] \frac{2 + (\gamma - 1)M_1^2}{(\gamma + 1)M_1^2} \quad (50)$$

Além disso, temos:

$$s_2 - s_1 = -R \ln \frac{p_{0,2}}{p_{0,1}} \quad (51)$$

$$\frac{p_{0,2}}{p_{0,1}} = e^{-\frac{s_2 - s_1}{R}} \quad (52)$$

3.3 Equações que regem escoamentos quasi-unidimensionais

Nas deduções das relações para um choque normal, as equações utilizadas consideravam uma seção constante, e o problema resumia-se ao caso unidimensional. Já no caso de bocais e difusores, temos seções variáveis o que nos leva a problemas tridimensionais. Mas, se assumirmos que a área do duto varia moderadamente apenas ao longo da componente x e então considerarmos que as velocidades nas componentes y e z são muito pequenas perante a velocidade em x (vide figura abaixo), podemos assumir um escoamento quasi-unidimensional. Lembrando que as hipóteses de regime permanente, escoamento adiabático e invíscido se mantêm.

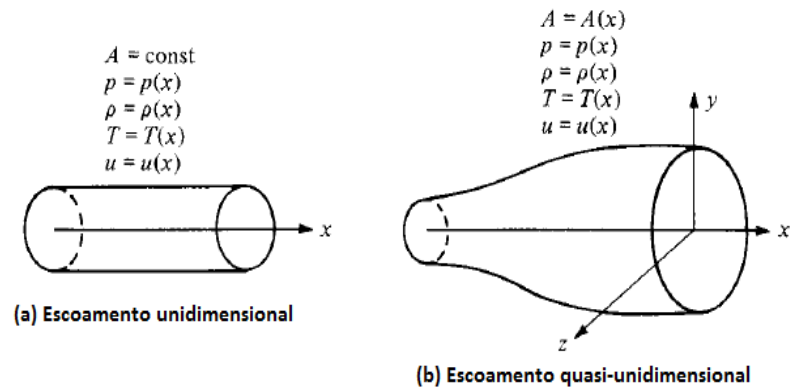


Figura 4 – Escoamentos unidimensional e quasi-unidimensional [10]

Partindo das equações da continuidade e quantidade de movimento (forma integral), e supondo a variação da área $A(x)$, através de diversas manipulações tem-se [10]:

$$\frac{dA}{A} = \frac{(M^2 - 1)du}{u} \quad (53)$$

Essa relação nos leva a três casos possíveis:

- Se $M < 1$, uma diminuição da área é associada a um aumento da velocidade e vice-versa
- Se $M > 1$, um aumento da área é associado a um aumento da velocidade e vice-versa
- Se $M = 1$, corresponde a um caso de máximo ou mínimo na distribuição da área

Quando queremos acelerar (ou alternativamente expandir) um escoamento subsônico isentropicamente a velocidades supersônicas, deve-se primeiramente acelerá-lo em duto convergente (quando $M < 1$). Quando M se iguala a 1, deve-se então acelerá-lo através de um duto divergente, caso contrário a velocidade começaria a cair. A seção de menor área do bocal convergente-divergente é chamada de garganta. Sempre que se deseja passar um escoamento de velocidades subsônicas a supersônicas,

o fluxo deve passar por uma garganta com $M = 1$. Esse processo descreve o que se chama de bocal supersônico.

O oposto também é possível, para desacelerar um escoamento supersônico para subsônico, basta fazer o mesmo percurso, o fluxo passando primeiramente pelo duto convergente onde terá sua velocidade reduzida até $M = 1$ na região da garganta e em seguida passar pelo duto divergente. Trata-se de um difusor supersônico.

A figura a seguir ilustra os dispositivos descritos:

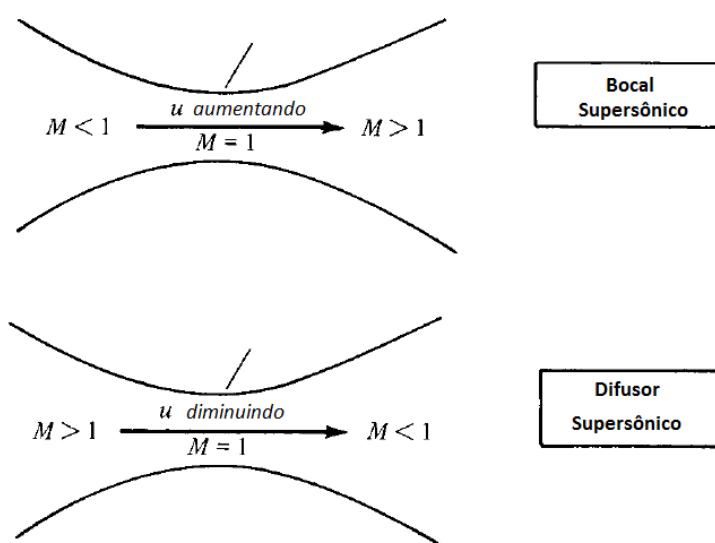


Figura 5 – Bocal (acima) e difusor (abaixo) supersônicos [10]

3.4 Escoamento em bocais supersônicos

Assumindo que o escoamento sônico na garganta exista, onde a seção transversal é denotada por A^* , então teremos o número de Mach na garganta denotado por $M^* = 1$. Utilizando a equação da continuidade, algumas das relações descritas anteriormente para choque normais e manipulação algébrica, chegamos a [10]:

$$\left(\frac{A}{A^*}\right)^2 = M^2 \left[\frac{2}{\gamma + 1} \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right) \right]^{\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}} \quad (54)$$

Essa equação mostra que $M = f(\frac{A}{A^*})$. Além disso, para um dado valor de A/A^* , pode-se obter dois valores de M diferentes, sendo um deles subsônico e o outro supersônico.

Em um processo de expansão do fluxo de subsônico para supersônico, quando os valores de $A(x)$ são conhecidos, assim como as propriedades de estagnação do fluido, pode-se obter a partir das relações encontradas anteriormente ou das tabelas [10] os valores das propriedades do escoamento em todas as seções do tubo. Para uma dada relação A/A^* e não ocorrendo choque no bocal, sabe-se que o número de Mach subsônico associado está na região convergente do bocal e o supersônico na divergente.

Para valores de pressão na saída p_s muitos próximos de p_0 , o escoamento não conseguirá atingir $M = 1$ na garganta do bocal. Nesse caso, M irá aumentar levemente até chegar à garganta, e depois irá diminuir no divergente, no entanto p irá diminuir um pouco até chegar na garganta, e então irá aumentar novamente. A partir de um determinado valor de p_s , o bocal consegue satisfazer a condição de $M = 1$ na garganta.

Quando p_s é menor do que esse valor (p_s na qual o número de Mach passa a ser 1 na garganta), o escoamento se tornará supersônico na parte divergente do bocal. Mas dependendo do valor de p_s , pode ser que a pressão na saída ainda seja muito alta para suportar uma expansão ao longo de todo o duto divergente, ocorrendo então um choque normal na região divergente. Quanto mais reduzirmos p_s , mais longe da garganta o choque ocorrerá, até um ponto em que a pressão de saída permita a expansão em toda a seção do divergente do bocal. Outro ponto importante para se analisar é a pressão nos arredores do bocal após a seção de saída, chamada de *back pressure* p_B .

Supondo que p_s seja suficientemente baixa para que não ocorra choque normal ao longo do divergente, existem três casos de controle da *back pressure* p_B :

- $p_B < p_s$: expansão na saída
- $p_B = p_s$: saída suave do fluxo do bocal para o meio
- $p_B > p_s$: choque oblíquo na saída

3.5 CFD – Computational Fluid Dynamics

O CFD consiste na simulação numérica de escoamentos de fluidos, podendo envolver transferência de calor e outros fenômenos associados como reações químicas. O uso de CFD vem crescendo cada vez mais com a evolução dos computadores e com a disponibilidade de hardwares de alta performance com um custo menor.

A partir dos anos 60 a indústria aeroespacial começou a utilizar técnicas de CFD no P&D e na manufatura de aeronaves e motores a jato. Atualmente, esse recurso tem sido aplicado no desenvolvimento de motores de combustão interna, câmaras de combustão de turbinas a gás e fornalhas, além do uso para o estudo do comportamento aerodinâmico de carros na indústria automotiva. Deste modo, essa ferramenta está se tornando essencial para o desenvolvimento de produtos industriais e processos. [12]

3.5.1 Código CFD

Os códigos CFD são estruturados em torno de algoritmos numéricos e contém três elementos principais: o pré-processamento, o solver e o pós-processamento [12].

3.5.1.1 Pré-processamento

O pré-processamento consiste nas entradas do problema de escoamento e na sua transformação de modo que as informações possuam um formato adequado ao solver. Nesta etapa deve-se:

- Definir a geometria e região de interesse: domínio computacional
- Criar a malha computacional: subdivisões do domínio em um número de subdomínios menores: malha de células (ou volumes de controle ou elementos)
- Seleção de fenômenos físicos e químicos que precisam ser modelados
- Definição das propriedades do fluido
- Especificação de condições de contorno apropriadas

A solução do problema é definida nos nós dentro de cada célula da malha computacional. No geral, quanto maior o número de células, mais exata será a solução numérica (conforme as equações definidas do problema), no entanto, deve-se analisar a relação custo/benefício de cada caso, pois um número grande de células implica em maior tempo e capacidade de processamento. Mais de 50% do tempo gasto na indústria em um projeto de CFD é dedicado à definição do domínio computacional e à geração da malha computacional. [12]

3.5.1.2 Solver

Existem diferentes tipos de técnicas de soluções numéricas de equações diferenciais: diferenças finitas, elementos finitos e métodos espectrais. Para o estudo proposto neste trabalho, o método de volumes finitos é utilizado, que é uma formulação especial do método de diferenças finitas. Este é um dos métodos mais utilizados em códigos CFD bem estabelecidos: ANSYS CFX, ANSYS Fluent, PHOENICS e STAR-CCM+, CFD++. Essencialmente, esta etapa consiste em:

- Integração das equações que governam o escoamento do fluido do fluido baseado em volumes de controle através do domínio
- Discretização: conversão das equações integrais resultantes em um sistema algébrico de equações
- Solução das equações algébricas por um método iterativo

3.5.1.3 Pós-processamento

Esta etapa consiste na análise dos resultados obtidos afim de se obter representações gráficas e relatórios adequados ao caso estudado. Alguns softwares de pós-processamento são: ANSYS CFD-Post, EnSight, FieldView, ParaView e Tecplot 360. Atualmente, os pacotes de CFD mais avançados já são equipados com ferramentas versáteis de visualização de dados. No geral, os softwares de pós-processamento permitem visualizar:

- Domínio geométrico e malha computacional
- Gráficos vetoriais
- Linhas e contornos sombreados
- Superfícies 2D e 3D
- Rastreamento de partículas
- Manipulação de vistas (translação, rotação, escala, etc.)

Os pacotes mais recentes podem também incluir animações facilitando a compreensão de resultados dinâmicos.

3.5.2 Distância Adimensional da Parede y^+

O y^+ é a distância adimensional da parede e pode ser definido como:

$$y^+ = \frac{u_* y}{\nu} \quad (55)$$

onde u_* é a velocidade de fricção ou cisalhamento (“*shear velocity*”), y é a distância da parede e ν a viscosidade cinemática.

O y^+ determina se as influências nas células adjacentes à parede são laminares ou turbulentas, indicando assim a região da camada limite turbulenta que será resolvida. Esse número adimensional é frequentemente usado para determinar quão refinada a malha deve ser para um escoamento em particular. As leis da parede (“*wall laws*”) dos modelos de turbulência possuem restrições em relação aos valores de y^+ . O modelo $k - \varepsilon$ standard por exemplo não vale na subcamada viscosa e requer que o nó mais próximo da parede possua valores de y^+ entre 50 e 200. Um escoamento com velocidades elevadas próxima da parede produzirá valores maiores de y^+ e consequentemente a malha deverá ser mais refinada na região.

A camada limite turbulenta adjacente à parede sólida é composta de duas regiões [12]:

- “*Inner Region*”: representa de 10 a 20% da espessura total da camada limite. Dentro dessa região, distinguem-se três zonas:
 - a) $y^+ < 5$: “*Linear or Viscous Sublayer*” – assume-se que o perfil de velocidade é linear e as tensões viscosas dominam o escoamento adjacente à parede.
 - b) $5 < y^+ < 30$: “*Buffer Layer*” – as tensões viscosas e turbulenta possuem magnitudes similares.
 - c) $30 < y^+ < 300$: “*Log-Law Layer*” – região totalmente turbulenta onde as tensões turbulentas (de Reynolds) predominam no escoamento.
- “*Outer Region*”: região em que o escoamento é dominado pela inércia, livre dos efeitos diretos da viscosidade.

3.5.3 Modelos de Gás Real

Muitos problemas da engenharia envolvem fluidos que não se comportam como gás ideal. Por exemplo, a pressões muito elevadas ou em condições próximas às regiões de mudança de fase, o escoamento não pode ser modelado corretamente com a hipótese de gás ideal, que é justamente o caso aqui estudado. Um modelo de gás real permite resolver mais precisamente escoamentos cujo comportamento do fluido se desvia de um gás ideal.

O software ANSYS Fluent fornece a possibilidade de resolver escoamento de gás real através de modelos de equações de estado cúbicas. A forma geral da pressão para as equações de estado cúbicas é expressa da seguinte maneira:

$$P = \frac{RT}{V - b + c} - \frac{\alpha}{(V + \delta V + \varepsilon)^2} \quad (56)$$

onde P é a pressão absoluta, V a volume específico molar, T a temperatura e R a constante universal dos gases [13].

Os coeficientes α , β , c , δ e ε são dados para cada equação de estado como função da temperatura crítica T_c e pressão crítica P_c , fator acêntrico ω e volume específico crítico V_c . O coeficiente α também possui uma dependência da temperatura.

Para o cálculo das propriedades de mistura de gases reais, o software utiliza um método chamado Método Pseudocrítico. Segundo esse método, o comportamento e as propriedades da mistura são os mesmos que os de um componente puro para o qual constantes críticas apropriadas foram designadas. Essas constantes críticas da mistura são funções da composição da mistura e das propriedades críticas de cada componente.

3.5.3.1 Redlich-Kwong

A equação de estado Redlich-Kwong foi introduzida em 1949 e considerada um grande avanço em relação as demais equações de estado daquele tempo. Ela é uma equação cúbica analítica e muito utilizada por possuir uma forma relativamente simples, sendo a equação mais amplamente validada na literatura. Os coeficientes para essa equação são:

$$\alpha(T) = \frac{\alpha_0}{(T/T_c)^{0.5}} \quad (57)$$

$$\alpha_0 = \frac{0.42747R^2T_c^2}{P_c} \quad (58)$$

$$b = \frac{0.08664RT_c}{P_c} \quad (59)$$

O parâmetro δ é igual a b e os parâmetros c e ε são nulos. Essa equação é a mais simples das equações cúbicas do ANSYS Fluent e requer apenas dois parâmetros, T_c e P_c [13]. Muitos pesquisadores tentaram melhorar a precisão dessa equação, originando as formas modificadas mostradas a seguir.

3.5.3.2 Soave Redlich-Kwong

A equação de estado Soave Redlich-Kwong tem seus coeficientes expressos por:

$$\alpha(T) = \alpha_0 \left[1 + n \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{0.5} \right) \right]^2 \quad (60)$$

$$n = 0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2 \quad (61)$$

Os coeficientes α_0 e b são dados pelas equações (58) e (59) respectivamente. Assim como a Redlich-Kwong original, o parâmetro δ é igual a b e os parâmetros c e ε são nulos. A Soave-Redlich-Kwong depende de três parâmetros, T_c , P_c e ω [13].

3.5.3.3 Peng-Robinson

Para a equação de estado Peng-Robinson, tem-se que:

$$\alpha_0 = \frac{0.457247R^2T_c^2}{P_c} \quad (62)$$

$$b = \frac{0.07780RT_c}{P_c} \quad (63)$$

A função $\alpha(T)$ é dada pela Equação (60) com n escrito como:

$$n = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2 \quad (64)$$

Na equação de Peng-Robinson o coeficiente δ é igual a $2b$, ε igual a $-b^2$ e c igual a 0. Igualmente à equação Soave-Redlich-Kwong, ela depende de três parâmetros: T_c , P_c e ω [13].

3.5.3.4 Aungier-Redlich-Kwong

A equação de estado Aungier-Redlich-Kwong apresenta como coeficientes:

$$\alpha(T) = \alpha_0 \left(\frac{T}{T_c} \right)^{-n} \quad (65)$$

$$n = 0.4986 + 1.1735\omega + 0.4754\omega^2 \quad (66)$$

Os coeficientes α_0 e b são dados pelas equações (58) e (59) respectivamente. O parâmetro δ é igual a b , enquanto o parâmetro ε é nulo. O parâmetro c é expresso por:

$$c = \frac{RT_c}{P_c + \alpha_0/V_c(V_c + b)} + b - V_c \quad (67)$$

A Soave-Redlich-Kwong demanda quatro parâmetros: T_c , P_c , ω e V_c [13].

3.5.4 Modelagem de Turbulência

Em escoamentos com elevado número de Reynolds, observa-se um comportamento turbulento caracterizado por uma movimentação caótica e aleatória na qual velocidade e pressão mudam continuamente com o tempo dentro de regiões relevantes do escoamento. A grande maioria dos modelos utilizados para lidar com escoamentos turbulentos são baseados nas equações RANS – Reynolds-Averaged Navier-Stokes.

O motivo do uso desses modelos é o alto custo computacional para se resolver todas as escalas associados ao escoamento, a medida que o escoamento é mais turbulento (número de Reynolds associado mais alto) a amplitude entre as maiores e menores escalas aumenta e para resolver todas essas escalas o custo computacional é cada vez mais alto (malha computacional deve ser mais refinada e o passo de tempo menor).

3.5.4.1 RANS – Reynolds-Averaged Navier-Stokes

Na média de Reynolds, as variáveis das equações exatas de Navier-Stokes são decompostas na média (média de conjunto ou temporal) e componentes flutuantes. Para os componentes de velocidade tem-se:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (68)$$

onde $\bar{u}_i$ é a componente da velocidade média e u'_i a componente da velocidade flutuante respectivamente.

Analogamente, para outros escalares:

$$\phi_i = \bar{\phi} + \phi' \quad (69)$$

onde ϕ denota uma quantidade escalar como pressão ou energia.

Substituindo essas expressões nas variáveis do fluido nas equações exatas da continuidade e da conservação da quantidade de movimento, tomando uma média temporal (ou de conjunto) e deixando cair a barra da notação de velocidade média, obtém-se as equações médias de Navier-Stokes. Elas podem ser escritas como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (70)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) \\ = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \right) \right] \\ + \frac{\partial}{\partial x_j}(-\rho \overline{u'_i u'_j}) \end{aligned} \quad (71)$$

As equações (70) e (71) são chamadas de Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS). Elas possuem a mesma forma das equações exatas de Navier-Stokes, com as

velocidades e outras variáveis representando valores da média de conjunto ou temporal. Agora termos adicionais aparecem representando os efeitos da turbulência. Essas tensões de Reynolds, $-\rho \overline{u'_i u'_j}$, devem ser modeladas para fechar a equação 55.

Para escoamentos de massa específica variável (compressíveis), as equações (70) e (71) podem ser interpretadas como as equações de Favre-averaged Navier-Stokes, com as velocidades representando valores médios em massa. Assim essas equações podem ser aplicadas para escoamentos compressíveis [12].

3.5.4.2 Tensor de Reynolds

O fluxo de quantidade de movimento devido às flutuações $-\rho \overline{u'_i u'_j}$ é conhecido como o tensor de Reynolds.

$$T_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} = -\rho \begin{bmatrix} \overline{u'_1 u'_1} & \overline{u'_1 u'_2} & \overline{u'_1 u'_3} \\ \overline{u'_2 u'_1} & \overline{u'_2 u'_2} & \overline{u'_2 u'_3} \\ \overline{u'_3 u'_1} & \overline{u'_3 u'_2} & \overline{u'_3 u'_3} \end{bmatrix} \quad (72)$$

Ele é também reconhecido como a tensão exercida no fluido pelas flutuações turbulentas. O tensor de Reynolds é simétrico e possui seis componentes independentes entre si.

Afim de possibilitar a resolução das equações baseadas em RANS, modelos de turbulência foram desenvolvidos para lidar com esse termo adicional chamado tensor de Reynolds. A Tabela 1 mostra diferentes modelos de turbulência desenvolvidos, classificados de acordo com o número de equações de transporte adicionais necessárias à resolução juntamente com as equações RANS.

As informações dos modelos de turbulência das próximas seções foram essencialmente baseadas no livro “An Introduction to Computational Fluid Dynamics – The finite volume method” [12] e as opções “Enhanced Wall Treatment”, “Viscous Heating” e “Compressibility Effects” que podem ser habilitadas dentro do modelo k-ε constam na documentação do ANSYS Fluent [13].

Tabela 1 – Modelos de Turbulência [12]

Nº de equações de transporte extra	Nome do modelo
Zero	Mixing length model
Uma	Spalart-Allmaras model
Duas	k-ε model
	k-ω model
	Algebraic stress model
Sete	Reynolds stress model

3.5.4.3 Hipótese de Boussinesq

Boussinesq propõe que a tensão turbulenta τ_t seja representada por um modelo análogo ao da tensão de origem molecular de tal modo que a tensão total passa a ser dada pela soma das tensões devido a difusão molecular e turbulenta. É pressuposto que a tensão turbulenta ocorre quando há gradiente de velocidade no campo médio, o que é verdadeiro na camada limite.

Em 1942, Kolmogorov generalizou a hipótese de Boussinesq e postulou que o tensor turbulento pode ser escrito de forma análoga ao tensor de um fluido Newtoniano, propondo a forma abaixo para as tensões turbulentas (ou tensões de Reynolds):

$$-\rho \overline{(u'_i u'_j)} = -\delta_{ij} \rho \frac{2}{3} k + \mu_t \left(\frac{\partial \overline{(u_i)}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{(u_j)}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \mu_t \frac{\partial \overline{(u_k)}}{\partial x_k} \quad (73)$$

onde k é a energia cinética da turbulência e μ_t é a viscosidade turbulenta. Diferentemente da viscosidade molecular (laminar), μ_t é uma propriedade do escoamento e não do fluido.

3.5.4.4 Mixing length model

Esse modelo visa descrever as tensões através de fórmulas algébricas simples para μ_t (viscosidade turbulenta) como função da posição.

Vantagens:

- Fácil implementação e barato em termos de recursos computacionais
- Boas previsões para camadas finas de cisalhamento
- Bem estabelecido

Desvantagens:

- Incapaz de estabelecer escoamentos com separação e recirculação
- Calcula apenas propriedades médias do escoamento e tensão de cisalhamento turbulenta

3.5.4.5 k - ϵ model

O modelo k - ϵ é uma descrição da turbulência mais sofisticada e geral, mas também mais custosa, que permite analisar os efeitos de transporte de propriedades de turbulência por convecção e difusão, além de produção e destruição de turbulência.

Duas equações de transporte são resolvidas neste modelo, uma para energia cinética turbulenta k e outra para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta ϵ . Neste modelo, assume-se que a viscosidade turbulenta é isotrópica, ou seja, varia igualmente em todas as direções. No entanto, a hipótese não é válida em muitos escoamentos complexos levando a previsões imprecisas.

As vantagens e desvantagens dos modelos convencionais k - ϵ são apresentadas a seguir.

Vantagens:

- Modelo de turbulência mais simples para o qual apenas condições iniciais e/ou limites precisam ser fornecidas
- Excelente performance para muitos escoamentos relevantes para a indústria
- Modelo de turbulência mais amplamente validado

Desvantagens:

- Mais caro para implementar que o Mixing length model

- Má performance para uma variedade de casos importantes, como: alguns escoamentos não confinados, escoamentos com grandes deformações (camadas limites curvas), escoamentos rotacionais, escoamentos completamente desenvolvidos em dutos não circulares.

Pelo fato do modelo k - ε ser o mais amplamente validado na literatura, possuir boa performance para o caso estudado não se enquadrando em nenhuma de suas desvantagens, ele torna-se uma boa escolha para as simulações.

3.5.4.6 k - ε RNG

O k - ε RNG é um modelo de turbulência derivado do k - ε Standard através de uma técnica chamada de teoria de grupo de normalização. Ele apresenta algumas melhorias em relação ao Standard [13]:

- Possui um termo adicional na equação de ε que melhora sua exatidão para escoamentos rapidamente tensionados
- O efeito de swirl na turbulência está incluso no modelo, aumentando a exatidão para esse tipo de escoamento
- Apresenta uma fórmula analítica para o número de Prandtl
- Fornece uma formula diferencial analiticamente derivada para a viscosidade efetiva que lida com efeitos de baixos números de Reynolds, enquanto o Standard é um modelo para elevados número de Reynolds

Essas características tornam o modelo k - ε RNG mais adequado que o modelo k - ε Standard. Logo, ele será o modelo escolhido para as simulações. Algumas opções habilitadas n

3.5.4.7 Reynolds stress model (RSM)

Nesse modelo as equações de transporte para todas as tensões de Reynolds são derivadas e resolvidas. As seis equações resolvidas neste caso, uma para cada termo do tensor de Reynolds, contêm termos de difusão, pressão/deformação e dissipação, cujos efeitos individuais são desconhecidos e não podem ser medidos. Nos modelos de equação de tensões de Reynolds, suposições são feitas a respeito desses termos desconhecidos, e as equações diferenciais parciais (EDPs) são resolvidas em conjunto com a equação de transporte para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta ε . Esse método apresenta um custo de 2 a 3 vezes maior quando comparado com o modelo $k-\varepsilon$.

Vantagens:

- Cálculos mais precisos para propriedades médias de escoamentos e para todas tensões de Reynolds em muitos escoamentos simples e complexos, incluindo canais assimétricos, escoamentos em dutos não circulares e curvados.
- Considera a anisotropia do tensor de Reynolds
- Potencialmente o mais geral de todos os modelos de turbulência clássicos
- Requer apenas condições iniciais e/ou limites

Desvantagens:

- Custo 2 à 3 vezes maior que o modelo $k-\varepsilon$
- Não tão amplamente validado como os modelos Mixing length e $k-\varepsilon$
- Má performance em alguns escoamentos assim como o modelo $k-\varepsilon$ devido a problemas com a modelagem da equação de ε (jatos axissimétricos e escoamentos com recirculação não confinados)

3.5.4.8 Enhanced Wall Treatment

Afim de obter um método que se aplique em toda a região próxima à parede dentro da camada limite (subcamada viscosa, região de buffer e região externa totalmente turbulenta) foi formulada apenas uma lei da parede para toda a região, combinando as leis lineares (laminar) e logarítmica (turbulenta) da parede. Essa abordagem permite adicionar também os efeitos de gradientes de pressão (“*Pressure Gradient Effects*”) e térmicos (“*Thermal Effects*”). [13]

3.5.4.9 Viscous Heating

Na equação de energia turbulenta k no modelo $k - \varepsilon$, a dissipação viscosa é escrita como a taxa na qual a energia cinética turbulenta é convertida em energia cinética térmica. Pequenos turbilhões são dissipados pela viscosidade molecular próximo à parede. Então, essa consideração é muito importante próximo a fronteiras sólidas.

No entanto, quando o solver Pressure-Based é utilizado, a forma padrão da equação da energia do ANSYS Fluent não inclui o termo de dissipação viscosa, pois o aquecimento por dissipação é frequentemente desprezível [13]. Mas para escoamentos compressíveis essa dissipação não é desprezível, logo a opção foi habilitada para as simulações afim de incluir o termo da dissipação viscosa na equação de k .

3.5.4.10 Compressibility Effects

Para escoamentos com número de Mach elevados, os efeitos de compressibilidade afetam a turbulência através da chamada “dissipação de dilatação”. Desprezar tal dissipação provoca falhas na predição da redução observada na taxa de espalhamento com o aumento do número de Mach para misturas compressíveis e outras camadas de cisalhamento livres. Para que esses efeitos sejam levados em consideração no modelo $k-\varepsilon$, o termo Y_M deve ser incluso na equação de k . Esse termo é modelado no Fluent da seguinte maneira:

$$Y_M = 2\rho\varepsilon M_t^2 \quad (74)$$

onde M_t é a velocidade do som turbulenta definida como

$$M_t = \sqrt{k/\alpha^2} \quad (75)$$

onde $a = \sqrt{\gamma RT}$ é a velocidade do som. [13]

3.5.5 Pressure-Based e Density-Based Solvers

O Fluent permite escolher dois métodos numéricos, o pressure-based solver e o density-based solver. Historicamente, a abordagem do primeiro método foi desenvolvida para estudar escoamentos incompressíveis de baixa velocidade enquanto a abordagem do segundo era principalmente voltada para uso em escoamentos compressíveis de alta velocidade. Mas atualmente, ambos os métodos foram reformulados e aprimorados para resolver uma ampla gama de condições de escoamentos além daquelas para as quais foram designados.

Em ambos métodos, o campo de velocidades é obtido da equação da quantidade de movimento. No pressure-based, a pressão é conseguida através da equação da pressão (ou equação da correção de pressão), derivada da equação da continuidade e da quantidade de movimento, de tal modo que o campo de velocidades, corrigido pela pressão, satisfaça a continuidade. Já o density-based, a equação da continuidade é usada para obter a massa específica enquanto a pressão é obtida pela equação de estado.

O Fluent resolve, para ambos os métodos, as equações integrais da conservação da massa e quantidade de movimento, e, se aplicável, da energia e outras propriedades como a turbulência. Uma vez que as equações são não-lineares e acopladas, o processo de solução é iterativo até que atinja os critérios de convergência especificados. [13]

O método pressure-based resolve sequencialmente as equações de quantidade de movimento e de correção de pressão (continuidade). Um diagrama mais detalhado sobre a abordagem do pressure-based é apresentado na Figura 6. Esse foi o método

escolhido pois além de apresentar uma ampla validação na literatura, o density-based apresentou maiores dificuldades de convergência.

Já no método density-based, as equações de continuidade, quantidade de movimento e, quando apropriado, as equações de energia e transporte de espécies são resolvidas simultaneamente. Em seguida, equações para a turbulência e escalares adicionais são resolvidas sequencialmente (de modo segregado).

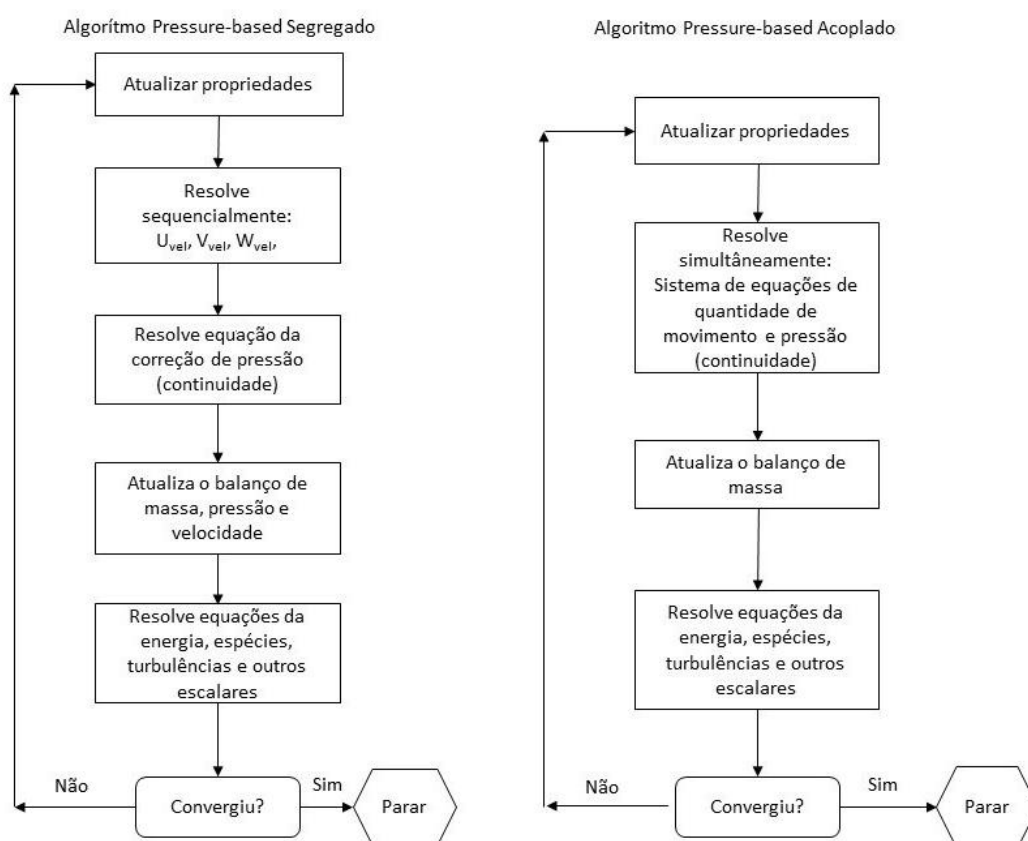


Figura 6 – Visão geral do método de solução Pressure-Based [13]

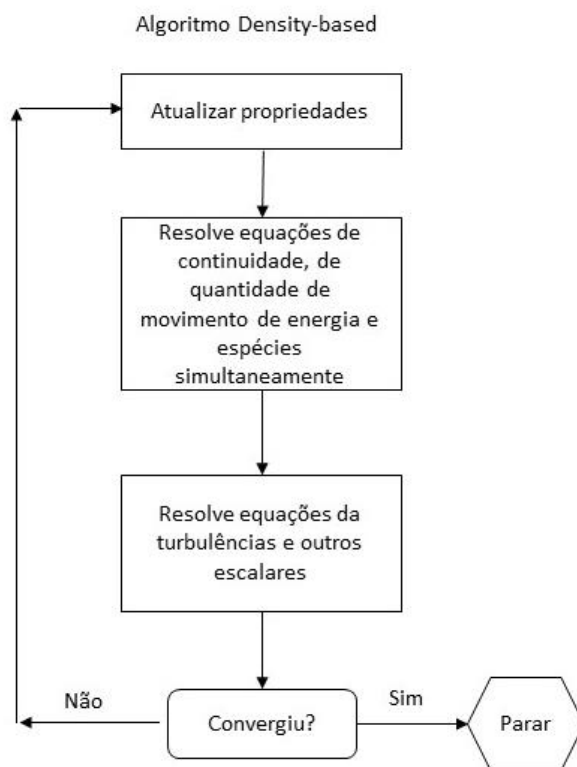


Figura 7 – Visão geral do método de solução Density-Based [13]

4 MATERIAS E MÉTODOS

O objetivo do projeto é o estudo de diversos parâmetros relacionados ao escoamento para diferentes geometrias de separadores. Deste modo, para cada geometria estudada, é efetuada a geração de uma malha computacional, simulação do escoamento através do separador estudado a partir do software ANSYS Fluent e em seguida uma análise dos resultados obtidos. Entre as simulações os seguintes parâmetros são alterados: modelo de gás real, pressão e temperatura de entrada, composição do gás, modelo de turbulência; e seus efeitos são posteriormente investigados.

4.1 Materiais

É utilizada a licença do software CFD Fluent fornecida pelo NDF – Núcleo de Dinâmica e Fluidos assim como os computadores do NDF que possuem o software instalado, seja por acesso presencial ou remoto. Além disso, outros softwares também são utilizados para a geração de malha computacional.

4.2 Metodologia

A metodologia utilizada envolve os seguintes procedimentos:

1. Revisão bibliográfica;
2. Geração de malha computacional com estudo de independência de malha;
3. Simulações do escoamento através do separador variando parâmetros;
4. Análise dos resultados;
5. Comparação dos resultados obtidos com as diferentes configurações

Para as etapas 2,3 e 4 diferentes geometrias foram utilizadas.

4.3 Análise dos resultados

No contexto de simulações numéricas, é de extrema importância realizar a validação do modelo computacional. Com essa finalidade, utiliza-se para as primeiras simulações uma geometria já estudada na literatura e os resultados são comparados. Verifica-se assim se os métodos de solução, os algoritmos, os modelos de turbulência, modelos de gás real, e outros parâmetros da simulação conseguem chegar a resultados coerentes com os da literatura. Logo, a primeira geometria investigada tem como objetivo a validação da metodologia empregada.

Dentro do separador supersônico ocorre uma onda de choque cuja posição varia em função da relação de áreas da geometria. A geometria deve ser projetada de tal modo que a posição da onda de choque se situe após a região de separação do CO₂.

O comportamento do escoamento ao longo do separador supersônico é investigado através de uma avaliação dos diferentes modelos de gás real e de estudos sobre os efeitos da variação da pressão de entrada (mantendo a razão entre pressão de entrada e saída), da temperatura de entrada, da composição do gás e dos modelos de turbulência.

A partir da obtenção das propriedades termodinâmicas do fluido em questão, deve-se verificar se a pressão e temperatura satisfazem as condições nas quais ocorre a condensação do CO₂, o que vai permitir a separação dos gases através da diferença de massa específica por intermédio de uma centrifugação aplicada.

5 RESULTADOS E ANÁLISES

5.1 Verificação de Modelo Computacional

A abordagem utilizada na resolução do problema apresentado neste relatório foi validada através de dados e resultados disponíveis no artigo do Arina, Renzo [14]. A geometria do bocal supersônico utilizada pelo Arina segue a seguinte equação:

$$\begin{cases} A(x) = 2,5 + 3 \left(\frac{x}{x_{th}} - 1,5 \right) \left(\frac{x}{x_{th}} \right)^2 & x \leq x_{th} \\ A(x) = 3,5 - \frac{x}{x_{th}} \left(6 - 4,5 \frac{x}{x_{th}} + \left(\frac{x}{x_{th}} \right)^2 \right) & x \geq x_{th} \end{cases} \quad (76)$$

onde $A_{throat} = 100 \text{ mm}^2$, comprimento $x_{max} = 100 \text{ mm}$ e a garganta posiciona em $x_{th} = 50 \text{ mm}$.

Na simulação de validação, é considerado o modelo invíscido de Euler, o fluido de trabalho é o ar, a pressão e a temperatura de entrada são $P_{inlet} = 100000 \text{ Pa}$ e $T_{inlet} = 288 \text{ K}$ respectivamente. A velocidade de entrada é $M_{inlet} = 0,239543$ e a relação de pressão de saída sobre pressão de entrada é $P_{outlet}/P_{inlet} = 0,84049$. A equação de estado utilizada foi a de Redlich-Kwong. Uma comparação da variação da pressão ao longo da linha de centro do bocal da simulação e do trabalho do Arina é mostrada no Gráfico 1 abaixo. Observa-se que um comportamento similar dos resultados foi obtido e que a onda de choque foi capturada precisamente pelo modelo da simulação aqui adotado. Consequentemente, temos a verificação que as previsões do modelo estão coerentes.

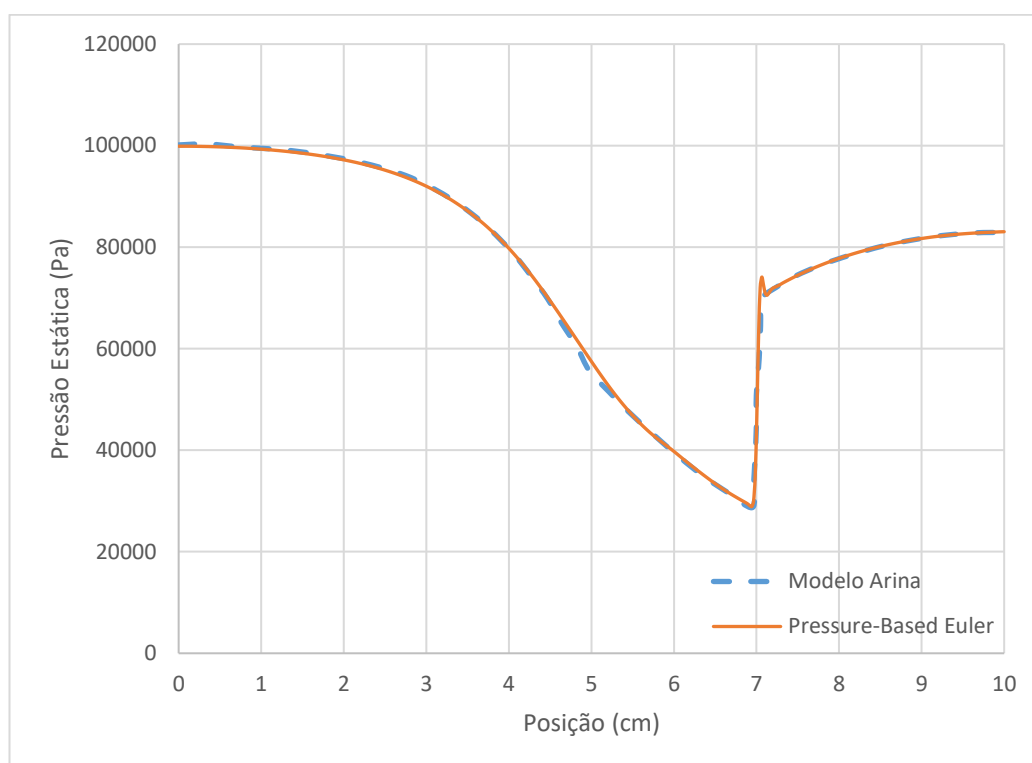


Gráfico 1 – Comparação do perfil de pressão dos modelos

5.2 Geometria Computacional

A geometria do separador supersônico utilizado nas simulações consiste em um bocal de Laval, uma seção de separação ciclônica e um difusor, como mostrado na Figura 8. Adicionalmente, um tubo reto é conectado a montante do separador com o intuito de gerar um escoamento plenamente desenvolvido na entrada do bocal. A geometria foi baseada na configuração apresentada no artigo [15], porém com as devidas modificações uma vez que no artigo são apresentados resultados considerando a geometria planar e o caso aqui estudado é axissimétrico.

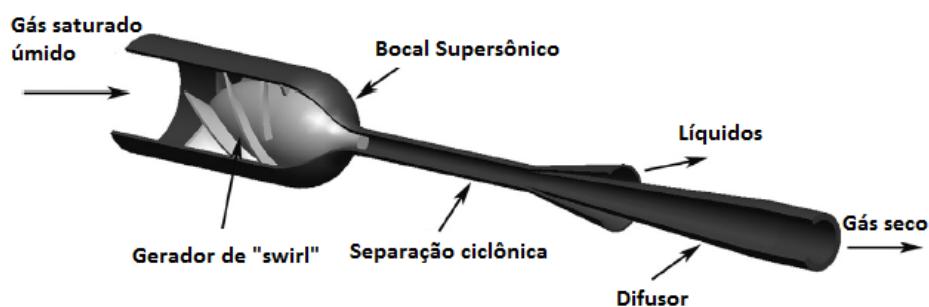


Figura 8 – Diagrama esquemático do separadore supersônico [15].

O perfil cúbico da seção convergente do bocal de Laval é descrito segundo a equação a seguir (sendo $\chi_m = 0,45$):

$$\begin{cases} \frac{D - D_{cr}}{D_{in} - D_{cr}} = 1 - \frac{1}{\chi_m^2} \left(\frac{x}{L_{conv}} \right)^3 & \left(\frac{x}{L_{conv}} \leq \chi_m \right) \\ \frac{D - D_{cr}}{D_{in} - D_{cr}} = \frac{1}{(1 - \chi_m)^2} \left(1 - \frac{x}{L_{conv}} \right)^3 & \left(\frac{x}{L_{conv}} \geq \chi_m \right) \end{cases} \quad (77)$$

Já o perfil da seção divergente do bocal de Laval segue o Método de Foelsch [16]. Assim, o primeiro ramo do perfil é um arco de circunferência cujo raio é $R_c = 743,314 \text{ mm}$ e o segundo ramo após o ponto de inflexão é descrito pela equação cúbica a seguir:

$$\begin{aligned} \frac{D - D_{out}}{D_{cr} - D_{out}} = & \frac{K_1}{(1 - \chi_m)^2} \left(1 - \frac{x}{L_{div,cub}} \right)^3 \\ & + \frac{K_2}{(1 - \chi_m)^2} \left(1 - \frac{x}{L_{div,cub}} \right)^2 \end{aligned} \quad (78)$$

onde $K_1 = -0,322392$, $K_2 = 1,322392$ e $L_{cub,div} = 45,48 \text{ mm}$. As dimensões chaves do separador são encontradas na tabela abaixo.

Tabela 2 – Principais dimensões do separador supersônico

Parâmetro	Nomenclatura	Valor	Unidade
Comprimento do tubo reto	L_{reto}	100	mm
Diâmetro de entrada do bocal	D_{in}	48,79	mm
Diâmetro da garganta do bocal	D_{cr}	20,35	mm
Diâmetro de saída do bocal	D_{out}	23,80	mm
Comprimento do convergente	L_{conv}	186,60	mm
Comprimento do divergente	L_{div}	75,80	mm
Comprimento do separador ciclônico	L_{cyc}	245,20	mm
Diâmetro de saída do difusor	D_{dif}	43,63	mm
Comprimento do difusor	L_{dif}	534,00	mm
Comprimento total	L_{tot}	1141,60	mm

5.3 Método Computacional

Nas simulações apresentadas nesse trabalho, o método de discretização numérica dos volumes finitos é empregado para resolver as equações que regem os escoamentos através do software ANSYS Fluent. O escoamento é considerado estacionário e axissimétrico. O modelo de turbulência k- ϵ RNG é utilizado nas simulações pelos motivos mostrados na seção 3.5.4.6. Dentro do modelo de turbulência são habilitadas as opções “*Enhanced Wall Treatment*” (“*Pressure Gradient Effects*” e “*Thermal Effects*”), “*Viscous Heating*” e “*Compressibility Effects*” afim de levar em consideração o gradiente adverso de pressão no choque, além dos efeitos de compressibilidade e termodinâmicos associados ao escoamento, conforme visto na seção 3.5.4. O método de solução escolhido foi o “*Pressure-Based*” usando o algoritmo “*Coupled*” com o intuito de melhorar a convergência. O método de discretização espacial de diferenças centrais de segunda ordem (“*Second Order*”) foi adotado para interpolar os valores de pressão nas faces do volume de controle. Já para as variáveis massa específica, quantidade de movimento, energia, energia cinética de turbulência e taxa de dissipação de turbulência o método “*Second Order Upwind*” foi escolhido para a interpolação. Uma condição de contorno de pressão na entrada tendo como parâmetros a pressão total ($P_{inlet,T}$) e temperatura total ($T_{inlet,T}$) foi imposta. A condição de contorno na saída também foi de pressão tendo como parâmetro pressão estática (P_{outlet}). A Operating Pressure utilizada foi de 0 Pa, ou seja, as pressões apresentadas são absolutas. No geral, o critério de convergência utilizado foi 1×10^{-5} de resíduo para todas as equações envolvidas.

Nas simulações em que não há nenhuma especificação complementar, a composição do gás natural é de 100% metano (CH_4) e nesse estudo os efeitos de “swirl” são desconsiderados.

5.4 Malha Computacional

A malha foi criada no software ANSYS Meshing. Adotou-se uma malha de quadriláteros que foi refinada de tal modo que o comportamento do escoamento alterasse minimamente entre uma malha e outra, ou seja, se tornasse independente da malha utilizada. Também foi levado em consideração redução do valor de y^+ entre as malhas testadas.

5.4.1 Independência da Malha

Nas simulações realizadas para a definição da malha computacional são usados os seguintes parâmetros: método de solução Pressure-Based, pressão na entrada de 100bar, razão de pressão de saída e pressão de entrada de 0,7, modelo de gás real Redlich-Kwong.

Um parâmetro importante utilizado na geração da malha é o Bias Factor. Em uma simulação bidimensional, esse fator representa a taxa de crescimento das células da malha em uma aresta. No caso aqui estudado, ele é a razão entre o comprimento da maior célula e a da menor célula da aresta radial da malha do separador supersônico. O número de células da aresta radial é definido a por meio da análise de independência de malha.

Para definir a malha computacional é necessário que os resultados encontrados nas simulações se tornem independentes da mesma. Desse modo, primeiramente são testados três tipos de refinamentos no sentido radial: 50 radial x 1000 axial, 100 radial x 1000 axial, 150 radial x 1500 axial.

Observando o Gráfico 2, percebe-se que os resultados para o número de Mach são similares independentemente do número de elementos de volume no sentido radial. No entanto, existe uma forte variação do valor de y^+ em função do refinamento radial, como mostrado nos Gráficos 2 e 3.

Dados os resultados no Gráfico 3, nota-se elevados valores de y^+ para 50 elementos no sentido radial. Então, é feito em seguida um estudo no Gráfico 4 do valor de y^+ em função do Bias Factor afim de reduzir o valor de y^+ sem aumentar consideravelmente o número de células, ou seja, sem aumentar o custo computacional.

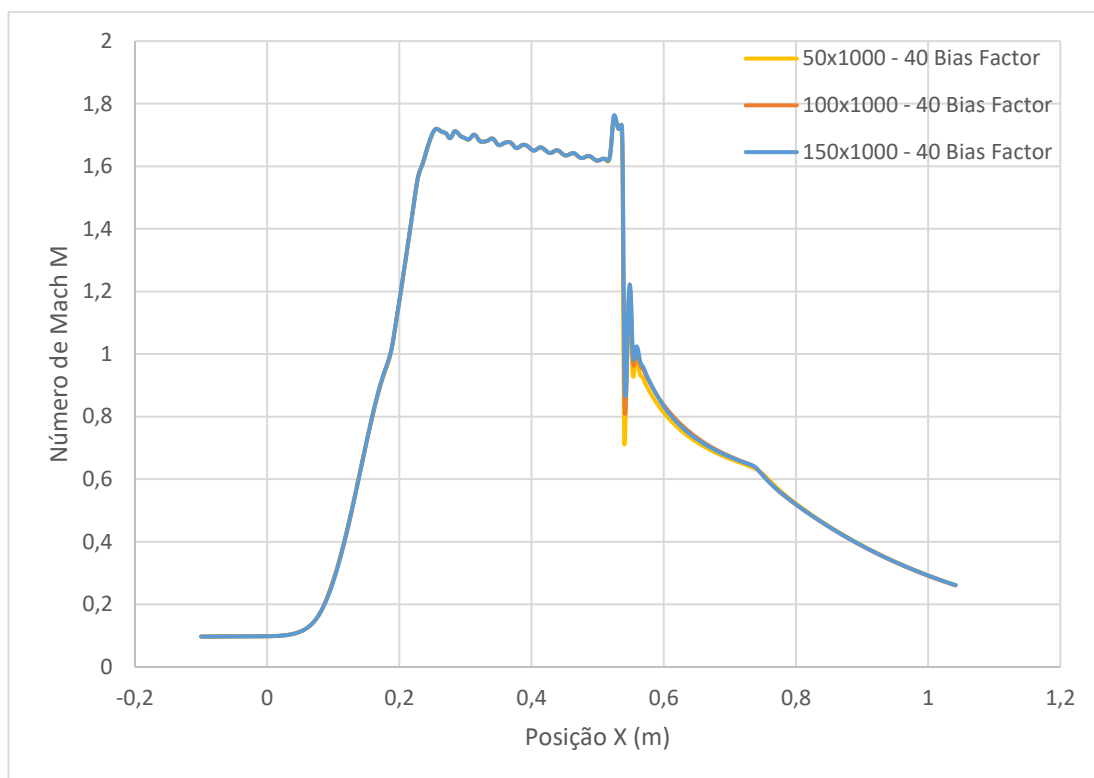


Gráfico 2 – Número de Mach no eixo em função do refinamento radial

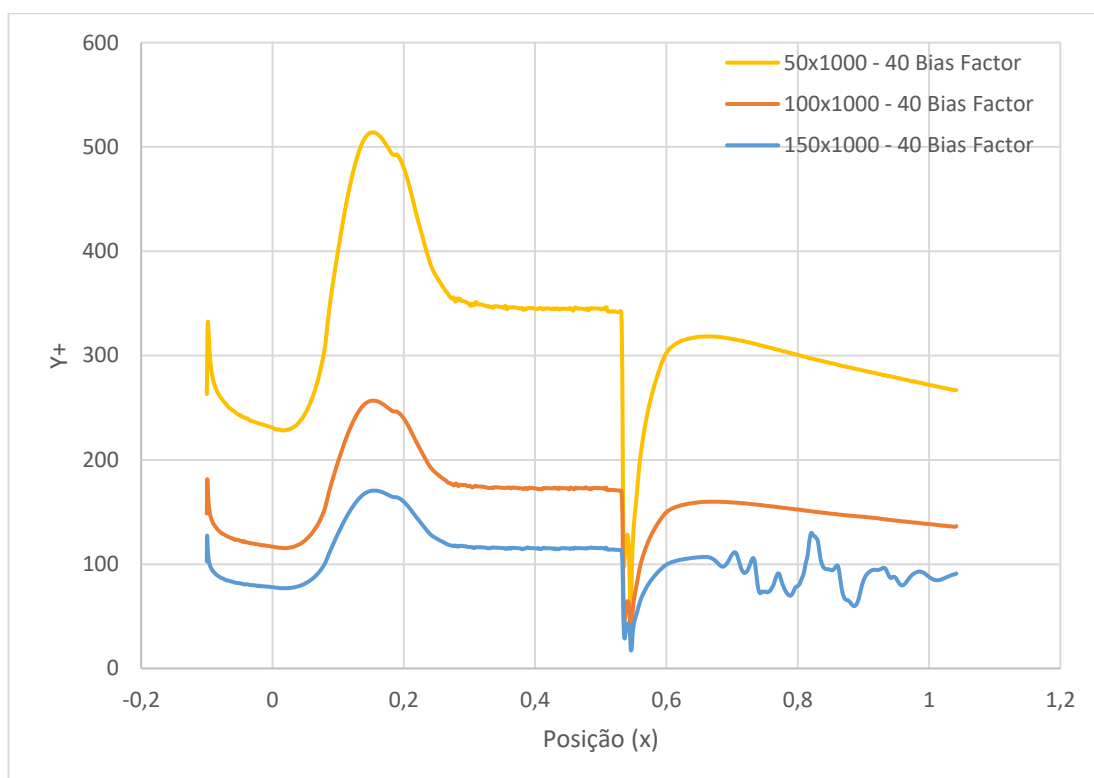


Gráfico 3 – Y+ em função do refino da malha no sentido radial

Tendo em vista os resultados do Gráfico 4, escolhe-se a malha de 50x1000 com 150 de Bias Factor, uma vez que ela apresenta valores de y^+ inferiores a 200 assim como as malhas de 100x1000 com 60 de Bias Factor e 150x1000 com 40 de Bias Factor, mas com menos volumes que as demais malhas.

Finalmente, os efeitos do refinamento longitudinal da malha são estudados através de três tipos de malha: 50 radial x 500 longitudinal, 50 radial x 1000 longitudinal e 50 radial x 1500 longitudinal.

Constata-se a partir do Gráfico 5 uma pequena diferença entre a curva de 50x500 e as duas outras na região após a onda de choque. Já as curvas de 50x1000 e 50x1500 apresentam um comportamento similar em todas as regiões do separador supersônico, mostrando a independência do resultado em relação ao refinamento da malha entre 1000 e 1500 elementos longitudinais. Logo, a curva de 50x1000 é escolhida. Desse modo uma malha de 50x1000 com 150 de Bias Factor com um refinamento longitudinal adicional na região da onda de choque é utilizada nos estudos conseguintes realizados neste trabalho.

A Figura 9 mostra a malha computacional na região onde estima-se que ocorre a onda de choque.

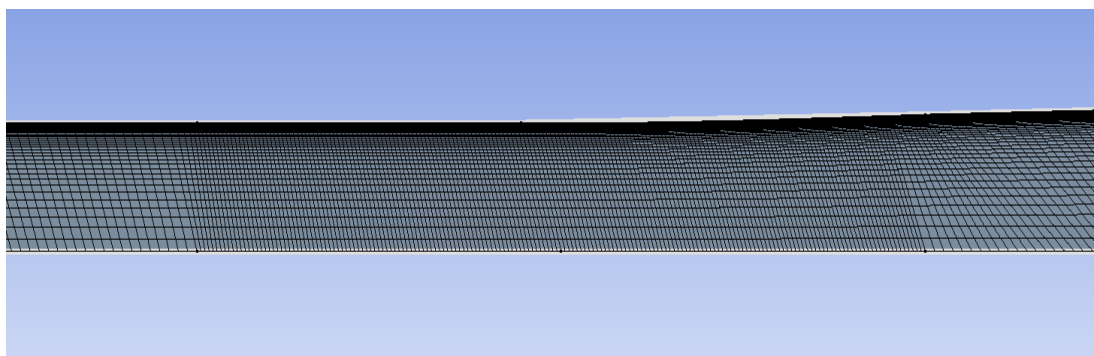


Figura 9 – Malha computacional na região da onda de choque

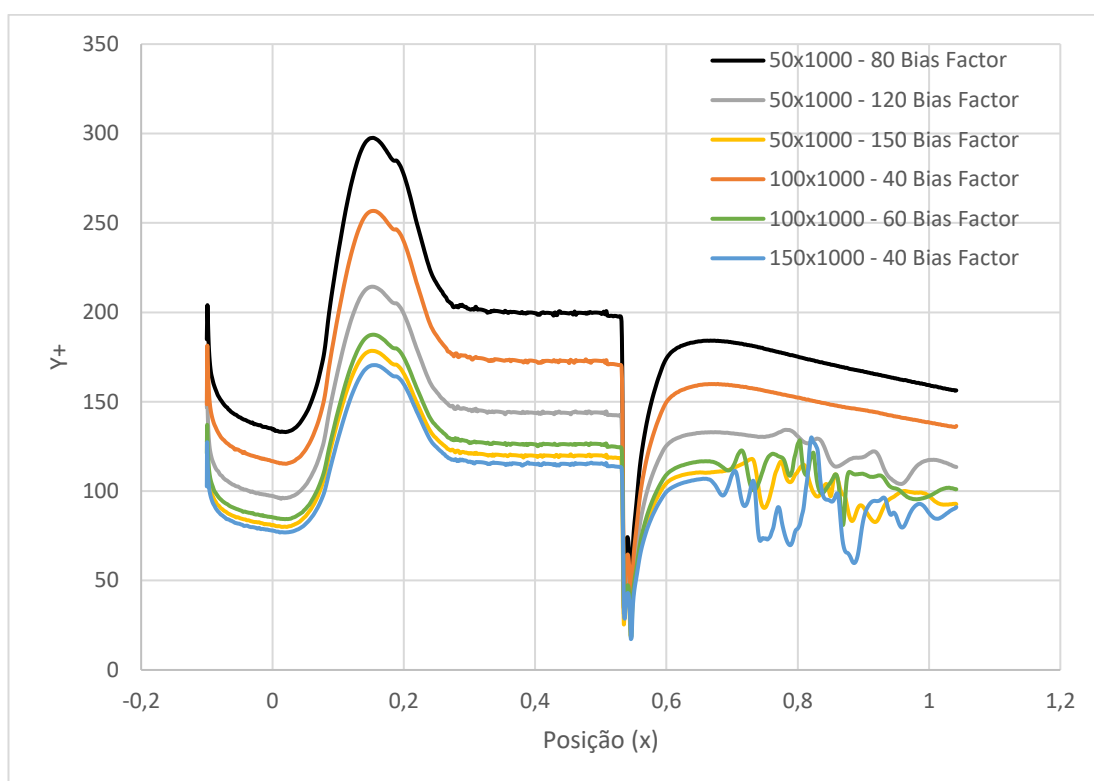


Gráfico 4 - Y+ em função do refino da malha no sentido radial e do Bias Factor

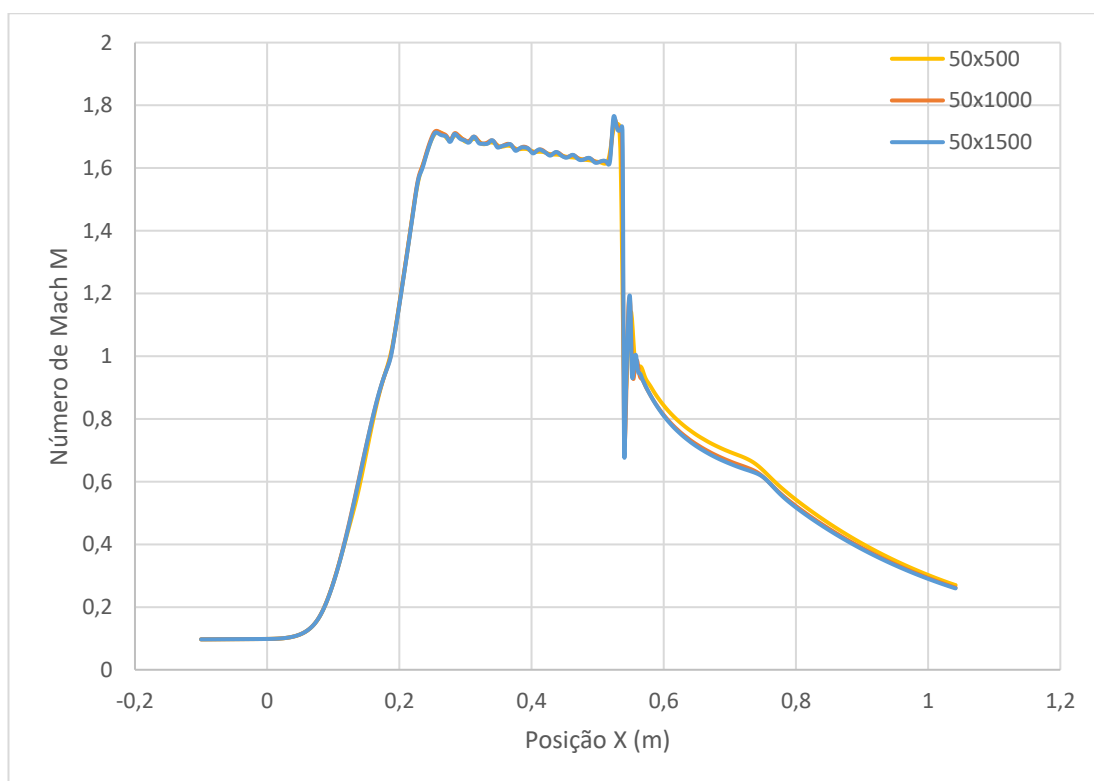


Gráfico 5 - Número de Mach no eixo em função do refinamento longitudinal

5.5 Análise de Número de Mach, Pressão e Temperatura

Nas figuras 10, 11 e 12 apresentadas abaixo, mostra-se a distribuição dos valores do número de Mach, pressão estática e temperatura estática para o escoamento de metano (CH_4) ao longo do bocal supersônico fazendo-se uso da equação de estado Redlich Kwong. Utilizou-se a condição de contorno descrita na seção 5.3 com os parâmetros $P_{inlet,T}$ igual à 100,6617bar, P_{inlet} igual à 100bar, $T_{inlet,T}$ igual à 288,4608 K e P_{outlet} de 70bar. Vale lembrar que as pressões são absolutas.

Inicialmente, o fluido passa pelo tubo de seção constante cujo intuito é que o escoamento se desenvolva plenamente, onde as propriedades se mantêm aproximadamente constantes, entrando em seguida no bocal de Laval.

Observa-se que conforme o número de Mach aumenta, ou seja, o escoamento é acelerado no bocal, temos como consequência o decrescimento da pressão estática e da temperatura estática, o que condiz com a equação (37), pois com o aumento da velocidade v , a entalpia h deve cair para que a soma de ambas permaneçam constante.

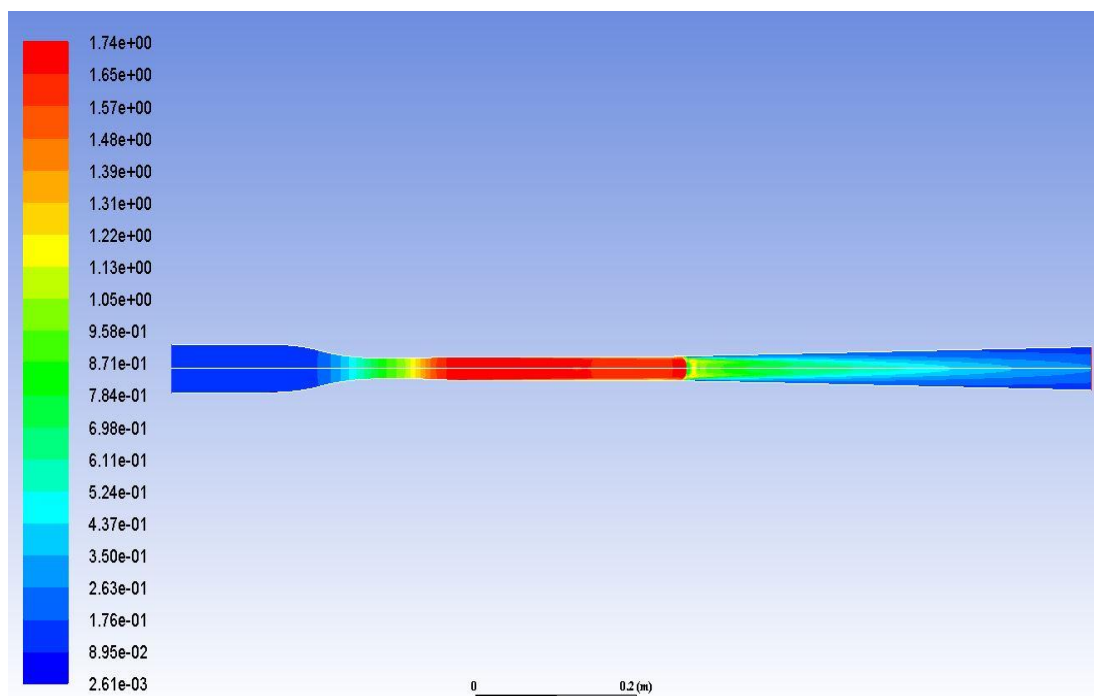


Figura 10 – Campo de Número de Mach – Pressure-Based, Redlich-Kwong

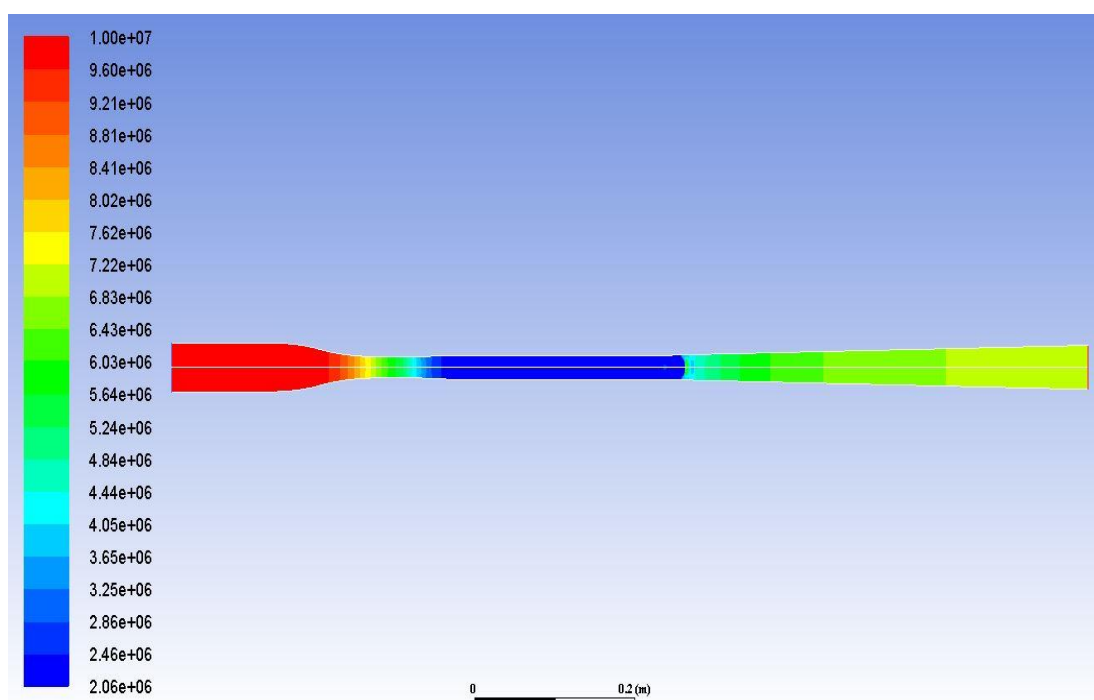


Figura 11 – Campo de Pressão Estática (Pa) – Pressure-Based, Redlich-Kwong

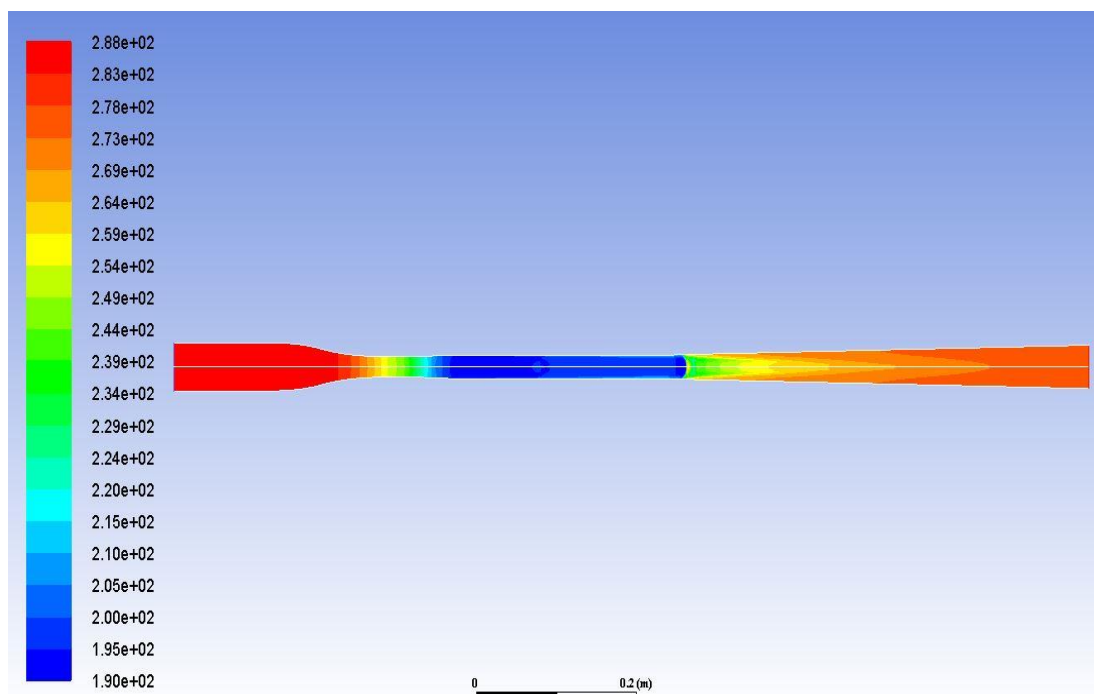


Figura 12 – Campo de Temperatura estática (K) - Pressure-Based, Redlich-Kwong

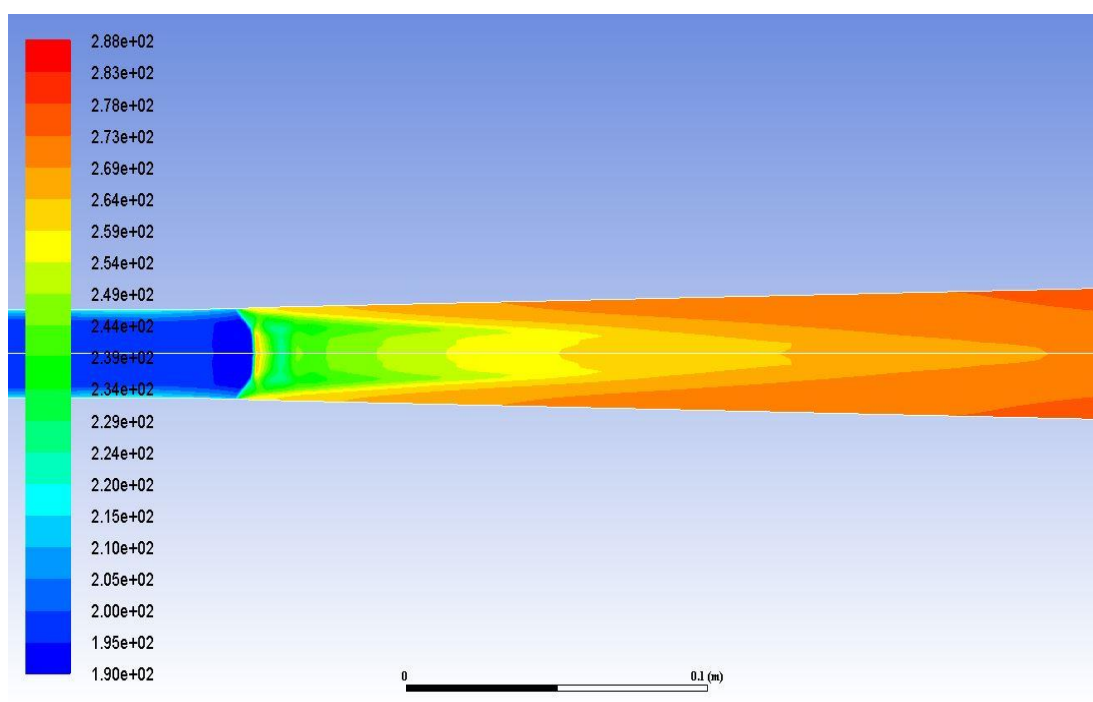


Figura 13 – Campo de Temperatura Estática (K) – Zoom na Onda de Choque

É possível perceber que o valor de Mach na garganta é $M_{th} = 1$, e este valor vai aumentando até o início da região ciclônica. O número de Mach M atinge então seu valor máximo e se mantém praticamente constante ao longo da região de separação ciclônica pois a relação de áreas se mantém constante (seção constante), mesma região onde a temperatura se torna baixa o suficiente para que o CO_2 (supondo que haja uma porcentagem de CO_2 no gás natural) se condense ou até mesmo forme partículas sólidas (Tabela B.3.1 do Van Wylen [9]) enquanto o CH_4 se encontra ainda no estado gasoso, mais especificamente vapor superaquecido (Tabela B.7.2 do Van Wylen [9]). Desse modo, o efeito de swirl, que consiste em um movimento ciclônico imposto a montante, promove uma força centrífuga levando as partículas líquidas em direção à parede, onde se aglutinam e finalmente são coletadas por um dispositivo acoplado. Este é o processo responsável por realizar a separação do CH_4 e do CO_2 por meio diferença de massa específica, uma vez que a massa específica do dióxido de carbono líquido (ou até mesmo sólido) é maior do que a do vapor de metano.

No final da região de separação ciclônica, região em que ocorre a separação dos gases (a configuração foi projetada para isso), ocorre uma onda de choque, local onde o número de Mach é bruscamente reduzido e tanto a pressão estática quanto a

temperatura estática se elevam abruptamente. Após o choque, ocorre uma recuperação de pressão estática e temperatura estática no difusor.

5.6 Efeitos do Modelo de Gás Real

Nesta seção, os efeitos no escoamento das equações de estado de gás real disponibilizadas pelo software Fluent são comparados. As equações de estado são: Redlich-Kwong (RK), Soave-Redlich-Kwong (SRK), Peng-Robinson (PR) e Aungier-Redlich-Kwong (ARK). Utilizou-se também neste caso a condição de contorno descrita na seção 5.3 com os parâmetros $P_{inlet,T}$ igual à 100,6617 bar, $T_{inlet,T}$ igual à 288,4608 K e P_{outlet} de 70 bar. O Gráfico 6, Gráfico 7, Gráfico 8 e Gráfico 9 mostram curvas do número de Mach, da pressão estática, da temperatura estática e da massa específica no processo de separação, mostrando o complexo comportamento do gás através do separador supersônico.

Pode-se perceber que o escoamento de gás é acelerado no bocal atingindo o número de Mach $M_{th} = 1$ na garganta e em seguida alcança o regime de velocidade supersônica na região divergente do bocal. Saindo do bocal, o campo de velocidades se mantém supersônico ao longo da região de separação ciclônica, tendo como resultado a queda da pressão estática, da temperatura estática e da massa específica.

Todos os modelos, seja de gás ideal ou real baseados nas equações de estado citadas acima, apresentam comportamento dinâmico similar do escoamento de gás natural na região que compreende o tubo de seção constante e o bocal, exceto no Gráfico 9 da massa específica onde observamos uma diferença de 20% entre os modelos mais divergentes, gás ideal e PR.

Entretanto, os parâmetros divergiram mais significativamente na região à jusante do bocal, que compreende a região de separação do gás natural e do difusor. Para as curvas do Gráfico 6 e do Gráfico 8, de número de Mach e de temperatura estática respectivamente, os modelos, que não tinham apresentado praticamente diferença alguma na região de $x < 0,29$ m, passaram a divergir, mais notadamente nas curvas de temperatura estática que chegam a apresentar uma diferença de 5,5%.

Os modelos de gás real, comparados com o modelo de gás ideal, preveem um maior número de Mach na zona de separação, uma menor temperatura estática a partir

do bocal até o final do difusor, e o mais discrepante, uma maior massa específica ao longo de toda a configuração, indicando uma diferença relativa de 25% na região de separação ciclônica.

Nota-se que as curvas do Gráfico 7 apresentam uma diferença pouco significativa em todas as regiões do escoamento. Vale ressaltar que a posição da onda de choque se manteve aproximadamente a mesma entre os modelos. Percebe-se também que os modelos de gás real de PR, RK e suas derivações apresentam resultados muito semelhantes.

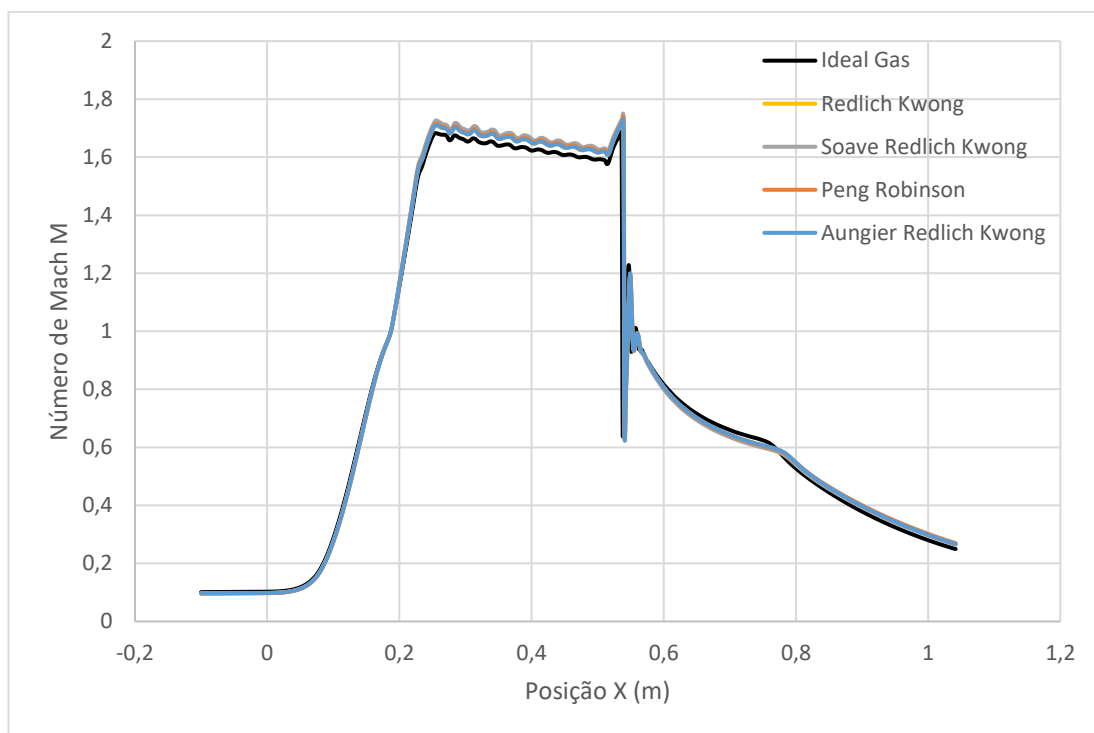


Gráfico 6 – Número de Mach ao longo da linha de centro do dispositivo

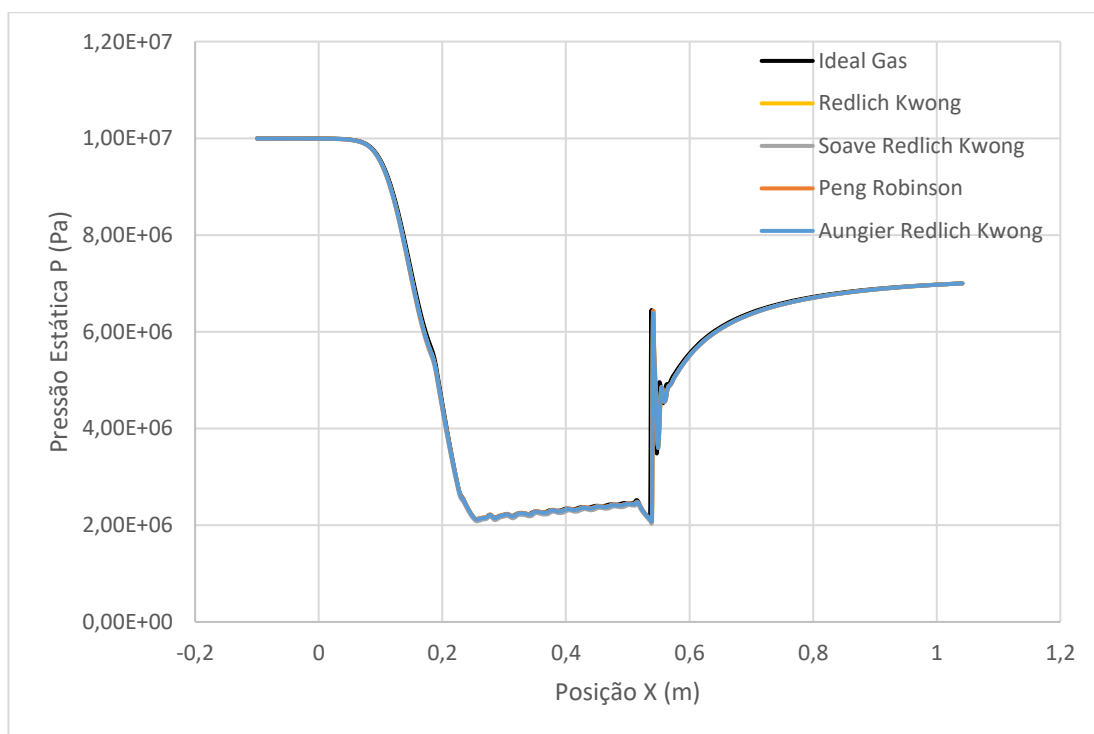
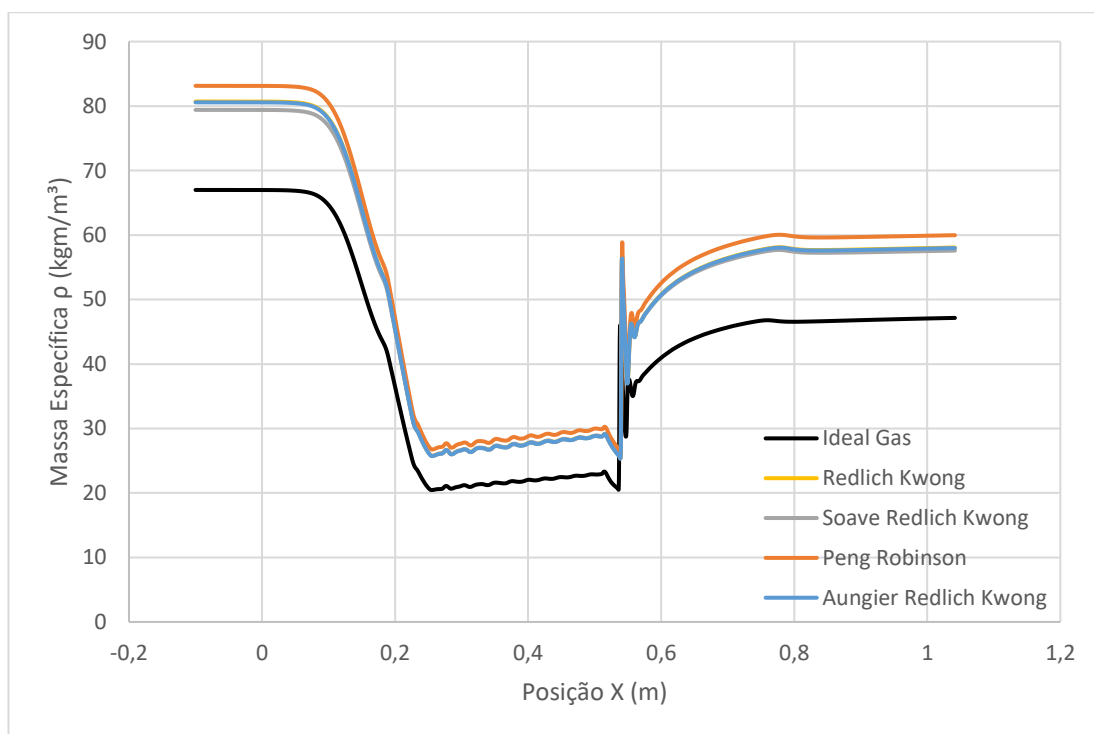
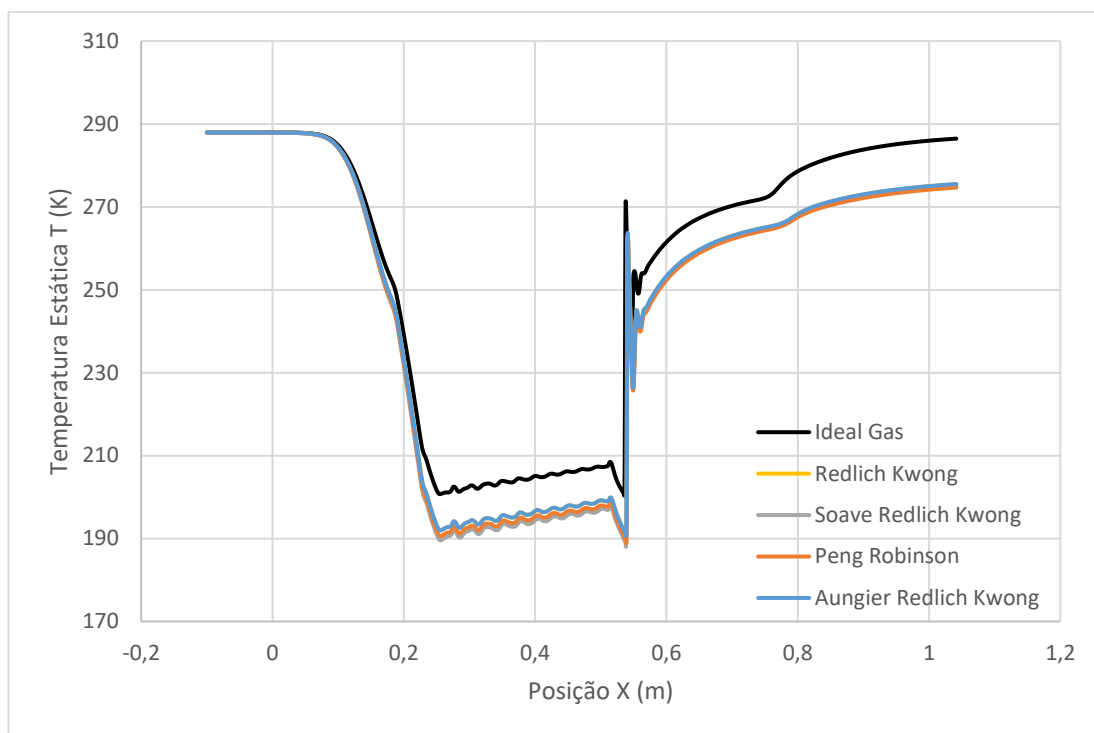


Gráfico 7 – Pressão estática ao longo da linha de centro do dispositivo



5.6.1 Fator de Compressibilidade

Conforme visto na seção 3.1.1.2, para um gás ideal temos que $Z = 1$ e o afastamento de Z em relação a unidade mede o desvio do comportamento do gás real em relação ao previsto pela equação de estado de um gás ideal.

O gráfico abaixo apresenta o fator de compressibilidade Z ao longo do eixo do separador supersônico para diferentes modelos de gás real com pressões de entrada iguais a 10bar e 100bar.

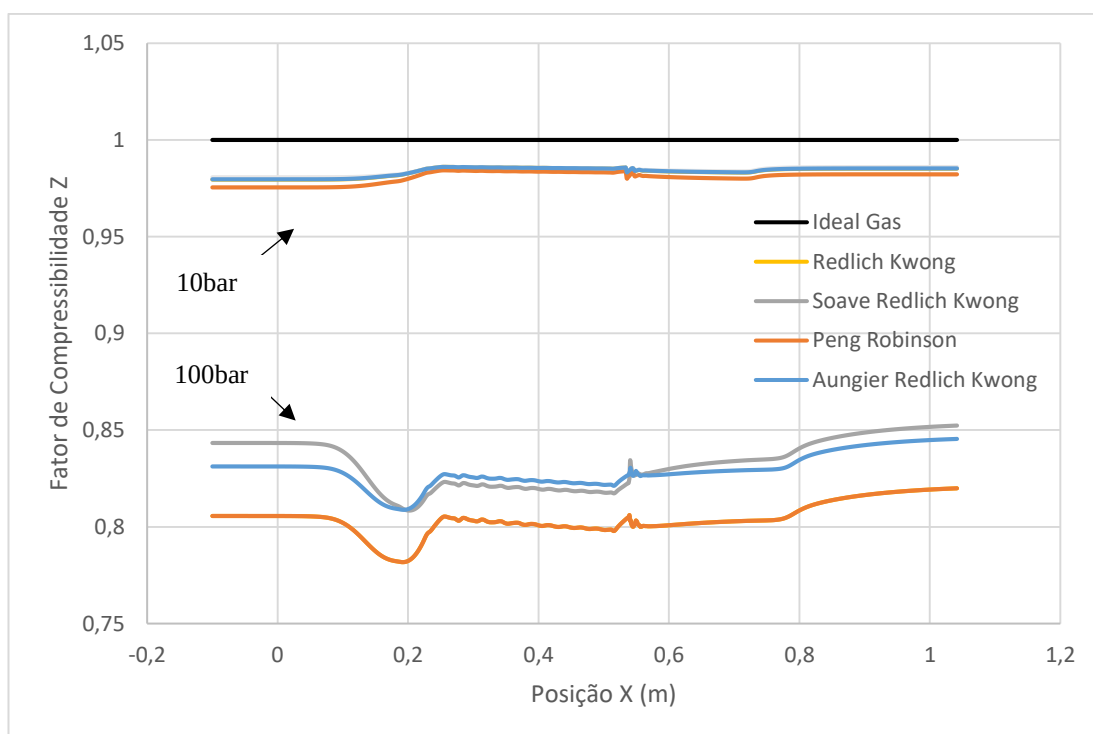


Gráfico 10 – Fator de compressibilidade no eixo do separador

Pode-se observar a partir do gráfico acima que, para todos os modelos de gás real, as curvas do fator de compressibilidade se afastam do valor unitário com o aumento da pressão de 10bar para 100bar. Esse resultado está de acordo com a literatura, a qual prevê que quanto maior a pressão, mais o comportamento do gás real se afasta do gás ideal.

Além disso, nota-se que para uma pressão de entrada de 10bar, os modelos apresentam resultados com diferenças pouco significativas, e para 100bar tem-se uma diferença relativa de aproximadamente 3,3%. Dentre os modelos com resultados muito

próximos, escolhe-se o modelo Redlich Kwong para as futuras simulações pois ele é mais validado na literatura e apresenta uma maior facilidade de convergência nos casos estudados.

5.6.2 Comparação com o Diagrama Generalizado

Na Tabela A2 do Wan Wylen [9], pode-se encontrar os valores das propriedades críticas do metano. Tem-se que:

$$P_C = 4,60 \text{ MPa}$$

$$T_C = 190,4 \text{ K}$$

Ao reduzir as propriedades do escoamento na zona de separação para $x = 0,37m$ a $10bar$ e a $100bar$, chega-se aos valores apresentados na tabela abaixo.

Tabela 3 – Propriedades reduzidas a 10 e 100bar em $x = 0,37 m$

P_{inlet}	10bar	100bar
P (MPa)	0,24	2,3
Pr	0,05	0,5
T (K)	204,5	196
Tr	1,07	1,03

Dados os valores acima, são encontrados os valores do fator de compressibilidade Z por meio do diagrama generalizado como mostrado na Figura 14. A partir das simulações, temos em $x = 0,37$ para $10bar$ um valor de $Z = 0,985598$ e para $100bar$, $Z = 0,801409$. A Tabela 4 apresenta um quadro comparativo entre as duas soluções para o fator de compressibilidade, evidenciando um erro relativo pouco significativo. A partir desse quadro comparativo conclui-se que a simulação está coerente com os dados previstos pelo gráfico de compressibilidade.

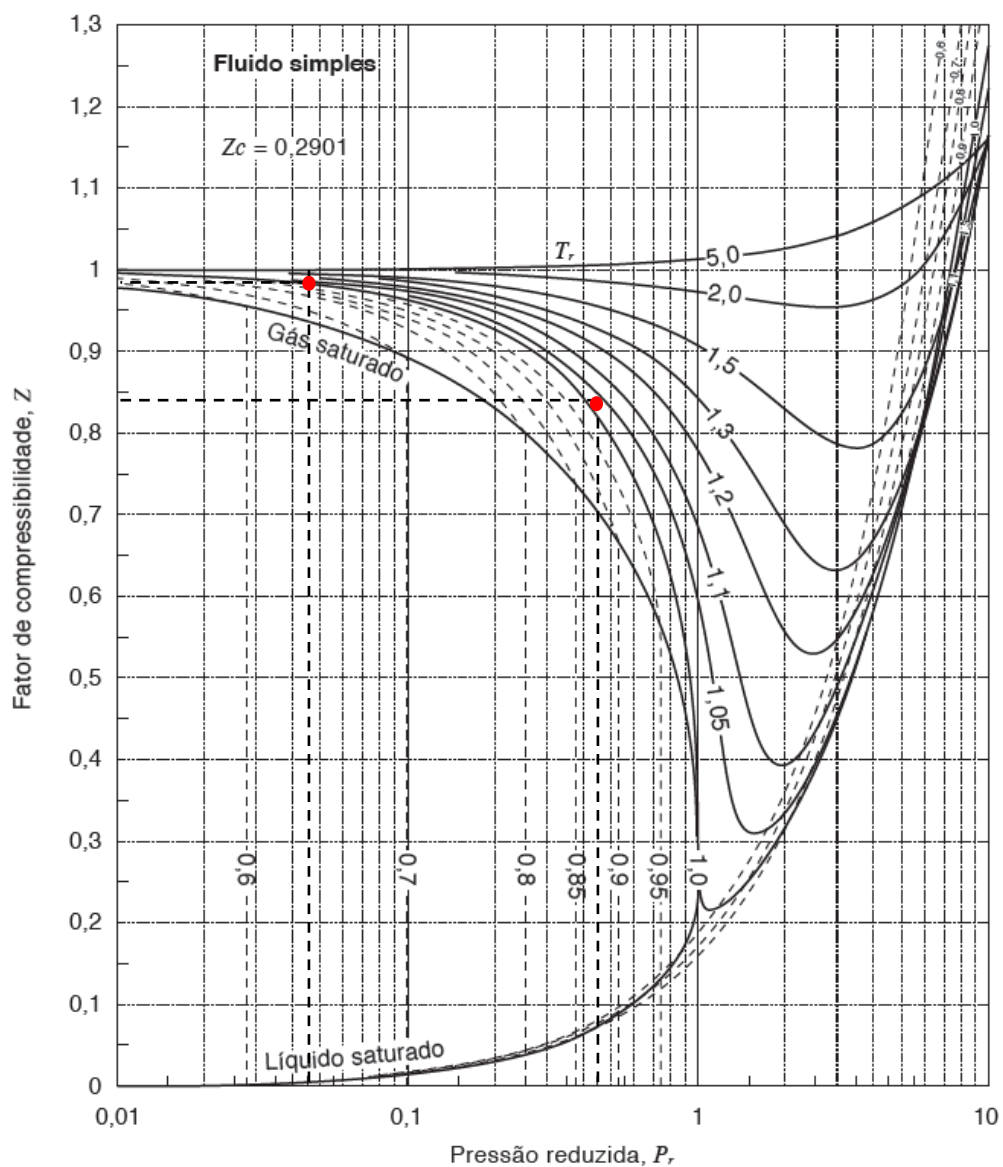


Figura 14 – Diagrama generalizada com propriedades do escoamento

Tabela 4 – Quadro comparativo entre simulação e diagrama generalizado

	Diagrama	Simulação	Erro Relativo
10bar	0,98	0,985598	0,57%
100bar	0,84	0,801409	-4,59%

5.7 Efeitos da Pressão de Entrada

Os efeitos da variação da pressão de entrada são investigados através dos modelos de gás ideal e de gás real Redlich-Kwong. É importante ressaltar que, embora a pressão de entrada tenha sido alterada entre os casos, a razão entre a pressão de saída e pressão de entrada foi fixada ($P_{outlet}/P_{inlet} = 0,7$). Afim de analisar a sensibilidade à pressão de entrada, foram testados os casos de pressão de entrada 1bar, 10bar, 100bar, 200bar e para isso são comparadas as curvas de número de Mach de cada caso.

Constata-se que quanto maior a pressão de entrada, maior é a divergência entre os modelos de gás ideal e de gás real RK. No Gráfico 11 e no Gráfico 12, onde a pressão de entrada imposta é de 1bar e 10bar respectivamente, as curvas não apresentam divergências. Isso pode ser devido ao fato de as condições estarem próximas das condições ambiente, onde o metano está muito afastado de zonas de mudança de fase e da região de fluido supercrítico (quando a pressão e temperatura estão acima da pressão e temperatura crítica respectivamente, região na qual não existe mais distinção entre as fases líquida e gasosa e o fluido pode apresentar características tanto de líquido quanto de gás). Nesse caso, o comportamento de um gás real se aproxima muito do previsto pela lei de gás ideal.

Conforme a pressão de entrada aumenta, percebe-se que os modelos começam a divergir. Com pressão de entrada 100bar, a diferença ainda é sutil, mas para uma pressão de 200 bar, tem-se uma diferença relativa média de 9,33% entre os valores do número de Mach.

É importante ressaltar que a posição da onda de choque entre os modelos (gás ideal e RK) para uma dada pressão de entrada. Mas também é possível observar que a onda de choque ocorre antes, aproximadamente 0,05 m, e apresenta fortes oscilações quando a pressão de entrada é 1bar em relação aos outros casos de 10bar, 100bar, 200bar, como visto no Gráfico 15 – Número de Mach para diferentes pressões de entrada. As simulações que resultam em uma maior divergência são aquelas com pressão de entrada de 1bar e 200bar, apresentando uma diferença relativa média de 31,43%.

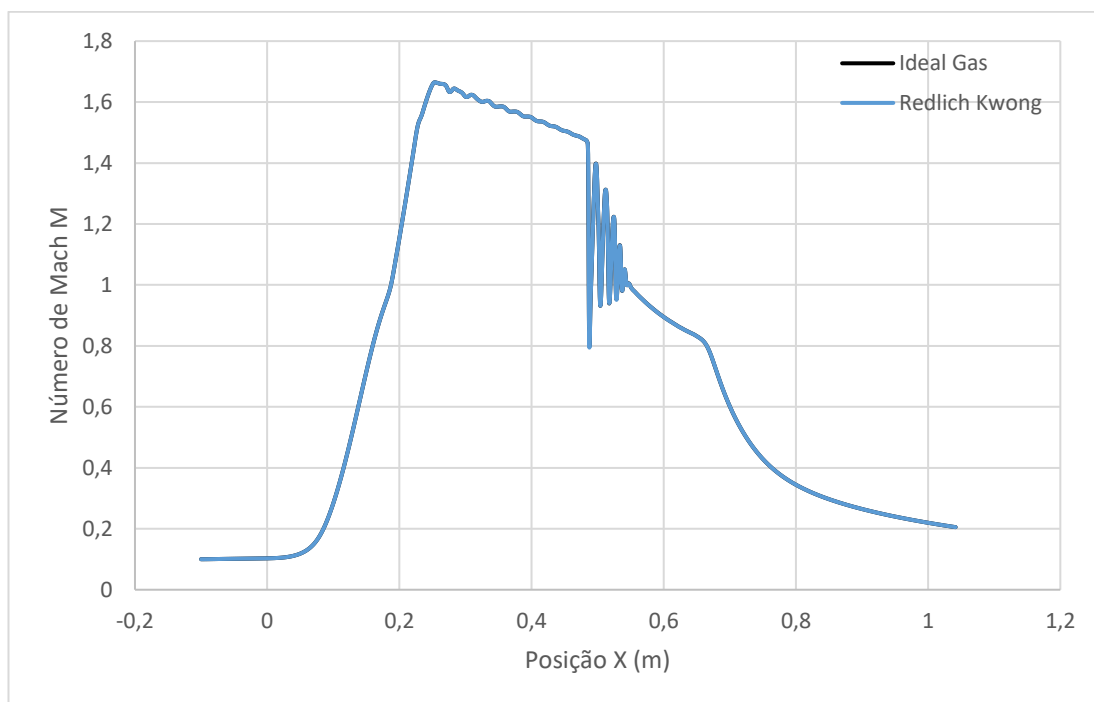


Gráfico 11 – Número de Mach a 1bar ao longo da linha central do dispositivo

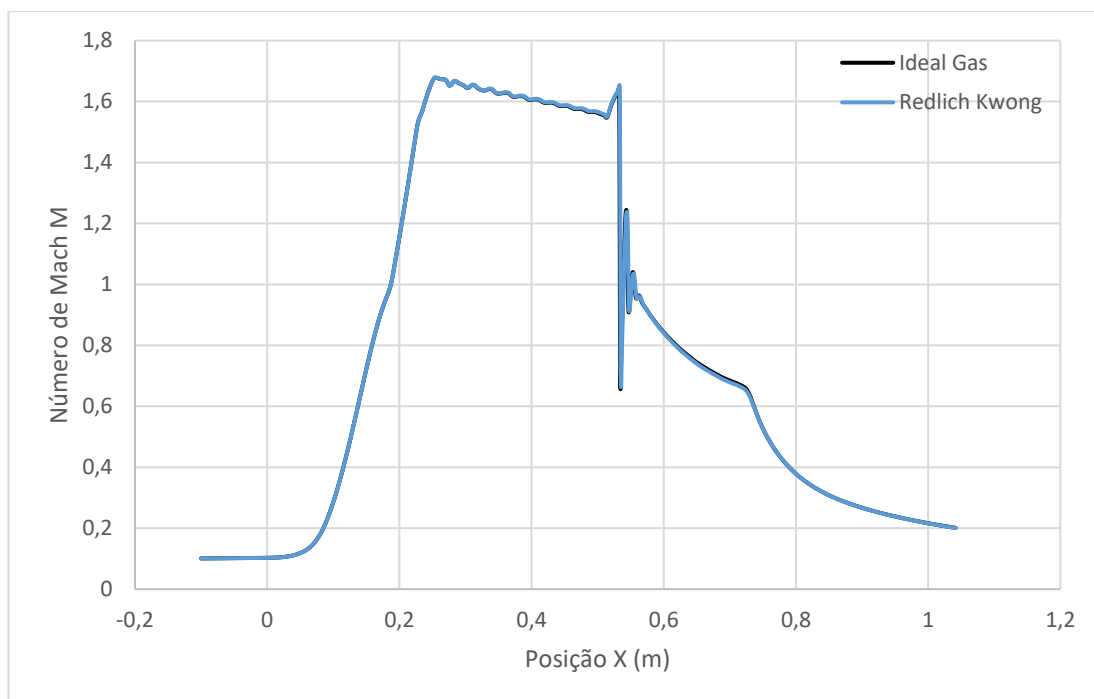


Gráfico 12 – Número de Mach a 10bar ao longo da linha central do dispositivo

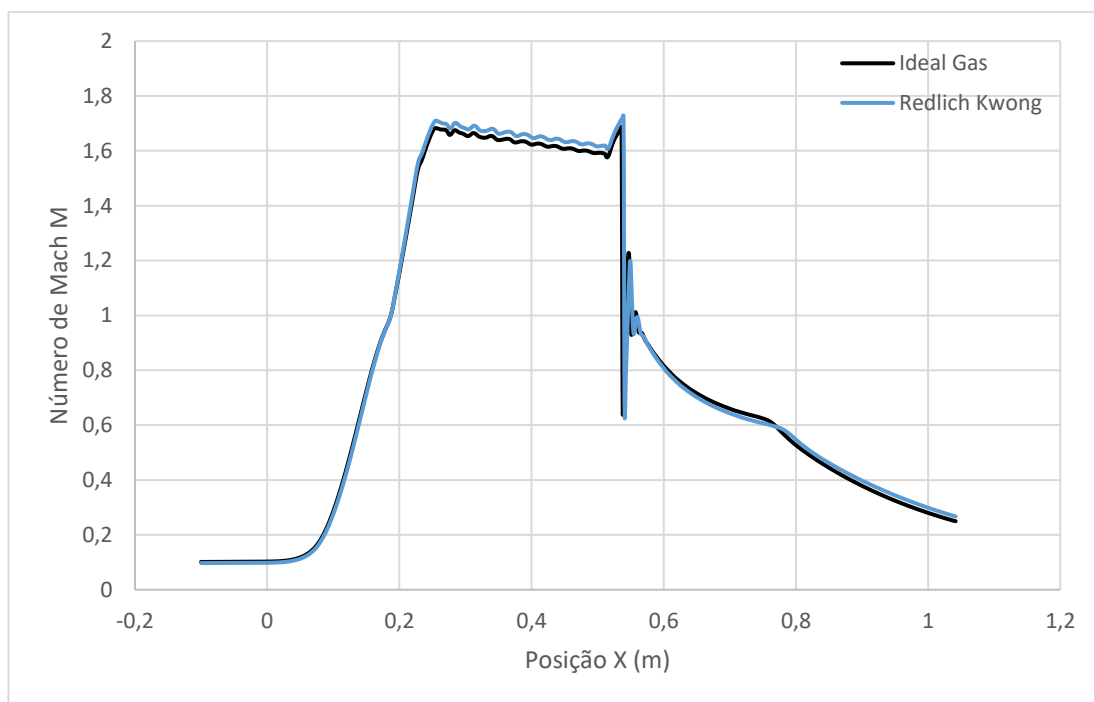


Gráfico 13 – Número de Mach a 100bar ao longo da linha central do dispositivo

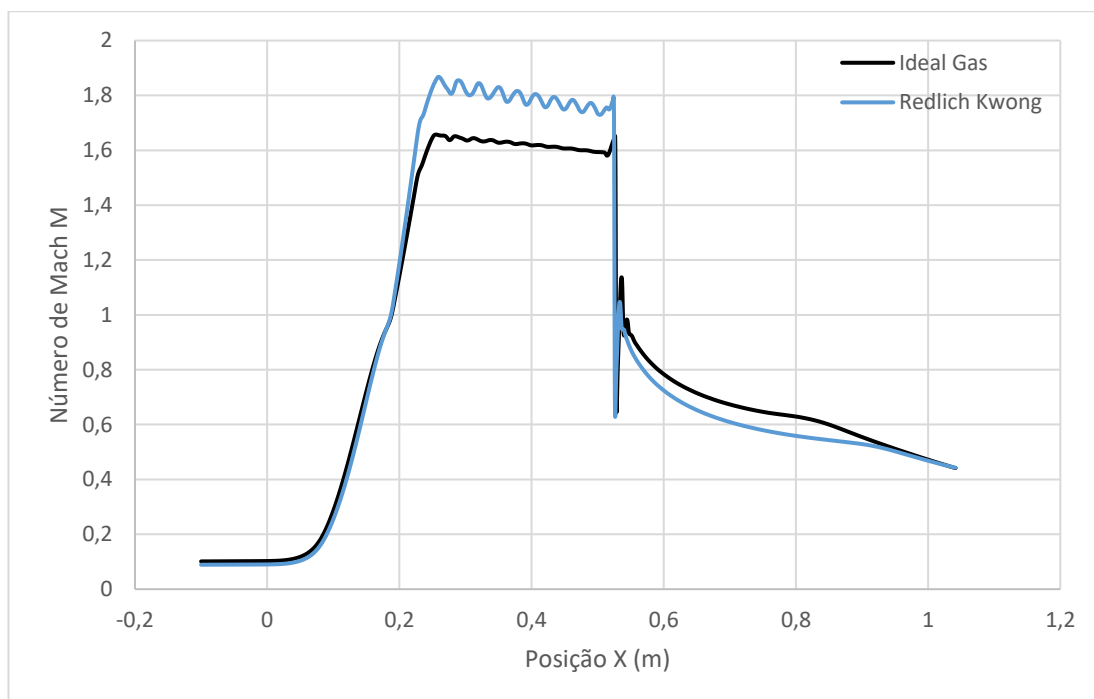


Gráfico 14 – Número de Mach a 200bar ao longo da linha central do dispositivo

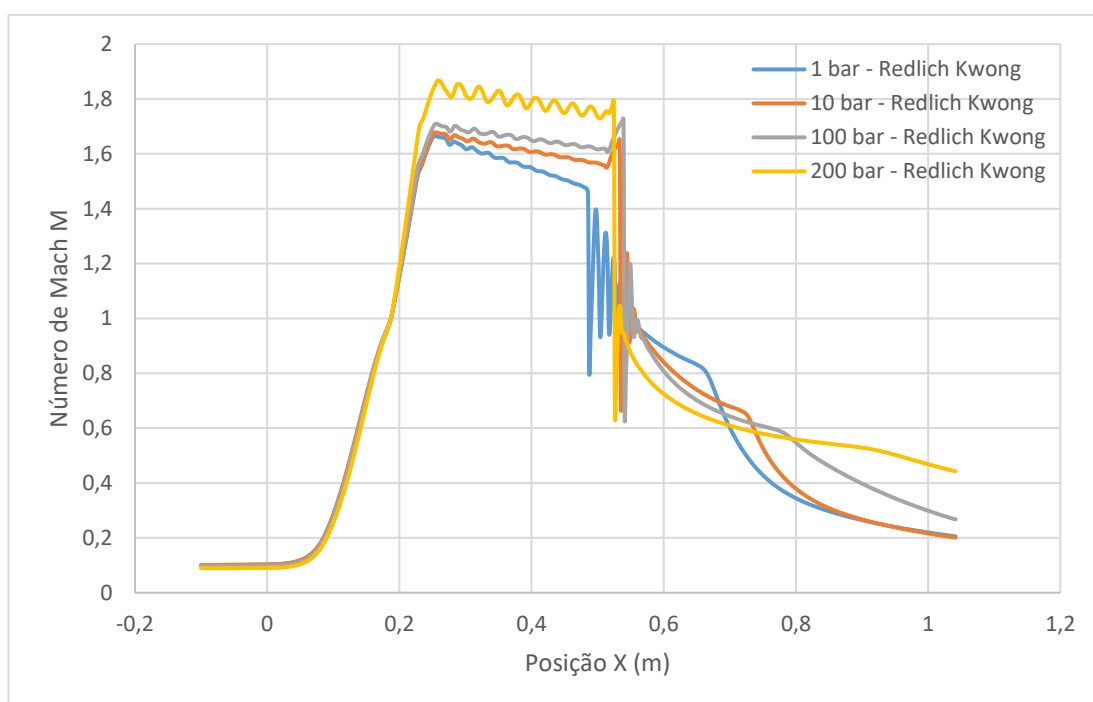


Gráfico 15 – Número de Mach para diferentes pressões de entrada

5.8 Efeitos da Temperatura de Entrada

O gás natural é extraído em condições de alta pressão e temperatura na camada do pré-sal. No entanto, o gás natural pode chegar à cabeça do poço com variadas temperaturas, logo, esta seção destina-se ao estudo dos efeitos da temperatura na entrada do separador supersônico. O modelo de gás real escolhido para as simulações é o Redlich-Kwong. A pressão de entrada é 200bar e as temperaturas de entrada analisadas são de 288K (15°C), 313K (40°C), 343K (70°C) e 373K (100°C).

Os gráficos abaixo descrevem o número de Mach em função da posição longitudinal do dispositivo. A diferença relativa média entre os valores de M das simulações que utilizam modelo de gás real Redlich Kwong e o modelo de gás ideal diminui conforme a temperatura de entrada aumenta, apresentando valores de 9,33% para 288K, 7,29% para 313K, 5,15% para 343K e 4,01% para 373K. Isso é explicado pelo fato de que quanto menor a temperatura, mais próximo o metano está de uma região de mudança de fase, fazendo com que o seu comportamento se afaste do comportamento de um gás ideal, estando de acordo com o previsto na seção 3.1.1.2.

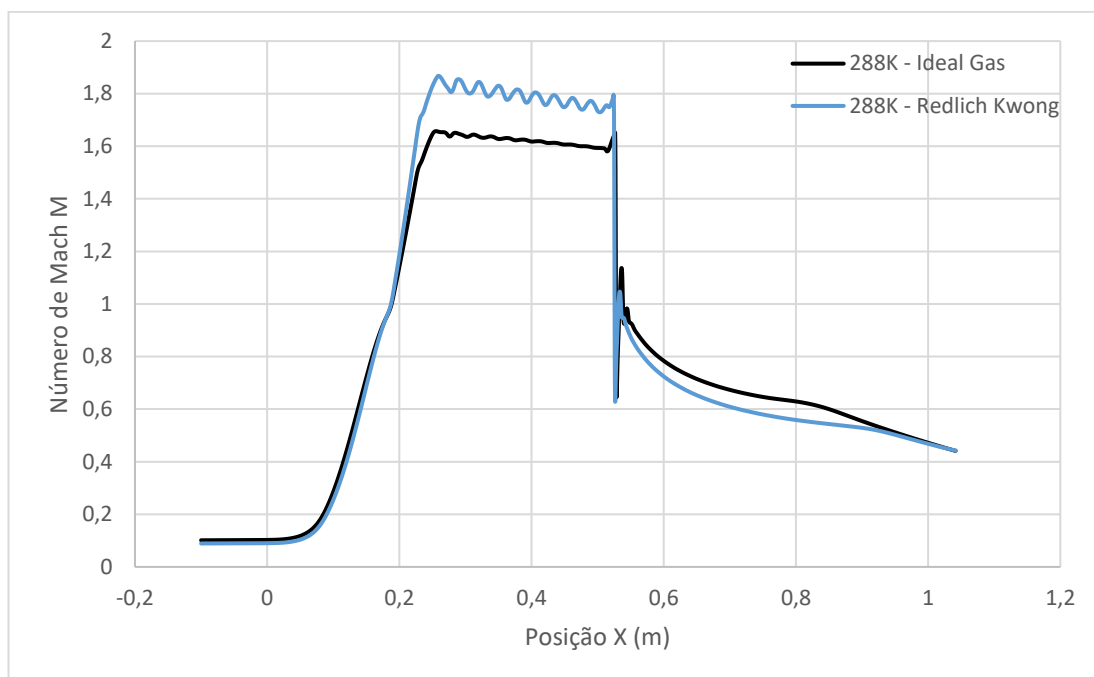


Gráfico 16 – Número de Mach a 288K no eixo do separador supersônico

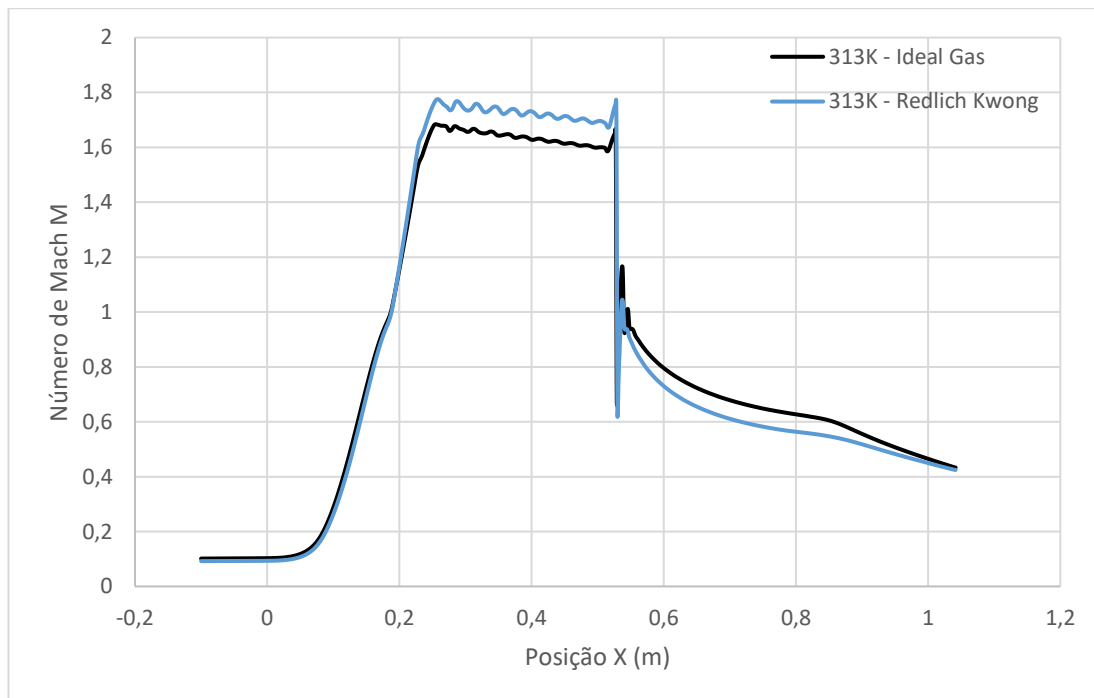


Gráfico 17 – Número de Mach a 313K no eixo do separador supersônico

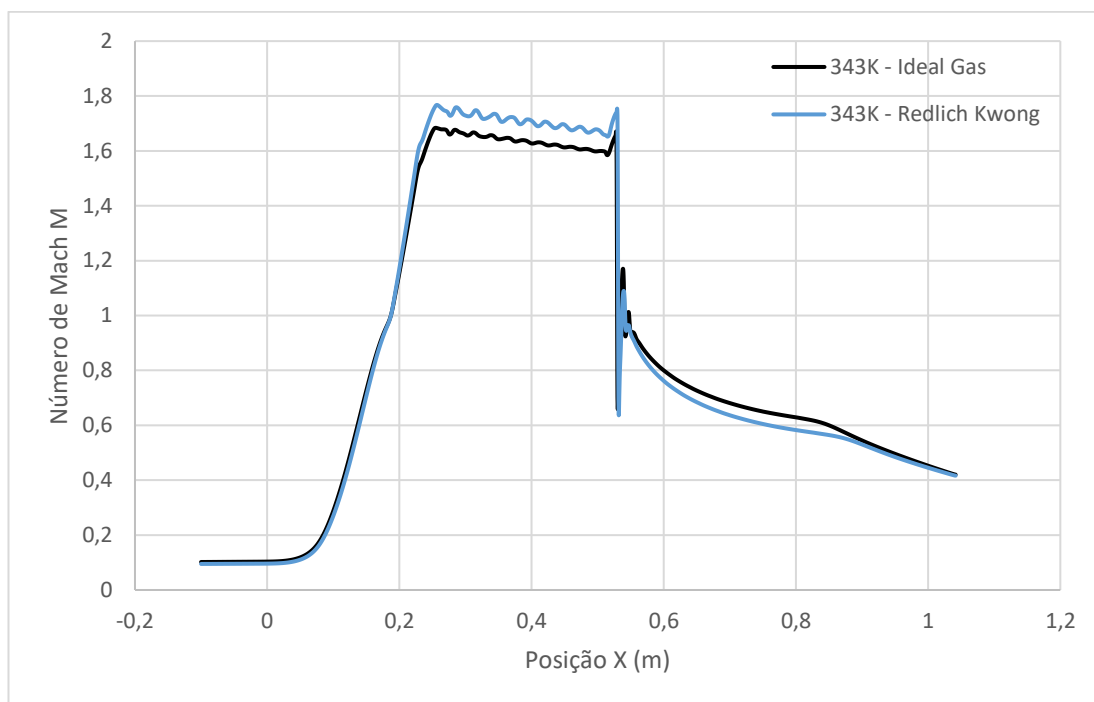


Gráfico 18 – Número de Mach a 343K no eixo do separador supersônico

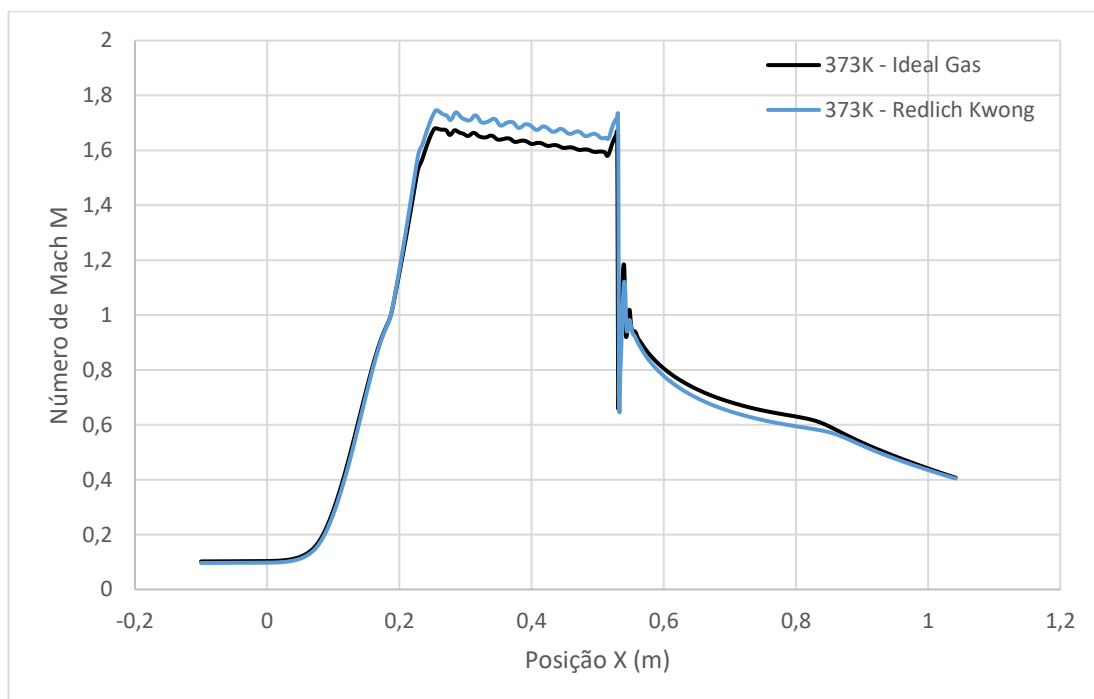


Gráfico 19 – Número de Mach a 373K no eixo do separador supersônico

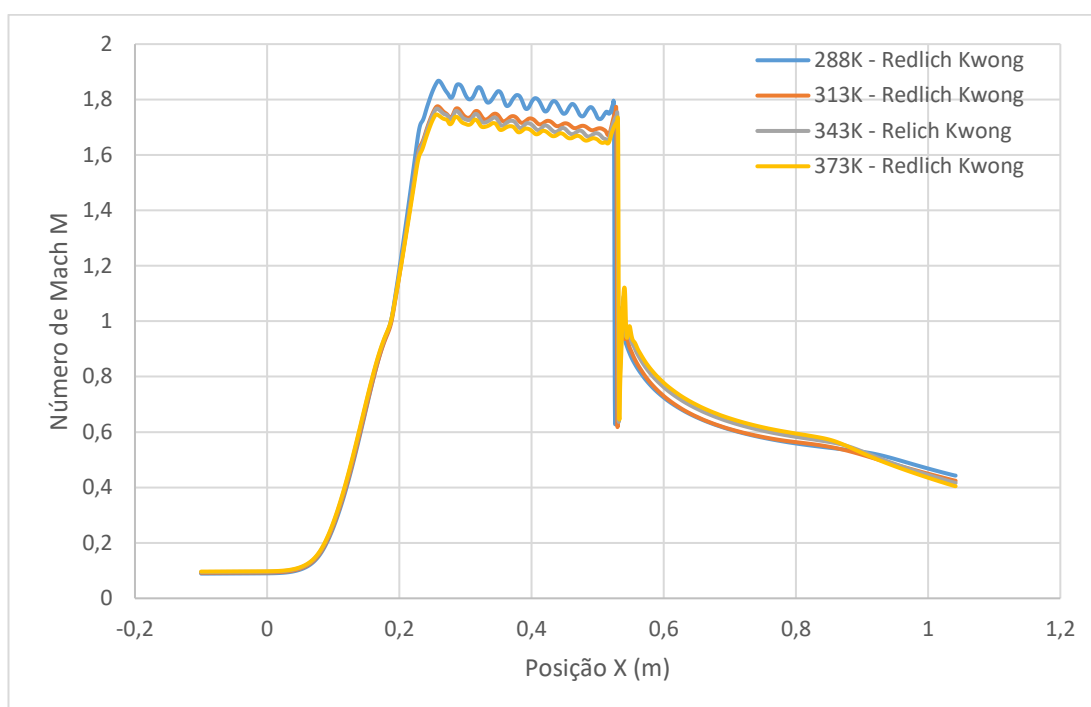


Gráfico 20 – Número de Mach a diferentes temperaturas de entrada

Já no Gráfico 20 é possível perceber que a variação da temperatura de entrada não afeta a posição da onda de choque e quanto menor a temperatura de entrada maior a velocidade na região de separação. Os modelos mais divergentes (288K e 373K) apresentam uma diferença relativa média de 6,66% entre os valores de Mach para a simulação feita com o modelo de gás real Redlich Kwong.

5.9 Efeitos da Composição do Gás Natural

O teor de dióxido de carbono que compõe o gás natural encontrado na região do pré-sal pode variar bastante, como visto na introdução deste relatório. Então, uma análise do comportamento do escoamento é realizada comparando diferentes composições de metano e dióxido de carbono, mantendo-se as condições e parâmetros computacionais apresentados na seção 5.3. A pressão na entrada é fixada a 100bar e a razão P_{out}/P_{in} é mantida em 0,7. O modelo de gás real Redlich Kwong é escolhido para as simulações.

Os resultados obtidos para o número de Mach, pressão, temperatura e massa específica respectivamente são apresentados no Gráfico 21, Gráfico 22, Gráfico 23 e

Gráfico 24 respectivamente. A maior diferença observada está no Gráfico 24, o qual evidencia que quanto maior a porcentagem de CO_2 no gás natural, maior será a massa específica. Isso pode ser explicado pelo fato da massa específica do dióxido de carbono ser maior do que a massa específica do metano.

Os demais gráficos apresentam diferenças pouco significativas. Na região destinada a separação dos gases, onde $250\text{mm} < x < 500\text{mm}$, o número de Mach é ligeiramente reduzido e a pressão e temperatura estáticas são ligeiramente elevadas com o aumento do teor de dióxido de carbono. Além disso, também pode-se notar um rebaixamento do número de Mach e uma maior recuperação da temperatura no final do difusor, ou seja, para $x > 750\text{mm}$.

Analisando as curvas de pressão estática, não é possível perceber diferenças com a variação da composição. Mas, a partir do momento em que é considerado diversos componentes no gás natural, torna-se necessário a análise das pressões parciais de cada um dos componentes para identificar em quais estados eles se encontram. Para isso, uma aproximação de gás ideal é utilizada, calculando-se a pressão parcial através da multiplicação da fração molar pela pressão total $p_{\text{parcial}} = \gamma_{\text{molar}} * p_{\text{total}}$.

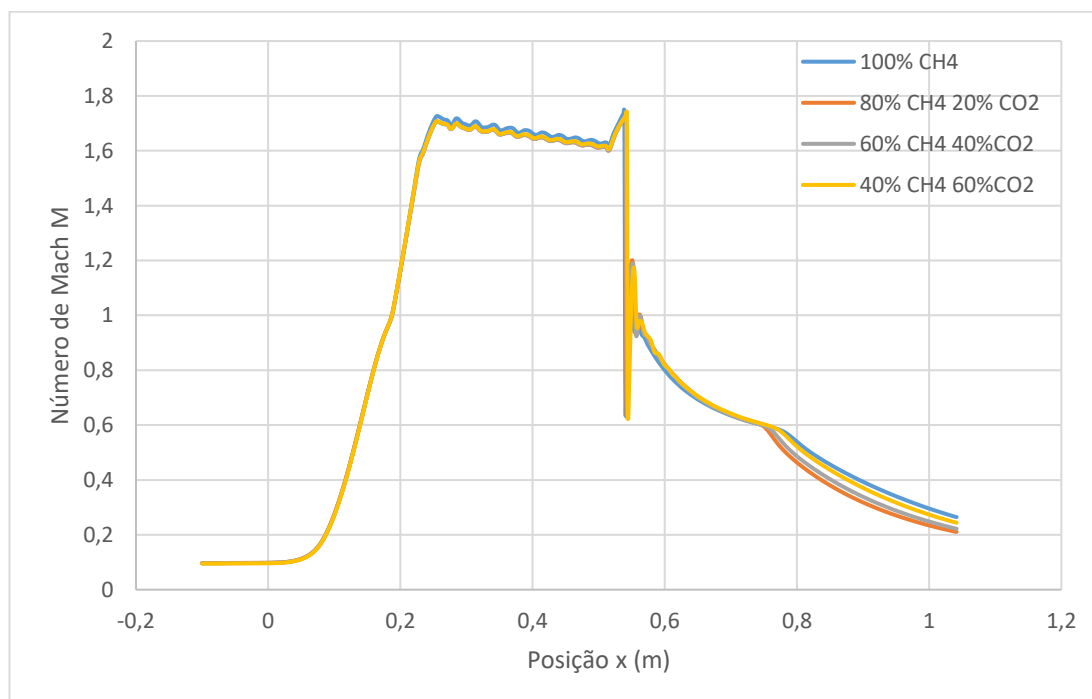


Gráfico 21 – Efeitos da composição do gás sobre o número de Mach

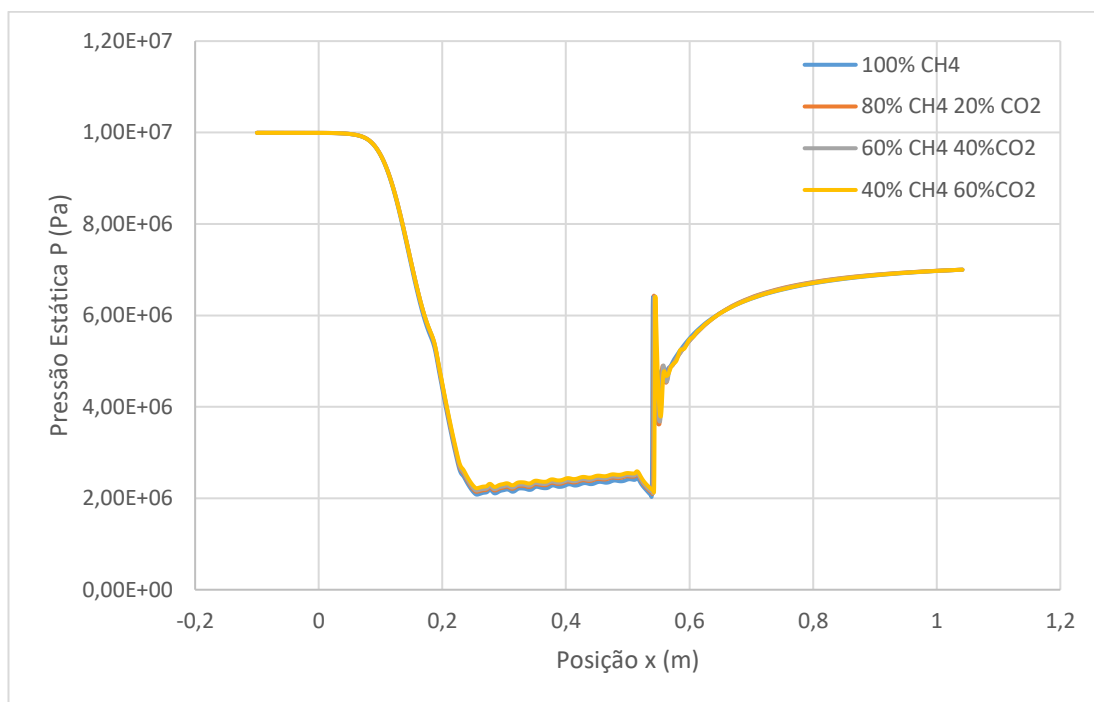


Gráfico 22 – Efeitos da composição do gás sobre a pressão estática

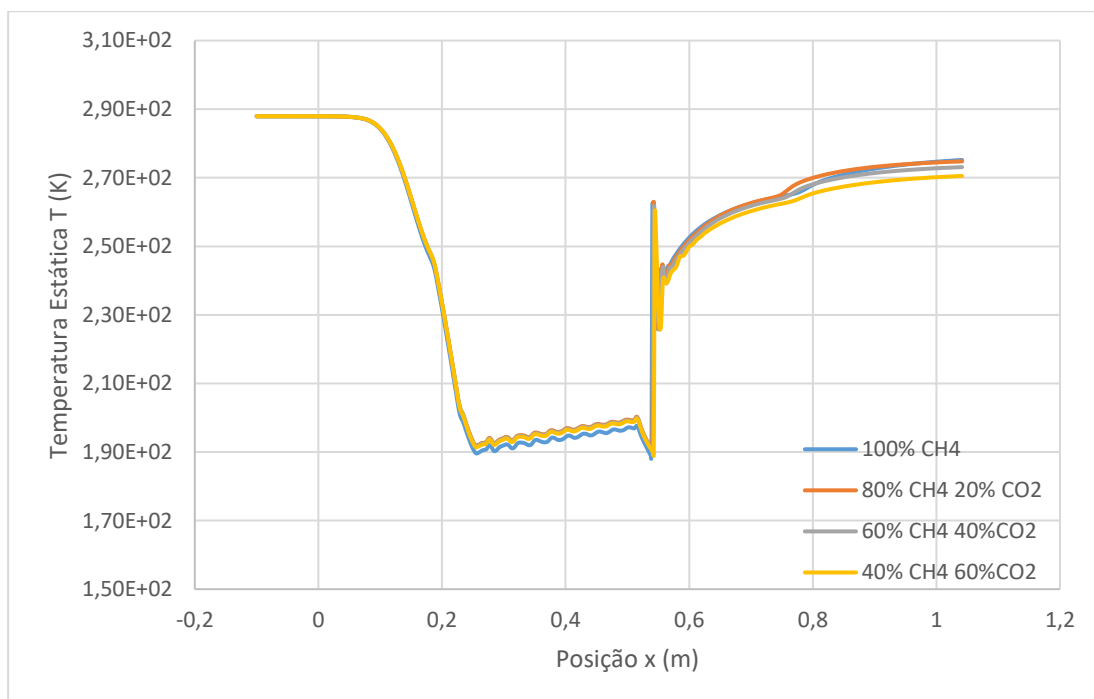


Gráfico 23 – Efeitos da composição do gás sobre a temperatura estática

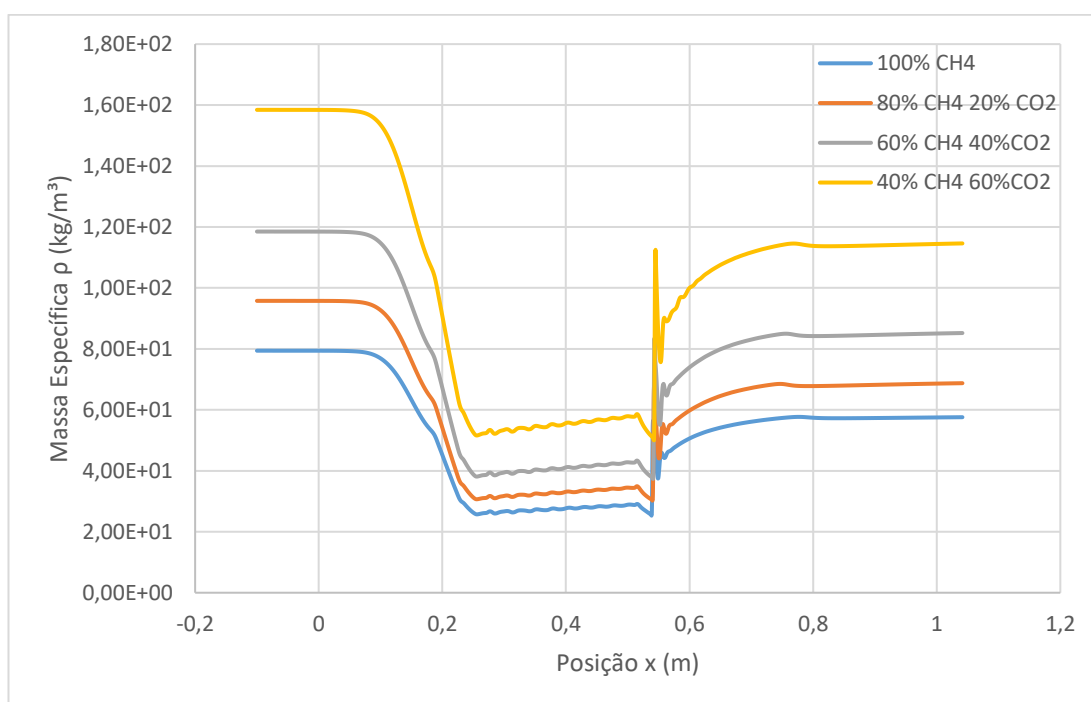


Gráfico 24 – Efeitos da composição do gás sobre a massa específica

Para encontrar as frações molares, foram realizados os cálculos apresentados na tabela abaixo, tomando como base de cálculo uma massa total de $100g$ e o número de mols sendo encontrado a partir da divisão da massa pela massa molar dos componentes, sendo $M_{CH_4} = 16 g/mol$ e $M_{CO_2} = 44 g/mol$.

Tabela 5 – Conversão das frações mássicas em frações molares

Conversão fração mássica para fração molar					
	Componente	Fração Mássica	Massa (g)	Nº de mols (mol)	Fração Molar
Caso 1	CH4	1	100	6,2500	1,0000
	CO2	0	0	0,0000	0,0000
Caso 2	CH4	0,8	80	5,0000	0,9167
	CO2	0,2	20	0,4545	0,0833
Caso 3	CH4	0,6	60	3,7500	0,8049
	CO2	0,4	40	0,9091	0,1951
Caso 4	CH4	0,4	40	2,5000	0,6471
	CO2	0,6	60	1,3636	0,3529

Em seguida, multiplicando-se as frações molares de cada componente pela pressão total, obtemos o Gráfico 25, onde duas curvas de mesma cor representam as

pressões parciais dos componentes de uma certa mistura, sendo sempre as curvas acima aquelas da pressão parcial do metano (que possui a fração molar mais elevada que o dióxido de carbono em todos os casos aqui simulados). Feito isso, pode-se encontrar uma estimativa dos estados de cada um dos componentes.

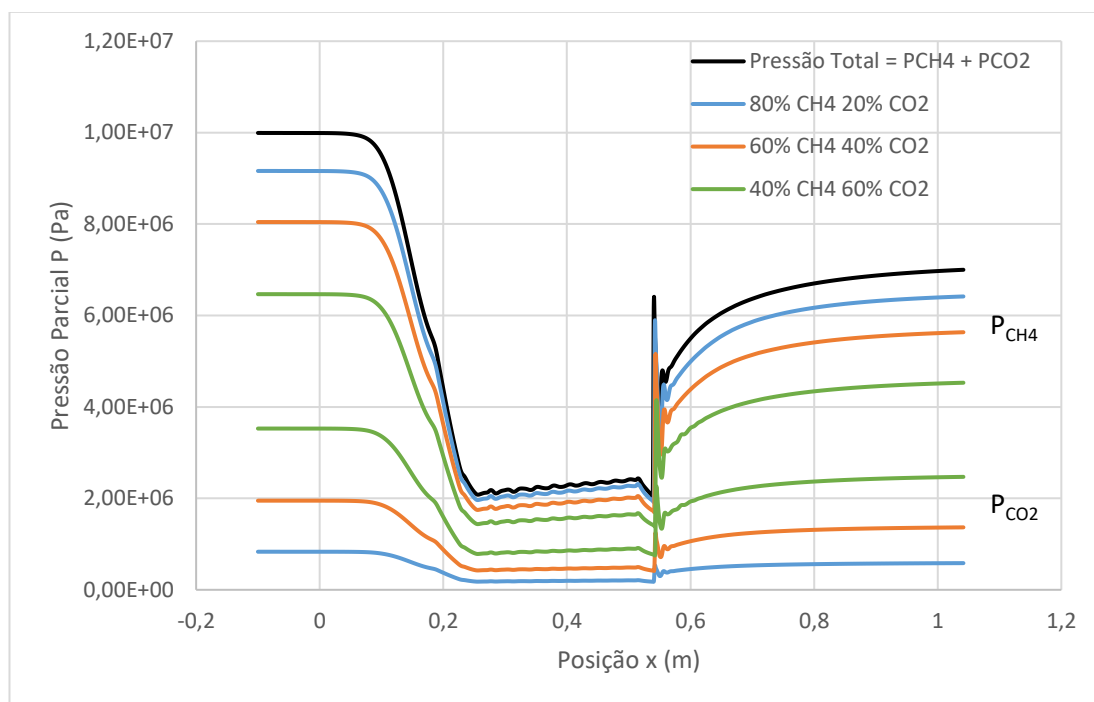


Gráfico 25 – Pressões parciais dos componentes para diferentes composições

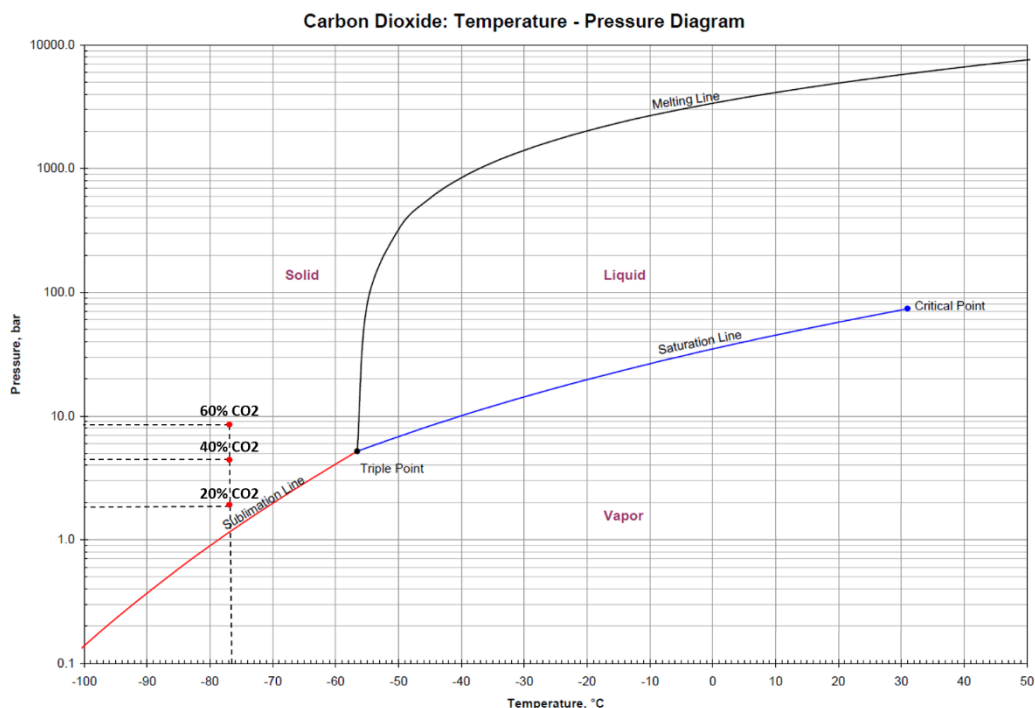
5.9.1 Estados dos Gases

A partir do Gráfico 25, estima-se o estado de cada um dos componentes. Através das tabelas do Apêndice B do livro Fundamentos da Termodinâmica [9]. Os resultados encontrados são mostrados na tabela abaixo:

Tabela 6 – Estados dos componentes do gás natural

	Estados do Metano		Dióxido de Carbono	
100% CH₄	P (Pa)	2,29E+06	P (Pa)	---
	T (K)	194,42	T (°C)	-78,73
	Fase	Gasosa	Fase	---
80% CH₄	P (Pa)	2,16E+06	P (Pa)	1,97E+05
	T (K)	196,88	T (°C)	-76,27
	Fase	Gasosa	Fase	Sólida
60% CH₄	P (Pa)	1,92E+06	P (Pa)	4,66E+05
	T (K)	196,66	T (°C)	-76,49
	Fase	Gasosa	Fase	Sólida
40% CH₄	P (Pa)	1,58E+06	P (Pa)	8,59E+05
	T (K)	196,37	T (°C)	-76,78
	Fase	Gasosa	Fase	Sólida

Sabendo-se o estado termodinâmicos do CO₂ na região de separação, desenha-se no diagrama de fases do dióxido de carbono os pontos referentes a cada uma das composições estudadas:

Figura 15 – Diagrama de fases do CO₂

Dado que a massa específica do dióxido de carbono no estado sólido é maior que a massa específica do metano no estado gasoso, a separação através da centrifugação aplicada é favorecida.

5.10 Efeitos de Modelo de Turbulência

O modelo de turbulência utilizado nas simulações pode afetar significativamente os resultados obtidos. Um ponto importante a verificar é a variação do posicionamento da onda de choque conforme a alteração do modelo de turbulência, pois tal variação pode afetar a performance do separador supersônico. Caso a onda ocorra na região do divergente do bocal ou logo no início da zona de separação ciclônica, a separação do CO₂ do gás natural seria impossibilitada. Outro fator de análise é a variação dos valores das propriedades, dado que certas condições deixam de ser favoráveis à condensação do CO₂, também prejudicando a separação. Logo, torna-se essencial uma análise dos efeitos dos modelos de turbulência para compreender se o modelo pode estar levando a erros significativos.

Os modelos de turbulência analisados são: Spallart Allmaras, k- ϵ Standard, k- ϵ RNG, k- ω Standard e k- ω SST. O modelo de gás real utilizado é o Redlich Kwong. O Gráfico 26 apresenta os resultados das simulações utilizando uma composição de 100% metano à pressão de entrada $P_{inlet} = 100bar$ e à temperatura de entrada $T_{inlet} = 288K$. Já o Gráfico 27 apresenta curvas de simulações cuja composição do gás natural é de 60% metano e 40% dióxido de carbono com $P_{inlet} = 200bar$ e $T_{inlet} = 343K$.

Para ambas as condições apresentadas acima, os resultados permitem inferir que tanto a variação da posição da onda de choque quanto dos valores do número de Mach são pouco significativos. A maior divergência entre os valores de M é detectada na região do difusor onde ocorre uma recuperação de pressão e redução da velocidade do escoamento.

No caso do Gráfico 26, o erro relativo da posição da onda de choque apresentado entre os modelos mais divergentes (k- ω SST e k- ϵ Standard) foi de 2,06%. Já no caso do Gráfico 27, a diferença relativa entre os mesmos modelos, que também

são os mais divergentes no quesito posição onda de choque, é de 2,26%. Para ambas situações o erro é pouco significativo e não afeta os resultados.

Vale ressaltar que o modelo de turbulência Reynold Strees Model (RSM) também foi investigado, mas foram encontradas dificuldades de convergência.

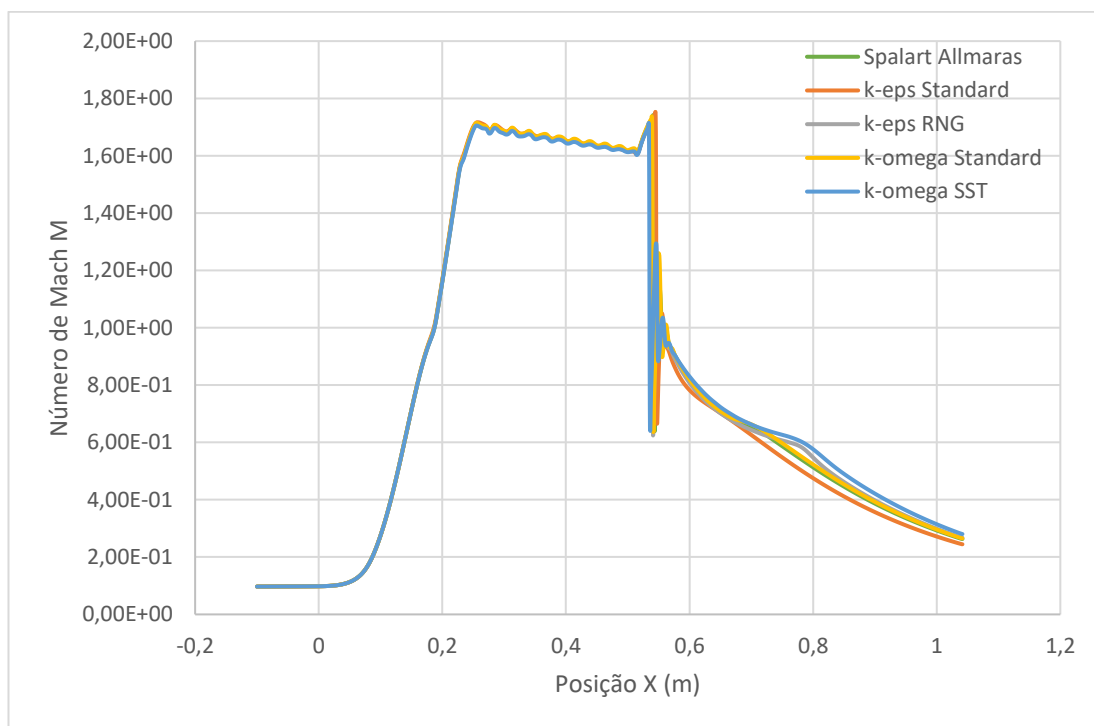
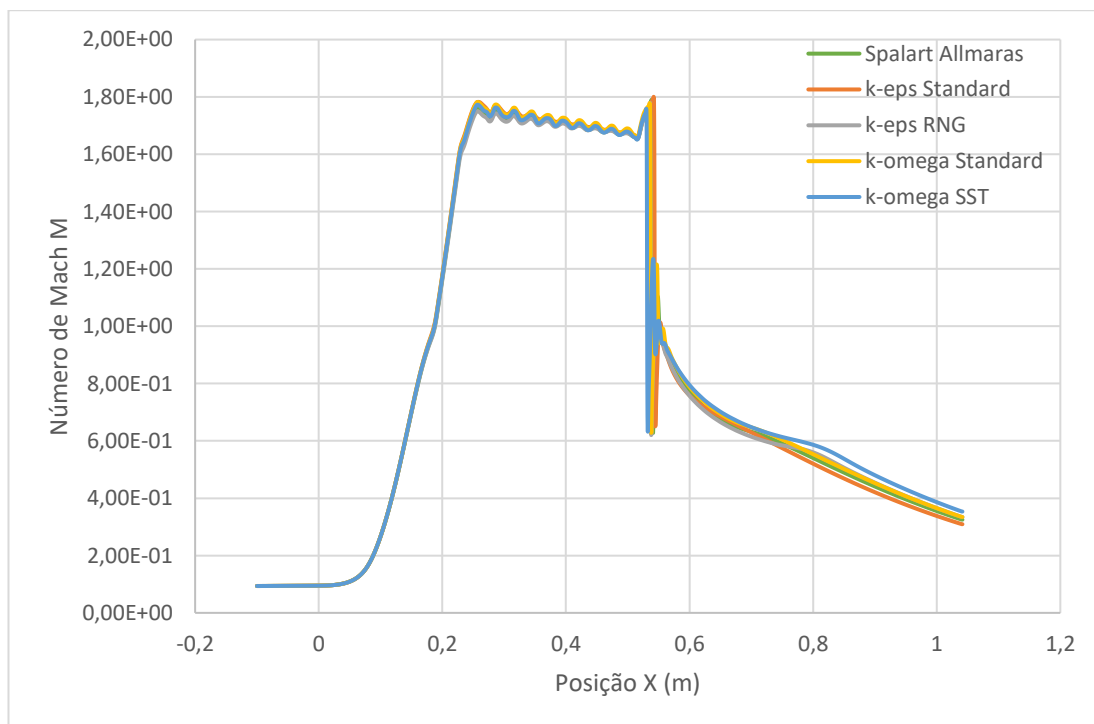


Gráfico 26 – Efeitos do modelo de turbulência a 100bar e 288K (metano)

Gráfico 27 – Efeitos do modelo de turbulência a 200bar e 343K (60% CH₄ e 20%CO₂)

6 CONCLUSÕES

A partir dos resultados obtidos e análises feitas sobre os efeitos dos modelos de gás real, conclui-se que assumir um modelo de gás ideal pode resultar em valores incorretos na predição de escoamentos, principalmente quando as condições do escoamento se aproximam de regiões de mudança de fase e da região de fluido supercrítico. Além disso, as equações de estado RK, RKS, PR, RKA preveem resultados muito similares.

O quadro de resultados que compara o fator de compressibilidade encontrado nas simulações com o mesmo fator extraído do diagrama generalizado para substâncias simples evidencia a coerência entre os resultados obtidos com o método computacional utilizado nesse estudo e resultados encontrados na literatura, uma vez que o erro relativo apresentado é pouco significativo ($\sim 5\%$), corroborando com a assertividade das análises aqui realizadas.

Em relação aos efeitos de pressão de entrada, para uma mesma razão de pressão P_{outlet}/P_{inlet} , observa-se que conforme a pressão aumenta, maior será a divergência entre o modelo de gás ideal e real, tanto em valores das propriedades termodinâmicas quanto na posição da onda de choque. Tem-se como justificativa que quanto maior a pressão de entrada, mais próximo o fluido está da região de fluido supercrítico, afastando-o de um comportamento de gás ideal. Quando a pressão de entrada é 1bar (próxima da condição ambiente), o choque ocorre 0,05 m antes em relação aos choques das demais pressões de entrada analisadas, podendo assim prejudicar a separação em questão.

Levando em consideração o efeito da temperatura de entrada do gás natural no separador supersônico, pode-se concluir que quando a temperatura é baixa, a divergência entre o modelo de gás ideal e real são expressivos e devem ser levados em conta na investigação e desenvolvimento do dispositivo. Além disso, quanto menor a temperatura de entrada, maior o número de Mach na zona de separação e por consequência menor a temperatura e pressão na mesma região. No geral, esse efeito favorece a separação do CO_2 , pois apesar da pressão estar diminuindo (o que desfavorece a condensação), a redução de temperatura prevalece sobre a perda de pressão, vide escala logarítmica no eixo das ordenadas do diagrama de fases.

Finalmente, a investigação do efeito dos diferentes modelos de turbulência (Spallart Allmaras, k - ϵ Standard, k - ϵ RNG, k - ω Standard e k - ω SST) permite inferir que a posição da onda de choque não se altera significativamente (apenas $\sim 2\%$) para os casos estudados, assim como os valores das propriedades estudadas.

Desse modo, o estudo aqui realizado sobre os efeitos dos modelos de gás real, do fator de compressibilidade, de pressão e de temperatura de entrada e de modelos de turbulência contribui para o projeto de pesquisa inserido no RCGI, visando desenvolvimento da tecnologia de separadores supersônicos que buscam uma exploração mais eficiente de gás natural e uma redução das emissões de CO_2 .

7 BIBLIOGRAFIA

- [1] “US Energy Information,” 2016. [Online]. Available: https://www.eia.gov/outlooks/ieo/nat_gas.cfm. [Acesso em 01 06 2017].
- [2] [Online]. Available: <http://interessenacional.com/index.php/edicoes-revista/gas-natural-evolucao-e-perspectivas/>. [Acesso em 01 06 2016].
- [3] E. Livre, “Wikipedia,” [Online]. Available: https://pt.wikipedia.org/wiki/G%C3%A1s_natural. [Acesso em 17 10 2016].
- [4] L. P. C. R., “A Solução para CO₂ do pré-sal,” Blog dos desenvolvimentistas, 2016. [Online]. Available: <http://www.desenvolvimentistas.com.br/blog/blog/2016/01/14/a-solucao-para-o-co2-do-pre-sal/>. [Acesso em 2016].
- [5] M. E., *Compact Centrifugal Separator of Dispersed Phases*, Tese de Doutorado, Technische Universiteit Eindhoven, 2005.
- [6] Da Silva I.M., “Gás Natural: a sua utilização na geração de energia elétrica no Brasil”. *Revista de divulgação do projeto universidade Petrobras e IF Fluminense*.
- [7] D. S. D. Santos, “Análise comparativa de tecnologias de separação de CO₂ no processamento de gás natural”. *Tese de Mestrado*.
- [8] M. D.C., G. W.M., N. J.F., B. L.A., I. S. Z., A. M.R. e L. I.R., “Breakthrough in CO₂ Supersonic Separation Technology, IBP2034_14,” em *Rio Oil & Gas Expo and Conference*, Rio de Janeiro, 2014.
- [9] B. e. Sontag, *Fundamentos da Termodinâmica*, série Van Wylen, 8ª Edição ed., Blucher, 2013.
- [10] J. JOHN D. ANDERSON, *Fundamentals of Aerodynamics*, Fifth Edition ed., New-York: McGraw-Hill, 2011.
- [11] R. W. Fox, P. J. Pritchard e A. T. McDonald, *INTRODUÇÃO À MECÂNICA DOS FLUIDOS*, 7ª Edição ed., Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora Ltda., 2010.

- [12] V. H. K. e W. Malalasekera, An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Vome Metod, Second Edition ed., Harlow: Pearson Education Limited, 2007.
- [13] ANSYS, *ANSYS Help Documentation*.
- [14] R. Arina, “Numerical simulation of near-critical fluids,” *Applied Numerical Mathematics*, 2004.
- [15] Y. Yang, C. Wen, S. Wang e Y. Feng, “Numerical simulation of real gas flows in natural gas supersonic,” 28 10 2014.
- [16] K. FOELSCH, “The Analytical Design of an Axially Symmetric Laval Nozzle for a Parallel and Uniform Jet,” *JOURNAL OF THE AERONAUTICAL SCIENCES*, 1949.
- [17] B. e. O. R. ROSA, “globo.com,” 11 09 2016. [Online]. Available: <http://oglobo.globo.com/economia/petroleo-e-energia/pre-sal-esta-prestes-liderar-producao-de-petroleo-no-pais-20086573>. [Acesso em 17 Outubro 2016].
- [18] T. A. FERREIRA TROTTA, *MODELAGEM E AVALIAÇÃO TÉCNICA DE SEPARADOR SUPERSÔNICO PARA CONDICIONAMENTO DE GÁS NATURAL*, Rio de Janeiro: Dissertação de Mestrado, 2014.
- [19] J. Prof. Dr MENEGHINI, Interviewee, *NOVAS TECNOLOGIAS DE SEPARAÇÃO PODEM IMPULSIONAR PRODUÇÃO DE GÁS NATURAL EM CAMPOS DO PRÉ-SAL*. [Entrevista]. 23 Junho 2016.
- [20] “ANSYS Fluent,” ANSYS, [Online]. Available: <http://www.ansys.com/Products/Fluids/ANSYS-Fluent> . [Acesso em 19 10 2016].
- [21] FUNDAMENTOS DA TERMODINÂMICA, 8ª Edição ed., Blucher, 2013.

APÊNDICE

Cronograma

O detalhamento do cronograma para o ano de 2017 é apresentado abaixo:

Atividade 1: Revisão Bibliográfica acerca do tema – Meses 1 a 2

Atividade 2: Estudo do Simulador Fluent – Meses 1 a 2

Atividade 3: Geração de Malha Computacional para a Geometria 1 – Meses 2 a 4

Atividade 4: Simulação da Geometria 1 – Meses 4 a 5

Atividade 5: Análise dos Resultados da Geometria 1 – Meses 3 a 5

Atividade 6: Elaboração dos Relatórios – Meses 1 a 6

Atividade 7: Geração de Malha Computacional para a Geometria 2 – Meses 7 a 8

Atividade 8: Simulação da Geometria 2 – Meses 7 a 8

Atividade 9: Análise dos Resultados da Geometria 2 – Meses 8 a 9

Atividade 10: Geração de Malha computacional para a Geometria 3 – Meses 9 a 10

Atividade 11: Simulação da Geometria 3 – Meses 9 a 12

Atividade 12: Análise dos Resultados da Geometria 3 – Meses 10 a 12

Atividade 13: Elaboração do Relatório Final – Mês 6 a 12