

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Desenvolvimento de um Método de
Partículas Puramente Lagrangeano para o
Estudo de escoamentos Bifásicos**

Autor: **Douglas Avila Silva de Oliveira**

Orientador: **Prof. Dr. Luiz Antonio Alcântara Pereira**

Itajubá, Abril de 2018

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Desenvolvimento de um Método de Partículas Puramente Lagrangeano para o Estudo de escoamentos Bifásicos

Autor: **Douglas Avila Silva de Oliveira**
Orientador: **Prof. Dr. Luiz Antonio Alcântara Pereira**

Curso: **Mestrado em Engenharia Mecânica**
Área de Concentração: **Térmica, Fluidos e Máquinas de Fluxo**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica como parte dos requisitos para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Itajubá, Abril de 2018

MG – Brasil

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
INSTITUTO DE ENGENHARIA MECÂNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Desenvolvimento de um Método de Partículas Puramente Lagrangeano para o Estudo de Escoamentos Bifásicos

Autor: **Douglas Avila Silva de Oliveira**
Orientador: **Prof. Dr. Luiz Antonio Alcântara Pereira**

Composição da Banca Examinadora:

Prof. Dr. Alex Mendonça Bimbato – FEG/UNESP

Prof. Dr. Marcelo José Pirani – UNIFEI

Prof. Dr. Luiz Antonio Alcântara Pereira (Orientador) – UNIFEI

Dedicatória

Dedico este trabalho à minha família e aos meus amigos que me ajudaram a vencer mais essa etapa da minha vida.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por tudo que ganhei ou conquistei em minha vida. Sem Ele não estaria aqui.

Ao meu pai, sinônimo de caráter e integridade, que no pouco tempo que teve, me ensinou como ser um homem e honrar minha palavra. À minha mãe, que é pai e mãe ao mesmo tempo, que através de amor e educação me trouxe até aqui. E a toda a minha família pelo apoio que tive desde o começo dessa caminhada, muito obrigado.

Ao professor Dr. Luiz Antonio Alcântara Pereira por me orientar na realização desse trabalho e por toda a paciência e vontade de me passar seus conhecimentos.

Aos meus colegas do Laboratório Computacional de Método de Partículas do IEM/UNIFEI e a toda a equipe integrante do grupo pelas sugestões que contribuíram para a realização deste trabalho. E também aos meus colegas do curso de mestrado: Roberto, Lucas, Pedro e, um agradecimento muito especial à minha amiga Crystianne, que me ajudou durante todo o desenvolvimento desse trabalho.

À CAPES, pelo apoio financeiro ao longo do período de desenvolvimento deste Mestrado.

À FAPEMIG via Processo APQ-02175-14, pela concessão de recursos financeiros, que contribuíram para o fortalecimento da infraestrutura computacional no Laboratório de Métodos de Partículas do IEM/UNIFEI; sem esta infraestrutura computacional os resultados numéricos desta Dissertação de Mestrado não poderiam ser obtidos.

RESUMO

Este trabalho apresenta um estudo numérico de escoamentos bidimensionais bifásicos utilizando um método de partículas puramente Lagrangeano. O escoamento disperso ocorre quando um fluido na forma de gotas está contido dentro de outro fluido; na presente abordagem, gotas de óleo se encontram dispersas no escoamento da fase contínua representada pela água. O trabalho tem foco no fenômeno da coalescência de gotas de óleo, que ocorre durante o processo de sedimentação no interior de um duto. Para cumprir este propósito, uma estrutura de caixas é utilizada para identificar grupos de gotas de óleo confinadas em diferentes regiões do domínio fluido e para estabelecer uma lista de interação entre estas gotas de óleo. A eficiência de tecnologias de separação das duas fases é fortemente dependente da distribuição do tamanho do diâmetro de gotas, isto é, gotas de diâmetros maiores melhoram a eficiência da separação. Os resultados numéricos obtidos estão adimensionalizados e têm como propósito estimar o comprimento máximo de um duto horizontal de seção circular necessário para a retirada do óleo com a maior eficiência.

Palavras-chaves: Lei de Stokes, Escoamento de Poiseuille, Fenômeno da Coalescência, Separador Gravitacional, Descrição Lagrangeana.

ABSTRACT

This work presents a numerical study of two-dimensional dispersed two-phase flows using a purely Lagrangian particle method. Dispersed flow occurs when one fluid is in the form of droplets within the continuum of the other fluid; in the present approach oil droplets are dispersed in the water flow. The work focuses on coalescence of oil droplets in water, which occurs during sedimentation process inside a duct. In addition, for this purpose a box structure is used to identify groups of oil droplets confined in different regions of the fluid domain aiming to establish interaction lists for the oil droplets. The efficiency of separation technologies is strongly dependent on the droplet size, which is desirable to shift into larger droplet diameters. The numerical results obtained are in non-dimensional form and this study has as purpose to predict the maximum length of a horizontal duct of circular section for oil removal with the greater efficiency.

Keywords: Stokes 'Law, Poiseuille Flow, Coalescence Phenomenon, Separator Gravitational, Lagrangian Description.

Sumário

Lista de Figuras	VII
Lista de Tabelas	IX
Simbologia.....	X
CAPÍTULO 1 INTRODUÇÃO	1
1.1 - Motivações.....	1
1.2 - Objetivos do Trabalho	6
1.3 - Metodologia do Trabalho	7
1.4 - Estrutura do Texto	9
CAPÍTULO 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	10
2.1 - Introdução	10
2.2 - Emulsões: Caracterização e Fenômenos Envolvidos na Separação Gravitacional.....	10
2.2.1 - Estabilidade de Emulsões	12
2.3 - Presença de Emulsões numa Planta de Processamento Primário do Petróleo	13
2.3.1 - Água Produzida ou Água de Injeção	15
2.3.2 - Principais Técnicas de Tratamento da Água Produzida	16
2.4 - Concentrações das Emulsões.....	17
2.5 - Publicações Recentes.....	18
CAPÍTULO 3 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO PROBLEMA.....	21
3.1 - Introdução.....	21
3.2 - Hipóteses Assumidas	21
3.2.1 - Hipótese Relativa à Geometria	22
3.2.2 - Hipóteses Relativas às Propriedades dos Fluidos.....	22
3.2.3 - Hipóteses Relativas às Propriedades do Escoamento.....	22
3.3 - Formulação em Regime Permanente	23
3.3.1 - Cinemática das Gotas de Óleo	23
3.3.2 - Dinâmica das Gotas de Óleo (Lei de Stokes)	24
3.3.3 - Equação da Trajetória das Gotas de Óleo.....	27
3.4 - Coalescência de Gotas de Óleo	28
3.5 - Adimensionalização do Problema	31

CAPÍTULO 4 SOLUÇÃO NUMÉRICA	34
4.1 - Introdução	34
4.2 - Subrotina MODULE.FOR	35
4.3 - Subrotina INPUT.FOR	35
4.4 - Subrotina GENERATION.FOR	37
4.5 - Subrotina PRINT.FOR	37
4.6 - Subrotina VELOCITY_FIELD.FOR.....	38
4.7 - Subrotina EULER_ADVECTION.FOR.....	38
4.8 - Subrotina REFLECTION.FOR	39
4.9 - Subrotina BOUNDARY.FOR	39
4.10 - Subrotina BOX_STRUCTURE.FOR	40
4.11 - Subrotina COALESCENCE.FOR	41
4.12 - Subrotina COALESCENCEBOX.FOR.....	41
CAPÍTULO 5 ANÁLISE DE RESULTADOS	43
5.1 - Introdução	43
5.2 - Trajetória de uma Gota de Óleo Isolada	44
5.3 - Análise da Coalescência de Gotas de Óleo	47
5.3.1 - Cálculo da Concentração de Gotas de Óleo em Água	47
5.3.2 - Algoritmo de Varredura Dinâmica e Definição do Valor do <i>LEVEL</i>	49
5.3.3 - Análise do Tempo de Processamento do Programa.....	52
CAPÍTULO 6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS	58
6.1 - Conclusões.....	58
6.2 - Sugestões para Futuros Trabalhos	60
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	64

Lista de Figuras

Figura 1.1 – Separador gravitacional de água livre.	1
Figura 1.2 – Fluxograma simplificado do banco de testes óleo em água (retirado de Oliveira, 2010).....	4
Figura 1.3 – Misturador estático (T de mistura) com parafusos giclês (retirada de Oliveira, 2010).....	4
Figura 1.4 – Seção de testes numéricos para a estimativa do comprimento máximo de um duto para a retirada do óleo da água.	5
Figura 2.1 – Tipos de emulsões (retirada de Cunha, 2007).....	11
Figura 2.2 – Fenômenos envolvidos na ruptura de emulsões tipo O/A.....	15
Figura 2.3 – Principais processos de tratamento da Água Produzida (Adaptado de Stewart e Arnold – 2011).	17
Figura 3.1 – Perfil de Velocidades Parabólico para a fase contínua (água).	24
Figura 3.2 – Equilíbrio de forças sobre uma gota de óleo em regime permanente.	24
Figura 3.3 – Trajetória da partícula.	28
Figura 3.4 – Representação de duas gotas de óleo distintas e suas respectivas dimensões.	30
Figura 3.5 – Representação esquemática do domínio fluido adimensionalizado.....	33
Figura 4.1 – Estrutura do algoritmo computacional.....	34
Figura 4.2 – Exemplo de estrutura de caixas para o cálculo da coalescência.	39
Figura 4.3 – Representação do posicionamento de gotas em uma matriz composta por 16 caixas virtuais (<i>LEVEL 2</i>).	40
Figura 4.4 – Representação do funcionamento da subrotina <i>COALESCENCE.FOR</i> em uma matriz composta por 64 caixas virtuais (<i>LEVEL 3</i>).	42
Figura 5.1 – Posição de geração de uma gota de óleo na seção de entrada de um tubo.	44

Figura 5.2 – Trajetória da gota de óleo usando o esquema de avanço de primeira ordem de Euler com $d/D = 0,001$	47
Figura 5.3 – Região na entrada do tubo para definição da concentração.	48
Figura 5.4 – Região na frente do tubo de comprimento Δx usada para a impressão da posição instantânea da nuvem de gotas.	52
Figura 5.5 – Caso VIII: Evolução da nuvem de gotas de óleo em quatro instantes distintos.....	55
Figura 5.6 – Caso XII: Evolução da nuvem de gotas de óleo em quatro instantes distintos.....	56
Figura 5.7 – Diâmetro máximo de gota para os casos de V à VIII.	57
Figura 5.8 – Diâmetro máximo de gota para os casos de IX à XII.	57
Figura 6.1 – Bancada experimental no laboratório Núcleo de Separadores Compactos na UNIFEI para a separação de óleo e água.	61

Lista de Tabelas

Tabela 5.1 – Testes para obtenção do melhor valor para a relação Re/Fr fixando-se $d/D = 0,001$	46
Tabela 5.2 – Variação do número final de gotas de acordo com o valor do <i>LEVEL</i>	49
Tabela 5.3 – Variação do número final de gotas após o ajuste implementado pela varredura dinâmica.	51
Tabela 5.4 – Tempos de processamento para diferentes concentrações de óleo em água de acordo com o valor do <i>LEVEL</i>	51
Tabela 5.5 - Principais parâmetros definidos para as simulações de nuvens de gotas.....	53
Tabela 5.6 – Simulação de uma nuvem de gotas sem a presença do fenômeno da coalescência.	53
Tabela 5.7 – Simulação de uma nuvem de gotas com a presença do fenômeno da coalescência (<i>LEVEL</i> = 0).....	53
Tabela 5.8 – Simulação de uma nuvem de gotas com a presença do fenômeno da coalescência (<i>LEVEL</i> = 8).....	54

Simbologia

Letras Latinas

ALFA	Razão entre o maior e menor diâmetros das gotas da emulsão em determinado passo da simulação numérica
$C_{E(O/A)}$	Concentração de óleo em água na seção de entrada do tubo
$C_{S(O/A)}$	Concentração de óleo em água na seção de saída do tubo
D	Diâmetro do tubo
d	Diâmetro das gotas de óleo
deltx	Comprimento usado para impressão da posição instantânea da nuvem de gotas
doil	Diâmetro de uma gota de óleo
$d_{máx}$	Diâmetro da maior gota ao final da simulação
dV_k	Incremento de velocidade de uma gota de óleo
$F_{Arrasto}$	Força de arrasto
F_{Empuxo}	Força de empuxo
$F_{MassaVirtual}$	Força da massa virtual
F_{Peso}	Força peso
$F_{Sustentação}$	Força de sustentação
$F_{TensãoSuperficial}$	Força de tensão superficial
Fr	Número de Froude
g	Aceleração da gravidade local
k	Contador para o número total de gotas da simulação

$L_{m\acute{a}x}$	Comprimento mximo do tubo para a retirada do leo da gua
L°	Comprimento na entrada do tubo para a estimativa da concentrao de leo em gua
<i>LEVEL</i>	Nvel de diviso do domnio na estrutura de caixas
<i>Ma</i>	Nmero de Mach
m_k	Massa de uma gota de leo
m	Quantidade de gotas criadas para satisfazer a concentrao pedida na simulao
N_{caixas}	Nmero de caixas virtuais utilizadas
N_{gotas}	Nmero de gotas ao final da simulao
<i>R</i>	Raio do tubo
<i>r</i>	Posio radial de uma gota de leo
<i>Re</i>	Nmero de Reynolds
<i>STOP</i>	Nmero mximo de iteraes
<i>T</i>	Temperatura da emulso
$u_{m\acute{a}x}$	Velocidade mxima do perfil de velocidades de Poiseuille
$U_{poiseuille}$	Velocidade horizontal do perfil de velocidades de Poiseuille
\bar{V}	Velocidade mdia da fase contnua
V_k	Velocidade de uma k-sima gota de leo seguindo a Lei de Stokes
V^*	Velocidade da gota na direo do eixo y (adimensionalizada)
<i>x</i>	Relativo  direo axial do tubo
<i>y</i>	Relativo  direo radial do tubo

Letras Gregas

β	Fator de recobrimento
Δt	Incremento de tempo da simulação numérica
Δx_{caixa}	Comprimento em x das caixas virtuais para o cálculo da coalescência
$\mu_{\acute{a}gua}$	Coefficiente de viscosidade dinâmica da água
$\mu_{\acute{o}leo}$	Coefficiente de viscosidade dinâmica do óleo
$\rho_{\acute{a}gua}$	Massa específica da água (fase contínua)
$\rho_{\acute{o}leo}$	Massa específica do óleo (fase dispersa)
$\mathcal{V}_{\acute{a}gua}$	Volume de água em uma região pré-determinada do tubo
$\mathcal{V}_{\acute{o}leo}$	Volume de uma gota esférica de óleo
$\sum F$	Somatório de forças responsáveis pelo movimento de uma partícula
η	Referente ao rendimento

Sobrescritos

°	Relativo ao comprimento de entrada do tubo
*	Designa variáveis adimensionais

Abreviaturas

A/O	Água em Óleo (relativo a uma emulsão)
A/O/A	Água em Óleo em Água (relativo a uma emulsão)
AP	Água Produzida
O/A	Óleo em Água (relativo a uma emulsão)

O/A/O Óleo em Água em Óleo (relativo a uma emulsão)

MRU Movimento Retilíneo Uniforme

Siglas

CAPES Coordenação e Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior

IEM Instituto de Engenharia Mecânica

NUSEC Núcleo de Separadores Compactos

PETROBRÁS Petróleo Brasileiro S.A.

UNIFEI Universidade Federal de Itajubá

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 - Motivações

Os separadores gravitacionais vêm sendo utilizados há um bom tempo para aplicação na indústria do petróleo. Dentre esta classe de separadores gravitacionais, destaca-se neste trabalho o separador gravitacional de água livre; vide o esquema simplificado apresentado na Figura 1.1.

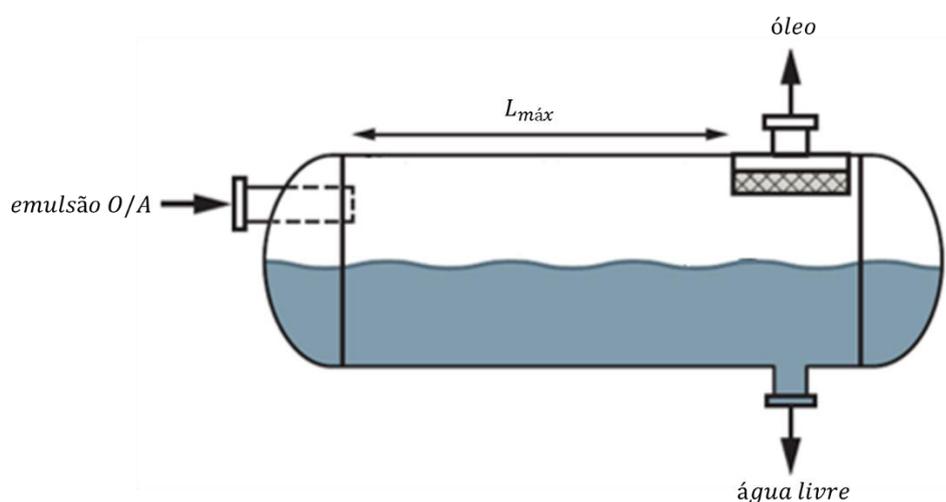


Figura 1.1 – Separador gravitacional de água livre.

Na seção à esquerda do separador gravitacional esquematizado na Figura 1.1 ocorre, por exemplo, a entrada de uma emulsão do tipo O/A. As emulsões constituem-se em um sistema heterogêneo formado por duas fases (fase contínua e fase dispersa); elas são termodinamicamente instáveis e, para uma mistura entre água e óleo, elas podem ser classificadas em três tipos: gotas de óleo dispersas em água (O/A), gotas de água dispersas em óleo (A/O) e múltiplas ou complexas (A/O/A).

A principal motivação para o desenvolvimento desta Dissertação de Mestrado é analisar o escoamento de emulsões O/A para o estudo da eficiência da separação das fases óleo e água

presentes no interior de um duto em uma planta de processamento primário de petróleo. O separador gravitacional utilizado numa planta de processamento primário de petróleo é um equipamento destinado a remover água produzida, não emulsionada, e geralmente se encontra posicionado imediatamente a jusante do *manifold* de produção, como primeiro ou segundo equipamento do trem de processamento primário. O *manifold* é um conjunto de válvulas e acessórios, cuja finalidade é direcionar a produção de vários poços para um duto coletor, o qual conduz a produção total para uma unidade de produção.

O processo de separação de óleo e água se baseia no princípio da diferença de massas específicas entre as duas fases constituintes da mistura heterogênea. Um dos desafios encontrados para o projeto dos separadores gravitacionais de água livre é o tempo de residência, ou seja, o tempo necessário para que uma gota de óleo permaneça dentro da seção de separação do duto. Este tempo de residência é definido pela divisão do volume total do tubo pela vazão da emulsão; ele representa o tempo necessário para que o óleo já se encontre separado da água no lado superior do separador e possa ser retirado na posição de comprimento do duto equivalente à $L_{máx}$ (vide Figura 1.1). Contudo, as necessidades de grandes tempos de residência conduzem a projetos de vasos separadores de grande peso e dimensão. Estas características os tornam pouco adequados para aplicação *offshore* e, mais ainda, quando se pensa em aplicações submarinas sob grandes lâminas de água. Por outro lado, a simplicidade construtiva e operacional deste tipo de separador faz com que se procurem soluções alternativas para a sua construção, que permitam a aplicação de seu princípio básico de funcionamento em configurações que minimizem suas dimensões, tornando-os mais adequados para aplicações submarinas e *offshore*.

Uma destas configurações construtivas para os separadores gravitacionais de água livre com potencial de aplicação é denominada pela PETROBRÁS de separador tubular divergente-convergente. A ideia básica do separador tubular divergente-convergente consiste em fracionar a vazão principal de uma emulsão na entrada do separador em vazões menores, que são tratadas por tubos em paralelo. Esta abordagem apresenta algumas vantagens, quando comparadas com outros tipos de separadores gravitacionais, tais como:

- A possibilidade de diminuição do peso dos separadores.
- Menores espessuras de parede para resistir às pressões, uma vez que os diâmetros dos tubos diminuem.

- Redução do custo de fabricação, consequência da diminuição do peso.
- Menor tempo de residência propiciado por este tipo de separador.

Há no IEM/UNIFEI um laboratório experimental, denominado NUSEC (Núcleo de Separadores Compactos), em que parte das pesquisas está direcionada para o desenvolvimento do separador tubular do tipo divergente-convergente. Para o melhor entendimento do processo de separação nos tubos de pequeno diâmetro, estuda-se apenas a separação no trecho tubular do separador, não sendo, no estágio atual, analisadas as opções de divergência, convergência e de extração das fases no separador. Para o fracionamento da vazão da emulsão a ser tratada e posterior coleta das fases separadas, existe a possibilidade da criação de diversas configurações construtivas e o objetivo geral das pesquisas é desenvolver soluções construtivas para as seções de divergência, convergência e extração de fluidos neste tipo de separador. Além disto, são necessários estudos na região de separação para melhor caracterização da influência do diâmetro dos tubos na separação e, ainda, busca-se encontrar um grupo adimensional que possa ser utilizado para caracterização deste tipo de separador.

A Figura 1.2 apresenta o esquema de operação do banco de testes para emulsões O/A desenvolvido no NUSEC. É importante conhecer o esquema simplificado de funcionamento do banco de testes, pois ajuda a entender a ideia da implementação numérica realizada neste trabalho e que está detalhada no Capítulo 4. Para a geração de emulsões O/A utilizam-se bombas helicoidais ligadas a inversores de frequência, que controlam a rotação destas bombas. A partida da bomba, que retira água do tanque, é feita com o *by-pass* aberto para regulagem das válvulas. Em seguida, a água é conduzida até a linha principal dos testes passando pelo primeiro medidor de vazão do tipo Coriolis até encontrar o canal principal do misturador estático (T de mistura), vide Figura 1.3. Já o óleo é bombeado pela segunda bomba helicoidal, passa por uma válvula de esfera, apesar de não estar representada na figura, até chegar ao T de mistura e é forçado a entrar pelos orifícios dos parafusos giclês dispostos perpendicularmente ao canal. O óleo é atomizado e arrastado pela fase contínua. Cada orifício possui diâmetro de 1 e 1,5 mm para ensaios de emulsões O/A e dois orifícios de 1 mm para ensaios de emulsões A/O.

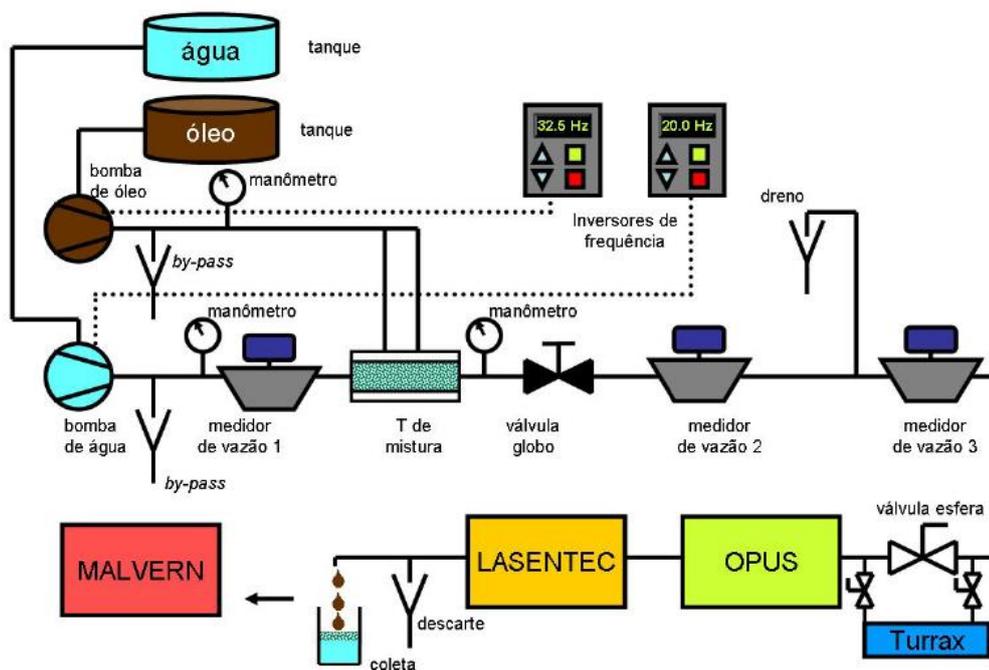


Figura 1.2 – Fluxograma simplificado do banco de testes óleo em água (retirado de Oliveira, 2010)

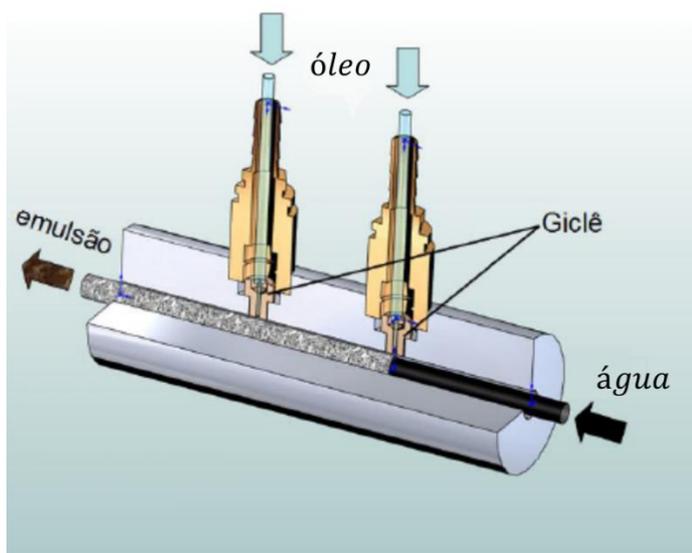


Figura 1.3 – Misturador estático (T de mistura) com parafusos giclês (retirada de Oliveira, 2010).

A linha principal do banco de testes no NUSEC possui dois drenos de controle e todo o excesso de emulsão retorna a um tanque através destes drenos. Com isto, controla-se a vazão da emulsão. A válvula globo posicionada após o T de mistura controla a vazão. Com a perda de carga imposta (pressão de 6 kgf/cm²) as gotas sofrem cisalhamento. O segundo medidor de vazão indica a vazão da emulsão, que subtraída da vazão de água (primeiro medidor de vazão) resulta na quantidade de óleo adicionada para a realização do experimento. A partir deste ponto, a emulsão é utilizada para outras medições. O terceiro medidor de vazão mede a vazão final da emulsão, que chega aos outros aparelhos de medição. No medidor OPUS são utilizadas ondas ultrassônicas e no medidor LASENTEC são feitas varreduras circulares de um *laser*, ambas para análises estatísticas do tamanho do diâmetro de gotas. Finalmente, a emulsão deixa o banco de testes saindo por um canal até encontrar uma cuba de descarte. A emulsão coletada por um béquer é levada ao equipamento MALVERN para a medição do tamanho do diâmetro de gotas.

A breve descrição acima do banco de testes no NUSEC para emulsões O/A permite que se vislumbre o modelo computacional desenvolvido neste trabalho. O objetivo é estimar o comprimento máximo de um tubo, $L_{m\acute{a}x}$, com o intuito de separar o óleo da água e coletá-lo para o cálculo da eficiência do processo de separação, vide Figura 1.4.

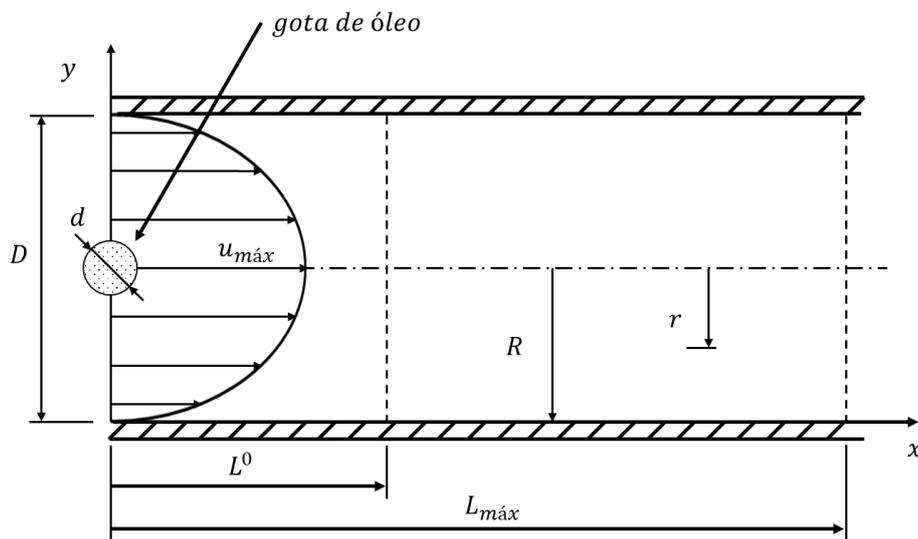


Figura 1.4 – Seção de testes numéricos para a estimativa do comprimento máximo de um duto para a retirada do óleo da água.

Em poucas palavras, uma concentração de gotas de óleo dispersas na fase contínua água é gerada na região de entrada de um tubo (a exemplo do misturador estático nas Figuras 1.2 e

1.3), cujo comprimento igual à L° pode ser utilizado para a estimativa desta concentração. A nuvem de gotas de óleo gerada é advectada e o acompanhamento Lagrangeano das gotas de óleo permite que se faça uma estimativa do comprimento máximo do tubo igual à $L_{m\acute{a}x}$; este comprimento é importante para a retirada do óleo da água resultando em uma medida da eficiência do processo de separação gravitacional.

No final desta Seção, conclui-se que um separador gravitacional deve ser compacto, além de apresentar elevada eficiência de separação das fases contidas numa emulsão. Assim, na região do duto onde uma amostra é coletada na parte inferior da separação, o rendimento é calculado considerando-se que o produto desejado é a água limpa. Sendo $C_{S(O/A)}$ e $C_{E(O/A)}$ as concentrações de óleo em água na saída e na entrada do duto respectivamente, a eficiência da separação pode ser calculada pela seguinte equação:

$$\eta_{inferior} = 100 \times \left(1 - \frac{C_{S(O/A)}}{C_{E(O/A)}} \right) \quad (1.1)$$

Não há muitos resultados disponíveis na literatura para o cálculo do comprimento máximo do tubo, $L_{m\acute{a}x}$, o que valoriza os estudos numéricos desenvolvidos neste trabalho. Os resultados numéricos servem também de subsídios para auxiliar na construção de novas bancadas experimentais através de uma boa estimativa do comprimento máximo para um tubo. Por outro lado, os resultados experimentais são de grande valia para a aferição do código computacional, preparando-o para futuras investigações com a inclusão de novos efeitos de interferência durante o escoamento de uma emulsão no interior de um duto.

A base de dados a ser construída pela associação do modelo experimental e do modelo numérico é muito importante para futuras investigações do comportamento de emulsões, que escoam no interior dos tubos de um separador tubular do tipo divergente-convergente. Os resultados do banco de testes no NUSEC ainda se encontram em fase inicial de análises e, desta forma, não são apresentados neste trabalho.

1.2 - Objetivos do Trabalho

Esta Dissertação de Mestrado utiliza a ferramenta numérico-computacional chamada Método de Partículas (M.P.) e apresenta o seguinte objetivo geral:

- Estudar numericamente o escoamento de uma emulsão do tipo O/A no interior de um duto de seção circular constante e prever o comprimento máximo do duto, $L_{máx}$, onde a fase dispersa, óleo, já se encontra separada da fase contínua, água.

Para cumprir o objetivo geral descrito acima, têm-se os seguintes objetivos específicos:

- Realizar uma Revisão Bibliográfica sobre escoamento bifásico óleo e água.
- Formular matematicamente o problema proposto e assumir hipóteses.
- Adimensionalizar o problema para que se tenha um ganho de generalidade.
- Identificar os parâmetros adimensionais mais importantes do problema.
- Desenvolver um modelo numérico para a coalescência de gotas de óleo durante o processo de sedimentação.
- Desenvolver um algoritmo computacional e realizar a implementação numérico deste algoritmo utilizando *Intel Fortran Compiler for Linux*.
- Aferir parâmetros adimensionais considerando-se inicialmente o movimento de uma gota de óleo isolada.
- Realizar simulações numéricas considerando-se diferentes concentrações de gotas de óleo dispersas na fase de água e analisar a eficiência do modelo de coalescência, principalmente para a redução do tempo final de uma simulação numérica típica.
- Obter conclusões sobre a viabilidade da metodologia desenvolvida e apontar os próximos trabalhos a serem investigados.

1.3 - Metodologia do Trabalho

O método numérico utilizado para o estudo do movimento de uma nuvem de gotas de óleo (fase dispersa), que se desloca no interior de um duto horizontal de seção circular constante e que contém água em movimento (fase contínua), tem como base uma simulação numérico-computacional bidimensional puramente Lagrangeana.

Durante todo o tempo da simulação numérica, um conjunto de gotas de óleo é gerado na região de entrada do tubo para simular um valor de concentração de óleo em água e que deve ser mantido constante naquela região.

Para a análise deste escoamento algumas hipóteses são assumidas. A condição de regime permanente é utilizada para o cálculo da velocidade vertical de sedimentação induzida sobre cada gota de óleo. Para o cálculo da velocidade vertical de sedimentação das gotas de óleo, utiliza-se a Segunda Lei de Newton e considera-se a Lei de Stokes. A velocidade horizontal induzida sobre cada gota de óleo é calculada assumindo-se que o tubo se comporta como duas placas infinitas, paralelas e estacionárias, resultando no perfil de velocidades de Poiseuille; esta teoria simula efeitos viscosos e efeitos de parede durante o movimento das gotas de óleo. Portanto, as gotas de óleo têm velocidade horizontal (sentido axial) conhecida durante cada incremento de tempo da simulação numérica e igual à velocidade da fase contínua.

As gotas de óleo nascentes são geradas na posição $x = 0$ e $0 < y < D$ (D é o diâmetro do tubo; vide Figura 1.4). O fenômeno da coalescência de gotas de óleo é considerado, ou seja, as gotas de óleo são mantidas na forma esférica durante toda a trajetória, mas coalescem com outras gotas aumentando o tamanho do diâmetro de gota distribuído no domínio fluido. Além disto, o choque entre as gotas de óleo e a parede do tubo faz com que as gotas de óleo sejam refletidas para o interior do tubo.

Como o objetivo geral deste trabalho é a previsão do comprimento máximo do tubo, $L_{\text{máx}}$, para retirada do óleo da água, uma simulação numérica típica prevê o instante de tempo no qual as gotas de óleo, que atingiram a parede superior do tubo, já se encontram sedimentadas. Com esta estratégia, pode-se estimar a distância máxima percorrida pela frente da nuvem de gotas de óleo antes da retirada do óleo pela parte superior do tubo.

A palavra advecção é usada neste trabalho para fazer uma analogia com os mecanismos envolvidos no estudo da transferência de calor por convecção. Um esquema de avanço de primeira ordem de Euler é utilizado para a advecção da nuvem de gotas de óleo.

1.4 - Estrutura do Texto

Este texto está estruturado em seis Capítulos mais a lista de Referências Bibliográficas.

O Capítulo 2 apresenta uma Revisão Bibliográfica com o intuito de caracterizar as emulsões e de mostrar os trabalhos mais recentes publicados na literatura envolvendo o escoamento bifásico óleo e água. A principal finalidade é auxiliar nos principais entendimentos da teoria de escoamento bifásico e, ainda, vislumbrar a consecução de futuros trabalhos a partir dos desenvolvimentos apresentados nesta Dissertação de Mestrado.

No Capítulo 3 encontra-se a formulação matemática do problema proposto. São assumidas hipóteses e é apresentada a adimensionalização do problema com a identificação dos parâmetros adimensionais mais importantes. A adimensionalização permite que diferentes combinações de grandezas com dimensão possam ser analisadas utilizando-se a metodologia desenvolvida neste trabalho.

O algoritmo para a implementação numérica do problema formulado no Capítulo 3 está desenvolvido e detalhado no Capítulo 4. Descreve-se a função de cada subrotina desenvolvida com ênfase no modelo implementado para a coalescência de gotas de óleo.

No Capítulo 5 são apresentados os principais resultados obtidos neste trabalho e são feitas discussões sobre a metodologia implementada. São investigadas duas situações. Em primeiro lugar, considera-se o movimento de uma gota de óleo isolada para a aferição de parâmetros numéricos importantes da simulação numérica. Após a aferição dos parâmetros numéricos, realizam-se análises do movimento de nuvens de gotas de óleo com o propósito de analisar a eficiência do algoritmo desenvolvido para a coalescência destas gotas de óleo durante o processo de sedimentação.

O Capítulo 6 contém as principais conclusões do trabalho e apresenta uma lista de sugestões para a realização de trabalhos futuros dentro desta linha de pesquisa.

No final do texto encontram-se as principais Referências Bibliográficas utilizadas para o desenvolvimento desta Dissertação de Mestrado.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 - Introdução

Este Capítulo se inicia com uma breve descrição do comportamento de emulsões. O objetivo desta primeira parte é caracterizar os tipos de emulsões e descrever os fenômenos envolvidos na separação gravitacional de emulsões óleo e água.

Na parte final do Capítulo 2 são apresentados os trabalhos mais recentes publicados na literatura e que possuem algum tipo de relação com conceitos associados ao assunto abordado neste trabalho. Com isto, pode-se ter uma boa ideia das pesquisas mais recentes e contextualizar o assunto desta Dissertação de Mestrado para a perspectiva de futuras investigações.

2.2 - Emulsões: Caracterização e Fenômenos Envolvidos na Separação Gravitacional

Emulsão é definida na literatura (SILVA, 2004) como um sistema heterogêneo formado por duas fases líquidas onde, um líquido é disperso (fase dispersa) em outro líquido (fase contínua). As emulsões constituem uma única mistura, porém tendem a ser termodinamicamente instáveis. Em geral, num poço de extração de petróleo as fases encontram-se separadas (água, óleo e gás). A emulsão do tipo água em óleo (A/O), por exemplo, se forma durante o processo de elevação devido à forte agitação imposta e ao intenso cisalhamento causado pela despressurização através de válvulas do tipo *choke*. Esta válvula é responsável por controlar a vazão da emulsão que é extraída do poço.

É interessante observar que, no início da produção de um poço de petróleo é extraído um baixo teor de água. Porém, com a continuidade da extração, o poço tende a esgotar sua quantidade de petróleo e é necessário adicionar água ao poço para manter a pressão elevada do mesmo. Conforme o poço envelhece, ou seja, a vida útil de produção tende ao fim, mais água

é introduzida no reservatório e menos petróleo é retirado, sendo comum o teor de água ultrapassar 50% (SILVA, 2004).

A emulsão é parte integrante do processo de elevação, pois apesar de ser mais viscosa que o petróleo, produzindo maiores perdas de carga, sem ela aconteceria a aparição de incrustações nas tubulações ocorrendo maior taxa de corrosão devido à salinidade da água.

As emulsões podem ser classificadas quanto ao tipo em (CUNHA, 2007):

- Emulsões do tipo água em óleo (A/O)
- Emulsões do tipo óleo em água (O/A)
- Emulsões do tipo mistas A/O/A ou O/A/O

A Figura 2.1 apresenta os tipos de emulsões entre água e óleo. A emulsão A/O é caracterizada quando a fase dispersa é a água e a fase contínua é o óleo, sendo este tipo o mais encontrado na indústria petrolífera.

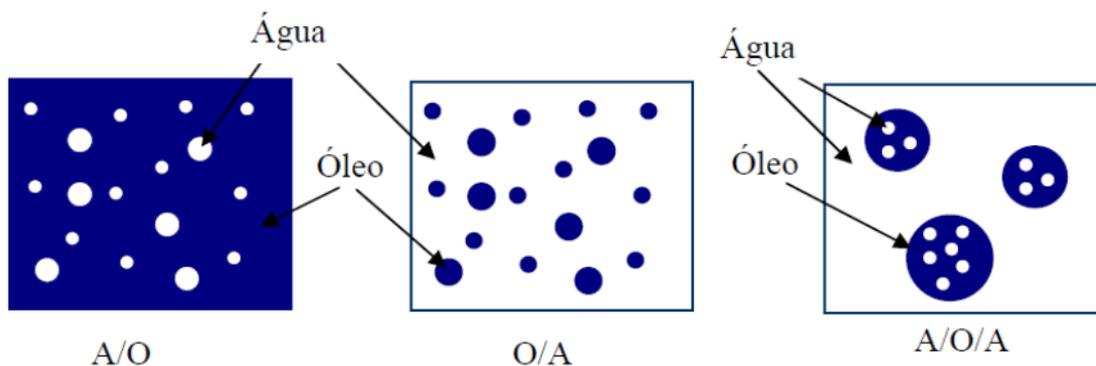


Figura 2.1 – Tipos de emulsões (retirada de Cunha, 2007).

A especificação de uma emulsão entre A/O ou entre O/A depende de vários fatores, tais como, a composição do fluido (razão de água), os tipos de agentes emulsificantes, a composição da água e, principalmente, das propriedades do petróleo (KOKAL, 2002). Este último fator é o que motiva tantos estudos envolvendo emulsões, uma vez que o petróleo de uma dada região do mundo possui características distintas de qualquer outro de outra região.

Quando se tem um dado tipo de emulsão, podem ser feitos testes de condutividade para determinar se esta é A/O ou O/A, porque se sabe que o óleo é um composto isolante e que a água, devido aos sais é forte condutora de eletricidade. Um método mais simples para identificar o tipo de emulsão é colocar uma gota da mesma num recipiente (Becker) com água; a gotícula permanecerá caso seja de uma emulsão A/O (KOKAL, 2002).

Para que uma emulsão seja formada, três condições devem ser satisfeitas (SILVA, 2004):

- Existência de dois líquidos imiscíveis em contato;
- Existência de forte agitação;
- Presença de agentes emulsificantes.

Na composição do petróleo cru podem-se encontrar agentes emulsificantes, sendo os principais, as resinas, os asfaltenos e os ácidos naftênicos. Estes compostos possuem alta massa molecular, alto ponto de ebulição e possuem a característica de serem anfífilos (possuem em sua molécula parte polar e parte apolar). Devido a esta afinidade dupla (hidrofílica e lipofílica) os agentes emulsificantes migram para a interface das gotículas de água formando uma espécie de película ou filme interfacial. A película formada por agentes emulsificantes impede o contato de uma gotícula com outra, dificultando a coalescência e a separação das fases. Quanto maior a concentração de emulsificantes, mais estável é a emulsão. A rigidez do filme interfacial vai depender também da natureza e do grau de empacotamento das moléculas (SILVA, 2004).

2.2.1 - Estabilidade de Emulsões

A capacidade de se manter homogênea durante determinado intervalo de tempo é uma característica muito importante das emulsões e é chamada de estabilidade de emulsão. De acordo com Rosa (2003), as emulsões estabilizadas fisicamente são formadas sem adição de substâncias surfactantes, ou seja, aquelas em que a estabilidade é mantida por cargas elétricas inerentes ao sistema ou a outras forças. A separação de determinadas emulsões estáveis sem tratamento químico pode levar semanas ou meses ou até mesmo podem nunca se separar, enquanto outras podem se separar em poucos minutos. De acordo com Manning *et al.* (1995) a instabilidade da emulsão ou a razão pela qual as partículas dispersas coalescem e quebram a emulsão depende de alguns parâmetros; os principais são:

- Tensão Interfacial – quando as partículas colidem, rompem a película formada pelo filme interfacial e há a coalescência, porém, quando um agente emulsificante está

adsorvido em torno da partícula impede a coalescência e diminui a tensão interfacial causando a formação de partículas menores estabilizando a emulsão;

- Envelhecimento da emulsão – à medida que o filme interfacial que reveste a partícula emulsionada envelhece a adsorção de agentes emulsionantes se completa e a resistência da película interfacial aumenta, até conseguir seu valor estável. Disto resulta que quanto mais velha uma emulsão, mais estável fica. Por isso, o tratamento para romper uma emulsão deve ser efetuado o mais cedo possível, inclusive de forma preventiva;
- Viscosidade da Fase Contínua – se esta viscosidade for muito alta o coeficiente de difusão e a frequência de colisão baixa, deixando a emulsão muito mais estável;
- Temperatura – a adição de calor reduz a viscosidade do óleo (fase contínua) que permite coalescência mais rápida, tende também a reduzir a resistência das películas interfaciais e a desestabilizá-las. Também tem o efeito de dissolver os cristais pequenos de parafina e asfaltenos neutralizando o efeito deles, assim como o potencial dos emulsificadores. Mas, adicionar calor na corrente resulta em um “encolhimento” do óleo, ou perda de volume, pois os componentes mais leves são evaporados tornando o óleo mais pesado e diminuindo o seu valor comercial.

Quando as emulsões são formadas não se percebe visualmente a presença de duas fases distintas. Entretanto, as emulsões são termodinamicamente instáveis, e por este motivo, tendem a se separar retornando à condição original de duas fases. A estabilidade das emulsões depende de vários fatores, sendo a presença de emulsificantes naturais nas interfaces o principal fator de estabilização das emulsões, capaz de reduzir a probabilidade de coalescência entre as gotas (AUFLEM, 2002).

2.3 - Presença de Emulsões numa Planta de Processamento Primário do Petróleo

Nos campos petrolíferos, a água é concomitantemente produzida com o óleo, seja esta oriunda do próprio reservatório (água presente originalmente nos poros da rocha) ou de injeção de água nos projetos de recuperação secundária. Essa água produzida pode estar presente no

petróleo sob duas formas: como água livre, na qual a separação por decantação ocorre rapidamente ou como água emulsionada (KOKAL, 2002).

Uma vez formadas, as emulsões de petróleo são normalmente estáveis, tornando o processo de separação relevante. Durante a produção, é essencial separar a água e a salmoura do óleo cru, objetivando reduzir o potencial de corrosão das linhas. Grande parte da água que vem associada ao petróleo é facilmente separada por simples decantação nos separadores. Porém, a água emulsionada remanescente apresenta uma porcentagem de óleo acima da especificação requerida pelas refinarias. Assim, torna-se necessária a quebra desta emulsão. Emulsões estáveis podem ser quebradas aumentando o tempo de sedimentação, através de aquecimento, da utilização de agentes desemulsificantes, do tratamento eletrostático, de centrifugação e da filtração. A desestabilização, ou quebra das emulsões O/A ocorre com a coalescência das gotas de óleo que se encontram dispersas na fase aquosa. A coalescência ocorre com a remoção do filme interfacial, seguida da fusão das gotas de óleo em gotas maiores.

A Figura 2.2 representa um esquema dos fenômenos envolvidos na ruptura de emulsões tipo O/A, na qual envolvem as seguintes etapas distintas: floculação, coalescência e sedimentação.

A floculação é a adesão reversível das gotículas, com manutenção do filme interfacial e da individualidade, formando uma rede bidimensional, sem coalescência. A coalescência é o processo de crescimento das gotículas emulsionadas, formando gotículas maiores que se separam completamente da fase externa. Na sedimentação (cremeação), as partículas da emulsão tendem a se separar do corpo da emulsão, sedimentando ou emergindo de acordo com a diferença de densidade entre as fases.

A etapa de sedimentação é regida pela Lei de Stokes, que descreve o movimento ascendente de uma gota de óleo em água, onde a velocidade terminal, ou seja, a velocidade de sedimentação, é determinada pela Equação (2.1), a qual é deduzida na seção 3.3.2.

$$V = g \frac{(\rho_{\text{água}} - \rho_{\text{óleo}})}{18\mu_{\text{água}}} d^2 \quad (2.1)$$

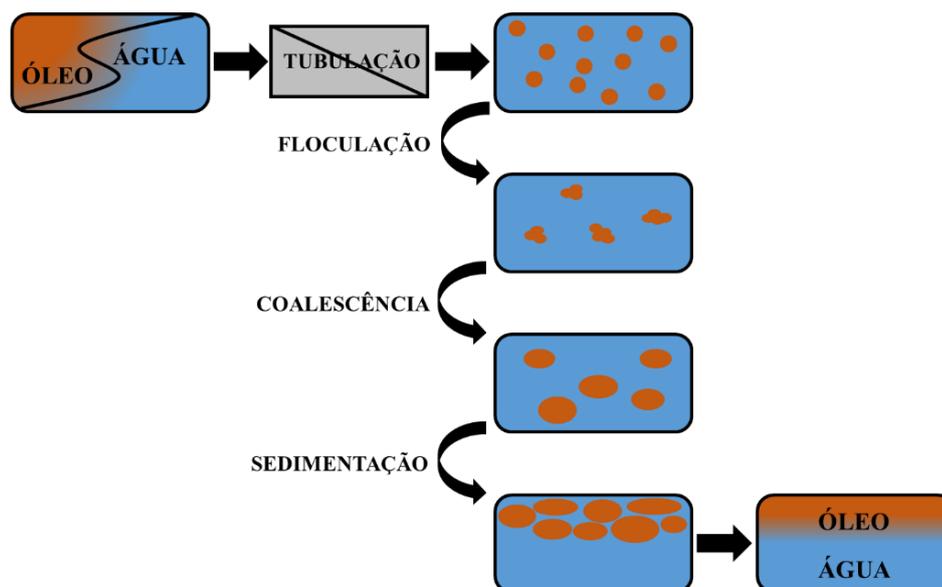


Figura 2.2 – Fenômenos envolvidos na ruptura de emulsões tipo O/A.

A partir da Lei de Stokes, verifica-se que a velocidade terminal da gota é influenciada pelo tamanho de gota, pela diferença da densidade entre as fases contínua e dispersas e pela viscosidade da fase contínua. Porém, essa velocidade decresce com a viscosidade da fase contínua, o que faz com que o processo de sedimentação em emulsões de óleos pesados e ultra pesados, se torne mais lento. Uma forma de reduzir o problema é aquecer a emulsão, pois o aumento da temperatura diminui (exponencialmente) a viscosidade da água e provoca um aumento na diferença de densidade das fases (SALAGER *et al*, 2001).

2.3.1 - Água Produzida ou Água de Injeção

A água produzida (AP) é a água aprisionada nas formações subterrâneas que é trazida à superfície juntamente com petróleo e gás durante as atividades de produção desses fluidos. Entre os aspectos da AP que merecem atenção estão os seus elevados volumes e a complexidade da sua composição. Esses aspectos fazem com que o gerenciamento da AP requiera cuidados específicos, não apenas relacionados com aspectos técnicos e operacionais mas, também, aos aspectos ambientais. Como consequência, o gerenciamento da AP resulta em custos consideravelmente elevados e que representam um percentual significativo dos custos de produção (AMINI *et al.*, 2012).

A AP é gerada como subproduto da produção de petróleo e gás, durante o processo de separação pelo qual esses fluidos passam (processamento primário) para que possam se transformar em produtos comerciais. As alternativas usualmente adotadas para o seu destino são o descarte, a injeção e o reuso. Em todos os casos, há necessidade de tratamento específico a fim de atender as demandas ambientais, operacionais ou da atividade produtiva que a utilizará como insumo. Um dos objetivos do tratamento é a remoção de óleo, que pode estar presente na água sob as formas livre, em emulsão (ou emulsionada) e dissolvido. Dessas três, o óleo sob a forma emulsionada é a que mais preocupa, devido ao elevado grau de dificuldade encontrado para a sua remoção.

2.3.2 - Principais Técnicas de Tratamento da Água Produzida

O tipo de processo a ser adotado para o tratamento da AP depende dos compostos que se deseja remover. Os compostos a serem removidos, por sua vez, dependem do destino final a ser adotado para a AP tratada que, conforme citado anteriormente, pode ser descarte, injeção ou reuso.

No caso da remoção de óleo, normalmente o destino final da AP tratada é o descarte ou a injeção. Um dos processos mais utilizados é a flotação a ar precedida de adição de produtos químicos desemulsificantes (HONG; FANE; BURFORD, 2003). Outros processos usados são hidrociclones (SAIDI *et al.*, 2012), coalescedores de leite (SOKOLOVIĆ; SOKOLOVIĆ; SEVIC, 2009) e separadores gravitacionais (STEWART & ARNOLD, 2011). Entretanto, esses processos apresentam desvantagens, como o elevado tempo de residência requerido, a utilização de produtos químicos especiais e caros, a geração de resíduos sólidos e baixas eficiências, principalmente no caso de gotas com diâmetros na faixa de micrômetros ou submicrômetros (HONG; FANE; BURFORD, 2002, 2003). O problema é ainda mais agravado quando estão presentes agentes tenso-ativos, muito comum em emulsões O/A da AP. Esses compostos fixam-se às superfícies das gotículas de óleo, aumentando as forças de repulsão entre elas. A Figura 2.3 apresenta os principais processos de tratamento de AP para a remoção de óleo, com algumas características comparativas entre eles.

	Hidrociclones	Flotadores	Coalescedores de Leito	Separadores Gravitacionais Convencionais	Separadores Gravitacionais de Placas
Princípio Operacional	Separação Gravitacional Aprimorada	Flotação a Gás Natural	Coalescência + Separação Gravitacional	Separação Gravitacional	Coalescência + Separação Gravitacional
Capacidade de Remoção, em Diâmetro de Gota (μm)	10 a 30	10 a 20	10 a 15	100 a 150	30 a 50
Requerimento de Área Superficial	Baixo	Baixo	Baixo	Elevado	Elevado
Requerimento por Produtos Químicos	Não	Sim	Não	Não	Não
Aplicação em Instalações de Tratamento da AP	Offshore	Onshore e Offshore	Onshore e Offshore	Onshore	Onshore
Principais Desvantagens	Bloqueio da Porta de Rejeito por Areia ou Incrustação e Erosão por Areia	Pouco Efeito em Gotas entre 2 e 5 μm ; Uso de Químicos e Geração de Lodo	Bloqueio dos Poros e Necessidade por Retrolavagem	Tamanho e Peso Muito Elevados; Baixa Eficiência para Diâmetro de Gotas Menores	Tamanho e Peso Elevados

Figura 2.3 – Principais processos de tratamento da Água Produzida (Adaptado de Stewart e Arnold – 2011).

2.4 - Concentrações das Emulsões

Como já dito anteriormente, os reservatórios de óleo produzem juntamente com os hidrocarbonetos a AP oriunda das próprias formações geológicas. Contudo, a fim de se conseguir uma produção máxima do reservatório é utilizada a técnica de injeção de água por poços injetores, para promover o deslocamento do óleo em direção à superfície. Consequentemente, além da AP, essa água injetada é produzida junto com os hidrocarbonetos. Em um campo de óleo maduro, a quantidade de água produzida aumenta devido a maior quantidade de água no reservatório originada pelo processo de injeção, isso faz com que durante o processamento primário do petróleo tenha-se uma maior concentração de água emulsificada no óleo, que é a fase contínua nesse caso (A/O).

Após esse primeiro processamento, a AP resultante ainda representa um risco para seu descarte ou reinjeção. A concentração de óleo total na AP pode variar desde valores relativamente baixos, como 50 a 600 mg/L (QIAO ET AL., 2008), até mais elevados, superiores a 1.000 mg/L (CHAKRABARTY, GHOSHAR, PURKAIT, 2008). Nesse caso tem-se uma emulsão do tipo O/A.

2.5 - Publicações Recentes

Há atualmente duas técnicas numéricas utilizadas para a solução de problemas de interface entre fluidos. A primeira técnica é o método de acompanhamento ou de rastreamento da interface; este método é baseado no acompanhamento Lagrangeano da interface, que é advecada com a própria velocidade induzida sobre ela (TRYGGVASON *et al.*, 2001; UNVERDI & TRYGGVASON, 1992). Este método pode resolver com bastante precisão o comportamento temporal da interface através da imposição da tensão superficial e da condição de velocidade na interface.

Na segunda técnica se encontra o método de captura da interface. Em comparação com a primeira técnica, a interface não é explicitamente fornecida, isto é, ela é determinada em cada instante de tempo por um contorno de uma variável de campo, tal como fração volumétrica, e por uma função distância (DING *et al.*, 2010).

Há vantagens e desvantagens entre as duas técnicas mencionadas; neste trabalho utiliza-se a técnica do acompanhamento Lagrangeano da interface para simular escoamentos bidimensionais isotérmicos, no entanto, as gotas de óleo sempre se mantêm com a forma esférica durante uma simulação numérica típica.

No contexto do presente trabalho, a velocidade instantânea induzida sobre uma gota de óleo genérica, k , é calculada através da aplicação da Segunda Lei de Newton (AOYAMA *et al.*, 2017; JING *et al.*, 2017; ZHOU *et al.*, 2017):

$$m_k \frac{d\mathbf{V}_k}{dt} = \rho_{\text{óleo}} \mathcal{V}_{\text{óleo}} \frac{d\mathbf{V}_k}{dt} = \mathbf{F}_{\text{peso}} + \mathbf{F}_{\text{empuxo}} + \mathbf{F}_{\text{massa virtual}} + \mathbf{F}_{\text{arrasto}} + \mathbf{F}_{\text{sustentação}} + \mathbf{F}_{\text{tensão superficial}} \quad (2.2)$$

onde m_k é a massa da gota de óleo, $d\mathbf{V}_k$ é o incremento de velocidade que a gota de óleo sofre durante um intervalo de tempo dt , $\rho_{\text{óleo}}$ é a massa específica do óleo, $\mathcal{V}_{\text{óleo}}$ é o volume da gota de óleo (assumida como esférica), \mathbf{F}_{peso} é a força de massa (gravidade), $\mathbf{F}_{\text{empuxo}}$ é a força de empuxo, $\mathbf{F}_{\text{massa virtual}}$ é a força correspondente à massa de água extra que a gota de óleo tem que

deslocar quando acelera (este termo é desconsiderado quando se assume movimento da gota de óleo em regime permanente), F_{arrasto} é a força de arrasto, $F_{\text{sustentação}}$ é a força de sustentação e $F_{\text{tensão superficial}}$ é a força de tensão superficial (este termo é desconsiderado quando se assume que a interface entre a água e o óleo não sofre modificações).

A taxa de migração lateral, a posição de equilíbrio e a distribuição final das gotas de óleo são as principais características de escoamento multifásico no interior de um duto de seção retangular (RAZI & POURGHASEMI, 2017; LAN & KHISMATULLIN, 2012; MORTAZAVI & TRYGGVASON, 2002). Os principais parâmetros que governam este problema são: razão entre viscosidades, razão entre massas específicas, deformabilidade da gota, número de Reynolds e razão entre os diâmetros da gota e do duto. Mudanças nestes parâmetros resultam em novas e diferentes condições de escoamento e, portanto, diferentes taxas de migração e padrões de distribuição de partículas (HILLER & KOWALEWSKI, 1986). Para o estudo da separação das fases óleo e água, essas análises se tornam importantes na medida em que a complexidade da formulação geral é aumentada.

Gao *et al.* (2017) estudaram a trajetória de gotas de óleo no interior de um tanque de água considerando-se a presença de várias forças externas atuantes sobre a superfície das partículas. As forças consideradas foram: força de arrasto, força de sustentação, força de massa virtual e a força de empuxo. Os autores verificaram que a força de sustentação pode ser desprezada e que a força de massa virtual não é importante para gotas de óleo de diâmetro menor do que 500 μm . As observações visuais e a modelagem numérica usando um método de partículas Lagrangeno mostraram que as gotas de óleo de diâmetro maior que 300 μm tendem a se separar da pluma de óleo e migrar para a parte superior do tanque.

Diferentes estudos na literatura mostram que o transporte e o destino do óleo disperso na água são afetados pelo tamanho das gotas de óleo presentes (BRAKSTAD *et al.*, 2015; CHEN *et al.*, 2015; RAMSEUR, 2010). Há um aumento da área de superfície do óleo devido ao aumento do número de pequenas gotas de óleo; uma área maior melhora a dissolução de hidrocarbono e, conseqüentemente, a biodegradação do óleo (ZHAO *et al.*, 2015; 2016). Pequenas gotas de óleo apresentam pequena força de empuxo (GENG *et al.*, 2016) e tendem a permanecer embaixo da água suspensas por efeitos da turbulência, enquanto que as maiores gotas de óleo tendem a subir rapidamente para a superfície da água (KOROTENKO *et al.*,

2004). Gotas de óleo de diâmetros menores estão mais sujeitas a influência da turbulência em comparação com gotas de diâmetros maiores (WANG *et al.*, 2016).

Neste trabalho não há a inclusão de variados efeitos de interferência sobre o comportamento dinâmico das gotas de óleo, tais como, movimento em regime não permanente, deformação da interface e quebra da gota. No entanto, a inclusão de efeitos de coalescência tem como finalidade construir um algoritmo mais apurado e que faça uma previsão menos simplista do comprimento final do duto para subsidiar o cálculo da eficiência de separação em projetos de engenharia.

Um separador gravitacional pode ser construído considerando-se configurações diferentes para um conjunto de dutos. Neste trabalho é analisada a coalescência de gotas de óleo dispersas na água para um duto isolado, de seção circular, e que não troca calor com o meio externo. Não há muitos resultados na literatura para solução deste tipo de problema.

CAPÍTULO 3

FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO PROBLEMA

3.1 - Introdução

Neste capítulo é apresentada a formulação geral para o estudo de escoamentos bifásicos de gotas de óleo dispersas na fase contínua água, que se desenvolvem no interior de um duto de seção circular constante. Para o entendimento dos efeitos da coalescência são feitas algumas hipóteses simplificadoras, as quais são admitidas para a redução da complexidade do problema; mesmo assim, conclusões importantes podem ser obtidas com o objetivo de contribuir na literatura e auxiliarem no planejamento de análises futuras mais complexas desta classe importante de problemas que possui uma variedade de aplicações, tais como, na redução de arrasto, na termodinâmica e na transferência de calor.

Com as hipóteses assumidas, pode-se apresentar as equações do movimento das gotas de óleo e as condições de contorno para o problema. Ao final deste Capítulo discute-se a metodologia proposta para a análise preliminar do fenômeno da coalescência de gotas de óleo durante o processo de sedimentação.

3.2 - Hipóteses Assumidas

A fim de reduzir a complexidade do problema e apresentar uma formulação geral (equação do movimento da partícula e condições de contorno) para o estudo do escoamento de emulsões de óleo em água, devem ser assumidas algumas hipóteses. Estas hipóteses estão divididas da seguinte maneira:

3.2.1 - Hipótese Relativa à Geometria

H_1 : O escoamento realiza-se no interior de um duto com seção circular constante e orientado horizontalmente, ele é assumido como sendo bidimensional.

3.2.2 - Hipóteses Relativas às Propriedades dos Fluidos

H_2 : O comportamento reológico da emulsão assume que o óleo é a fase dispersa e a água é a fase contínua. As gotas de óleo mantêm a forma esférica durante todo o escoamento da emulsão.

H_3 : As propriedades termodinâmicas dos dois fluidos, isto é, a massa específica (ρ) e o coeficiente de viscosidade dinâmica (μ) são assumidos como constantes em todo o domínio fluido. Esta hipótese desconsidera, portanto, os efeitos de interação térmica entre os fluidos e a parede do tubo.

3.2.3 - Hipóteses Relativas às Propriedades do Escoamento

H_4 : Os efeitos de compressibilidade são desprezados, ou seja, o número de Mach associado com o escoamento da fase contínua é assumido como sendo $Ma < 0,3$; na verdade, sabe-se que o número de Mach é muito menor do que 0,3.

H_5 : O escoamento se realiza em regime permanente, a vazão de entrada da emulsão é constante e a velocidade de sedimentação das gotas de óleo não sofre mudança.

H_6 : Assume-se o escoamento como sendo lento, onde há o predomínio das forças viscosas sobre as forças inerciais (o número de Reynolds é muito pequeno, da ordem de 1). Como consequência imediata desta hipótese, a força de arrasto que atua sobre uma gota de óleo tem dependência apenas do diâmetro da gota de óleo, da velocidade de sedimentação da gota de óleo e do coeficiente de viscosidade dinâmica da água. Esta hipótese é explorada permitindo o uso da Lei de Stokes.

H_7 : Assume-se que o acoplamento das fases dos escoamentos bifásicos acontece em mão única. Considera-se que uma gota de óleo se movimenta, por exemplo, devido ao arrasto de atrito, força que a água exerce na gota de óleo, e que esta mesma força não atua em sentido contrário na água (o escoamento, portanto, não está acoplado em mão dupla). O fato de se

considerar o acoplamento em sentido único (mão única) ou em sentido duplo (mão dupla) levará futuramente à necessidade de se acrescentar termos fontes nas equações de conservação das fases.

O movimento de uma nuvem de partículas no interior de um fluido pode ser classificado como diluído ou como denso. Nos escoamentos diluídos assume-se que o movimento da partícula é controlado pelas forças de campo e de superfície. Nos escoamentos densos, os principais mecanismos associados ao movimento das partículas são as colisões e as interações partícula-partícula. Nesta formulação o movimento das gotas de óleo é estudado unicamente pela ação das forças de campo e de superfície.

3.3 - Formulação em Regime Permanente

3.3.1 - Cinemática das Gotas de Óleo

Para a formulação da metodologia, nesta Seção considera-se como base as hipóteses assumidas na Seção 3.2 e o movimento das gotas de óleo em regime permanente; com isso adota-se que o perfil de velocidade da fase contínua é governado pelo escoamento de Poiseuille (WHITE, 2002). O perfil parabólico dado pela Figura 3.1 é definido por:

$$U_{poiseuille} = 2\bar{V}\left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) \quad (3.1)$$

onde:

- \bar{V} é a velocidade média (vazão da emulsão sobre a área transversal do escoamento);
- r é a distância de uma gota de óleo em relação ao centro do tubo na direção y ;
- R é o raio do tubo;
- $U_{poiseuille}$ é a velocidade horizontal induzida na gota de óleo pelo perfil de velocidades de Poiseuille.

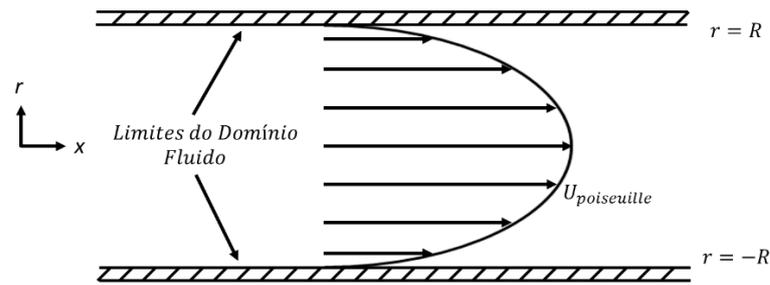


Figura 3.1 – Perfil de velocidades parabólico para a fase contínua (água).

Assim, para se determinar o deslocamento da fase dispersa é necessário o cálculo da velocidade de sedimentação, na direção do eixo y . Esse cálculo é realizado através da Lei de Stokes apresentada na próxima Seção.

3.3.2 - Dinâmica das Gotas de Óleo (Lei de Stokes)

Considere uma gota de óleo de massa m , e de diâmetro d , que se encontra imersa na água e se desloca verticalmente para cima com uma velocidade constante V (hipótese H_5) sob a ação da força de campo (gravidade) e de duas forças de superfície, empuxo e arrasto. A Figura 3.2 representa a atuação das forças externas sobre a gota de óleo durante o processo de sedimentação.

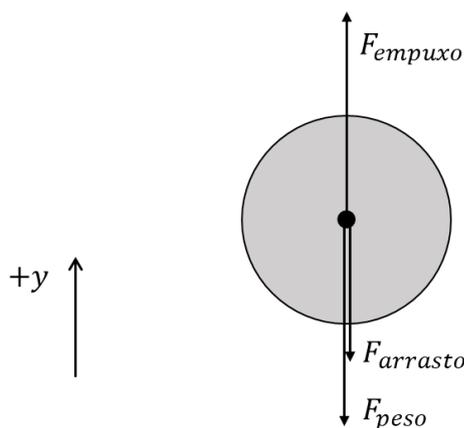


Figura 3.2 – Equilíbrio de forças sobre uma gota de óleo em regime permanente.

A dinâmica da gota de óleo indica que partículas com massa geralmente movem-se no interior de um fluido e ficam submetidas ao efeito de diferentes componentes de forças

hidrodinâmicas atuantes sobre a sua superfície. A dinâmica de uma partícula genérica de massa m_k imersa em um fluido é regida pela Segunda Lei de Newton, que é dada por:

$$m_k \frac{d\mathbf{V}_k}{dt} = \sum \mathbf{F}, \quad (3.2)$$

onde \mathbf{V}_k é a velocidade da partícula e \mathbf{F} representa as forças responsáveis pelo movimento da partícula.

As forças hidrodinâmicas atuantes na partícula podem ser subdivididas em forças de campo (por exemplo, o peso devido à força gravitacional) e forças de superfície (resultantes do movimento do fluido que está ao redor da partícula). As forças de superfície, por exemplo, são representadas pelo arrasto (na direção oposta à direção do movimento da partícula) e pela força de sustentação (perpendicular à direção do movimento da partícula). Forças devidas a existência de gradientes de velocidade (presença de paredes) e/ou rotação da própria partícula podem ainda se manifestar em diversas situações. Estas forças hidrodinâmicas são até hoje motivo de grande pesquisa e diferentes hipóteses são assumidas nos estudos realizados. Forças de outras naturezas podem, ainda, atuar na partícula como, por exemplo, força devido à presença de campo magnético.

O grupo das forças de superfície, que se originam em geral da resistência ao movimento da partícula imposta pelo fluido, representa o acoplamento da quantidade de movimento entre as fases. A determinação destas forças continua sendo motivo de pesquisa experimental, analítica ou mesmo numérica.

Nesta formulação são consideradas na Equação (3.2) as forças devidas aos seguintes efeitos (veja a Figura 3.2):

- a) Força peso da gota (causada pela ação do campo gravitacional);
- b) Força de empuxo (causada pela diferença entre as massas específicas da gota e da água);
- c) Força de arrasto (devido à hipótese H_6 , a gota de óleo movimenta-se com baixa velocidade, o número de Reynolds é muito pequeno, e a força pode ser estimada pela Lei de Stokes).

A inclusão de forças de outras origens fica reservada como assuntos de investigações futuras. Neste trabalho, portanto, a velocidade V_k de uma gota genérica é calculada pelo balanço de forças externas atuantes sobre a própria gota, o que é obtido a partir da Equação (3.2):

$$m_k \frac{dV_k}{dt} = \rho_{gota} \mathcal{V}_{gota} \frac{dV_k}{dt} = \mathbf{F}_{peso} + \mathbf{F}_{empuxo} + \mathbf{F}_{arrasto} \quad (3.3)$$

onde \mathcal{V}_{gota} é o volume da gota de diâmetro d , e que é dado por:

$$\mathcal{V}_{gota} = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{d}{2} \right)^3 = \pi \frac{d^3}{6} \quad (3.4)$$

A seguir, estão definidas as expressões matemáticas para todas as forças presentes no lado direito da Equação (3.3).

A) Força Peso

Os componentes da força que o campo gravitacional $\mathbf{g} = i0 - jg$ exerce sobre uma gota são definidos como:

$$\mathbf{F}_{peso} = \rho_{gota} \mathcal{V}_{gota} (\mathbf{i}0 - \mathbf{j}g) \quad (3.5)$$

onde \mathbf{i} e \mathbf{j} são os versores das direções x e y , respectivamente, e ρ_{gota} é a massa específica da gota.

B) Força de Empuxo

A força de empuxo atuante sobre uma gota de óleo imersa na água é regida pela 2ª Lei de Arquimedes:

$$\mathbf{F}_{empuxo} = \mathbf{j} \rho_{\acute{a}gua} g \mathcal{V}_{gota} \quad (3.6)$$

onde $\rho_{\acute{a}gua}$ é a massa específica da fase contínua, água, e g é a aceleração local da gravidade.

C) Força de Arrasto

A hipótese H_6 permite que se assuma que a força de arrasto atuante sobre uma gota de óleo que se desloca no interior da água tenha dependência apenas das seguintes grandezas:

- a) Diâmetro da gota de óleo, d ;
- b) Coeficiente de viscosidade dinâmica da fase contínua (água), $\mu_{\text{água}}$;

Assim, usando argumentos da Análise Dimensional (WHITE, 2002) escreve-se a seguinte versão da equação para a força de arrasto (Lei de Stokes):

$$\mathbf{F}_{\text{arrasto}} = -\mathbf{j}3\pi\mu_{\text{água}} Vd \quad (3.7)$$

onde a constante 3π é obtida experimentalmente.

Por consequência, a Equação (3.3) pode ser escrita na seguinte forma para a direção do eixo dos y (Figura 3.2):

$$\rho_{\text{gota}} \mathcal{G}_{\text{gota}} \frac{dV_k}{dt} = -\rho_{\text{gota}} \mathcal{G}_{\text{gota}} \mathbf{g} + \rho_{\text{água}} \mathcal{G}_{\text{gota}} \mathbf{g} - 3\pi\mu_{\text{água}} Vd \quad (3.8)$$

Isolando-se o componente V_k da velocidade da k -ésima gota de óleo na direção do eixo dos y , chega-se na equação da Lei de Stokes adotada para o caso de regime permanente:

$$V_k = g \frac{(\rho_{\text{água}} - \rho_{\text{gota}})}{18 \mu_{\text{água}}} d^2 \quad (3.9)$$

3.3.3 - Equação da Trajetória das Gotas de Óleo

Para o cálculo da trajetória de uma gota de óleo com sua velocidade total induzida conhecida, para regime permanente, aplica-se a teoria de MRU (Movimento Retilíneo Uniforme). A Figura 3.3 descreve a trajetória de uma partícula conhecido o vetor velocidade induzida $V(t)$ durante um incremento de tempo Δt .

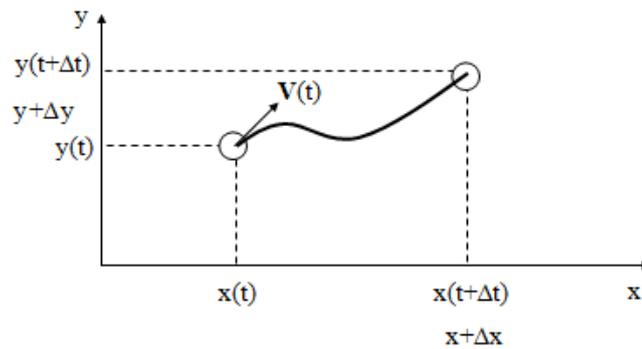


Figura 3.3 – Trajetória da partícula.

Assim, utilizando a definição de velocidade e substituindo os parâmetros da Figura 3.3 tem-se:

$$\mathbf{V}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{S}}{\Delta t} \quad (3.10)$$

$$\Delta \mathbf{S} = \mathbf{i}(x + \Delta x - x) + \mathbf{j}(y + \Delta y - y) = \mathbf{i}\Delta x + \mathbf{j}\Delta y \quad (3.11)$$

Aproximando a Equação (3.10) através de um esquema de primeira ordem de Euler, resulta:

$$\Delta \mathbf{S}_k \approx \mathbf{V}_k(t) \Delta t \quad (3.12)$$

Portanto, a equação vetorial que descreve a advecção de uma gota de óleo é:

$$\mathbf{S}_k(t + \Delta t) = \mathbf{S}_k(t) + \mathbf{V}_k(t) \Delta t \quad (3.13)$$

3.4 - Coalescência de Gotas de Óleo

O conceito de coalescência, que tem origem no vocábulo latino “*coalescens*”, é a propriedade de as coisas se fundirem ou unirem. As substâncias ou os materiais coalescentes são aqueles que podem-se unir num único corpo. Para a química, a coalescência implica em um

processo através do qual dois domínios de fase de composição essencialmente idêntica têm um contato e formam um domínio de fase maior.

Um exemplo de coalescência ocorre ao misturar água e óleo e agitar o recipiente. Num instante, pode-se ver a fusão de pequenas gotas em unidades cada vez maiores até comporem uma única grande gota que supõe a separação final entre ambas as substâncias.

A estabilidade de uma emulsão, entre outros fatores, depende da floculação e da coalescência. Esse fenômeno é praticamente irreversível e ocorre quando há ruptura dos filmes interfaciais formados na superfície das gotas. O mecanismo da coalescência ocorre em duas etapas; drenagem do filme e ruptura do filme. Para se ter a drenagem do filme, deve haver um fluxo de fluido no filme e um gradiente de pressão presente. Com isso, quando a película interfacial entre as gotículas diminuiu para abaixo de uma espessura crítica, ela se rompe, e a diferença de pressão capilar faz com que as gotículas se fundam rapidamente em uma gota (AUFLEM, 2002).

A quantificação da coalescência é função da concentração de emulsificante presente na emulsão. Na indústria do petróleo, quanto mais substâncias que atuam como emulsificantes naturais estiverem presentes, mais dificilmente ocorre a coalescência.

A seguir é apresentado o processo matemático de coalescência das gotas de óleo assumido para as análises deste trabalho.

Com base na Figura 3.4, pode-se escrever que a distância entre duas gotas de óleo é dada por:

$$r_{1,2} = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \quad (3.14)$$

Em seguida, utiliza-se um critério de coalescência estabelecido por:

$$r_{1,2} = \beta(r_1 + r_2) \quad (3.15)$$

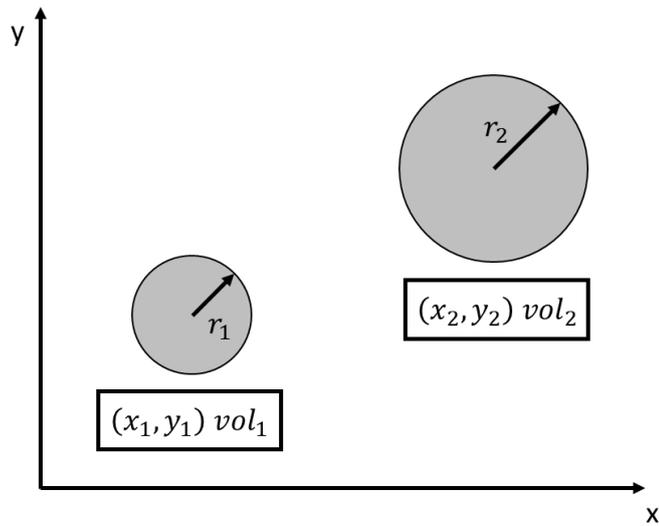


Figura 3.4 – Representação de duas gotas de óleo distintas e suas respectivas dimensões.

O valor de β (fator de recobrimento) na Equação (3.15) pode ser adotado como valores entre 0 e 1. Obviamente, quando o valor de β é igual a 1, há mais gotas coalescendo, bem como, quando esse valor tende a zero, a coalescência torna-se mais difícil. Essa hipótese é bem razoável, visto que num sistema de separação primária podem-se controlar fatores que ajudam na coalescência, como temperatura da emulsão e presença de surfactantes.

Sabe-se que o volume de uma gota (neste caso, uma gota de óleo) é dado por:

$$V_{gota} = vol = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{d}{2} \right)^3 \quad (3.16)$$

Com isso temos que o volume combinado, vol_c , que é o volume da nova gota, é:

$$vol_c = vol_1 + vol_2 \quad (3.17)$$

onde os volumes à direita do sinal de igualdade são os volumes das gotas antes da coalescência.

A posição da gota resultante é dada por:

$$x = \frac{x_1 vol_1 + x_2 vol_2}{vol_1 + vol_2} \quad (3.18)$$

$$y = \frac{y_1 vol_1 + y_2 vol_2}{vol_1 + vol_2} \quad (3.19)$$

E, por último, o raio resultante da gota é dado então por:

$$r_c = \sqrt[3]{\left(\frac{3}{4\pi}\right) vol_c} \quad (3.20)$$

3.5 - Adimensionalização do Problema

A análise dimensional e a conseqüente adimensionalização do problema é um passo importante no sentido de reduzir o número de variáveis envolvidas nas análises e compactar os resultados encontrando relações entre os parâmetros adimensionais. Assim o modelo pode ser generalizado para quaisquer condições iniciais e de contorno. Esta etapa é de suma importância afim de diminuir o número de dados gerados, a complexidade dos resultados e, principalmente, poder validá-los.

As principais escalas escolhidas para a adimensionalização do problema são:

- Escala de comprimento: diâmetro do tubo, D ;
- Escala de velocidade: velocidade média da emulsão na seção de entrada do tubo, \bar{V} ;
- Escala de tempo: relação entre diâmetro do tubo e velocidade média da emulsão na seção de entrada do tubo, D/\bar{V} ;
- Escala de massa específica: massa específica da fase contínua, $\rho_{\text{água}}$.

Usando as escalas determinadas anteriormente, as demais grandezas presentes no problema podem ser adimensionalizadas como se segue (as grandezas adimensionalizadas são apresentadas com um índice superior, *).

- Medida da abscissa (x): $x^* = \frac{x}{D}$;
- Medida da ordenada (y): $y^* = \frac{y}{D}$;
- Medida do diâmetro do duto (D): $D^* = \frac{D}{D} = 1$;

- Medida do raio do duto (R): $R^* = \frac{R}{D} = \frac{1}{2}$
- Medida do diâmetro da gota de óleo (d): $d^* = \frac{d}{D}$;
- Posição da gota em relação ao centro do duto (r): $r^* = \frac{r}{D}$;
- Velocidade média da emulsão (\bar{V}): $\bar{V}^* = \frac{\bar{V}}{\bar{V}} = 1$;
- Incremento de tempo da simulação numérica (Δt): $\Delta t^* = \frac{\Delta t \bar{V}}{D}$;
- Comprimento máximo do duto ($L_{máx}$): $L_{máx}^* = \frac{L_{máx}}{D}$
- Comprimento utilizado para o cálculo da concentração de óleo em água na seção de entrada do tubo (L_0): $L_0^* = \frac{L_0}{D}$
- Comprimento utilizado para impressão dos resultados da nuvem de gotas ($deltx$): $deltx^* = \frac{deltx}{D}$

Outros parâmetros adimensionais importantes ao longo da simulação e da análise de resultados são:

- Número de Reynolds: $Re = \frac{\rho_{água} \bar{V} D}{\mu_{água}}$
- Número de Froude: $Fr = \frac{\bar{V}^2}{gD}$

O número de Reynolds permite definir que o movimento da fase contínua é lento. O número de Froude leva em conta a dificuldade de se estabelecer escoamento estável de óleo pesado em água a baixas velocidades.

Estes parâmetros foram escritos em função das variáveis de escala mais representativas do problema. O passo seguinte é adimensionar as equações governantes; são elas:

- Equação de Hagen-Poiseuille: $u^* = 2\left(1 - \frac{r^{*2}}{R^{*2}}\right)$
- Equação da Lei de Stokes: $V^* = \frac{\text{Re}}{18\text{Fr}} \left(\frac{\rho_{\text{água}} - \rho_{\text{óleo}}}{\rho_{\text{água}}} \right) \mathbf{d}^{*2}$
- Equação de Advecção em x: $x^*(t + \Delta t) = x^*(t) + u^*(t)\Delta t^*$
- Equação de Advecção em y: $y^*(t + \Delta t) = y^*(t) + V^*(t)\Delta t^*$

A partir deste ponto, o * que designa parâmetro adimensional será omitido.

A Figura 3.5 esquematiza o problema adimensionalizado.

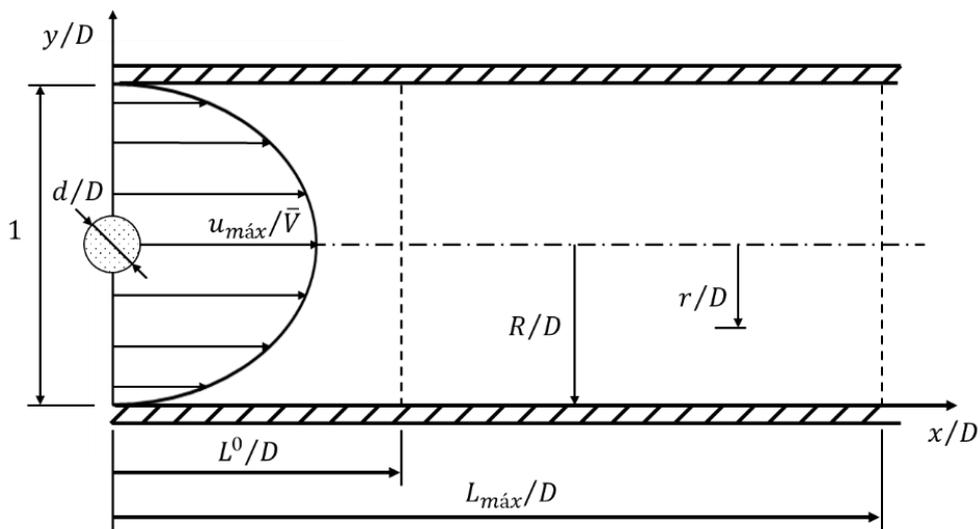


Figura 3.5 – Representação esquemática do domínio fluido adimensionalizado.

CAPÍTULO 4

SOLUÇÃO NUMÉRICA

4.1 - Introdução

Este Capítulo apresenta o algoritmo de implementação numérica do problema formulado no Capítulo 3. Uma nuvem de gotas de óleo representa a fase dispersa que se movimenta junto com a fase contínua composta de água. Para o entendimento do algoritmo utilizado neste trabalho são descritos, a seguir, os detalhes de cada etapa da estrutura do programa computacional desenvolvido em linguagem de programação FORTRAN/LINUX, representado pela Figura. 4.1.

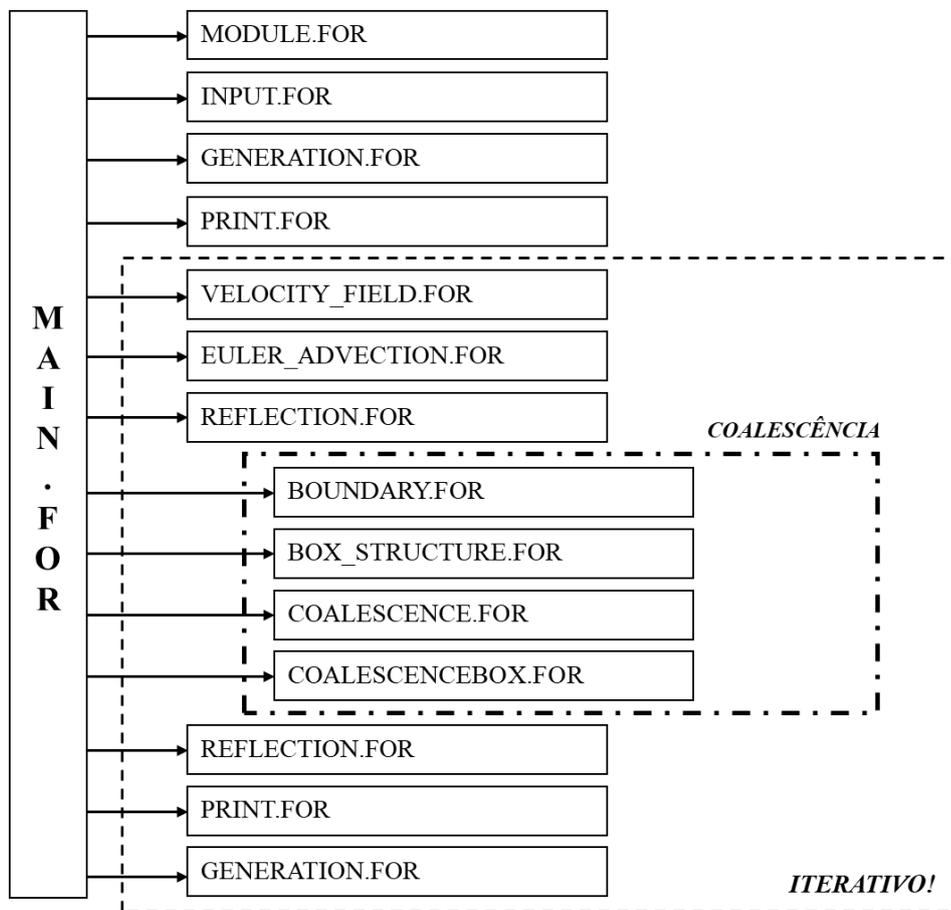


Figura 4.1 – Estrutura do algoritmo computacional.

4.2 - Subrotina MODULE.FOR

A subrotina MODULE.FOR atua como um pacote onde podem ser guardados funções e comandos para que, no momento em que forem necessários, sejam chamados e executados sem a necessidade de reescrevê-los. Além disso, nesse caso ela é responsável, também, pela alocação dinâmica de memória das principais matrizes do programa, ou seja, ela calcula e constrói matrizes de qualquer tamanho, respeitando o limite de processamento da máquina.

Módulos podem ser usados para:

- Acondicionar programas;
- Definir um dado global que pode ser usado por mais de uma subrotina;
- Declarar variáveis para ficarem acessíveis a qualquer subrotina.

4.3 - Subrotina INPUT.FOR

O programa principal MAIN.FOR aciona inicialmente essa subrotina que abre um arquivo de entrada chamado INPUT.DAT de onde são lidas e definidas as condições de contorno iniciais do programa. Abaixo segue essas variáveis:

- a) STOP: número total de avanços no tempo;
- b) OPTION: valor definido de acordo com o tipo de simulação que será realizada (1 para gota simples ou 2 para nuvem de gotas);
- c) COAL: valor definido de acordo com o tipo de simulação que será realizada (0 para simulação sem coalescência, 1 para simulação com coalescência simples e 2 para simulação com coalescência otimizada pelas caixas virtuais);
- d) GAP: número de avanços no tempo, contados a partir do primeiro instante, em que “M” gotas de óleo são geradas no escoamento da fase contínua;
- e) CONCT: valor da concentração de óleo na emulsão, em porcentagem;
- f) YMAX: valor adotado para o raio interno da tubulação;

- g) DELTX:** comprimento utilizado como referência para gravar a posição final das gotas em cada passo da simulação;
- h) T:** temperatura da emulsão, a partir da qual se calcula as massas específicas do óleo e da água;
- i) REFR:** valor adotado para a relação entre o número de Reynolds e o número de Froud no escoamento;
- j) d:** valor adotado para o diâmetro médio das gotas de óleo;
- k) DELT:** incremento de tempo usado para o avanço advectivo da nuvem de gotas de óleo (calculado através do esquema de avanço de primeira ordem de Euler);
- l) LEVEL:** valor que define a quantidade de caixas que serão construídas para o cálculo da coalescência;
- m) BETA:** fator de recobrimento utilizado no critério de coalescência ($0 < \beta \leq 1$).

De posse do valor de temperatura da emulsão, essa subrotina já calcula os valores para as massas específicas do óleo e da água, e da viscosidade dinâmica da água (Norma API Publication 421 – Design and Operation of Oil-Water Separators, 1990):

$$\rho_{\text{óleo}} = -0,7006672727T + 847,0110272727 \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) \quad (4.1)$$

onde T deve ser fornecida em °C.

$$\rho_{\text{água}} = 3 \times 10^{-9} T^3 - 2 \times 10^{-6} T^2 - 0,0001T + 0,9975 \left(\frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \right) \quad (4.2)$$

$$\mu_{\text{água}} = -2 \times 10^{-13} T^5 + 2 \times 10^{-10} T^4 - 5 \times 10^{-8} T^3 - 8 \times 10^{-6} T^2 - 0,0007T + 0,0338 \left(\frac{\text{g}}{\text{cm.s}} \right) \quad (4.3)$$

onde T deve ser fornecida em °F.

Outro papel importante dessa subrotina é a de calcular a quantidade de gotas de óleo que serão criadas a cada passo da simulação para que a porcentagem de concentração pedida seja respeitada.

4.4 - Subrotina GENERATION.FOR

Essa subrotina é responsável pela geração randômica das gotas de óleo a cada passo da simulação. No caso da simulação utilizando uma nuvem de gotas, foi desenvolvido um código computacional para representar um escoamento desenvolvido já no começo do tubo com a geração das gotas em forma de arco, como o perfil de Hagen-Poiseuille. Outro papel importante dessa subrotina é no controle da concentração de óleo na fase contínua. A concentração de óleo dispersa na água é um dado de entrada para simular a nuvem de gotas, assim, com este parâmetro o código cria uma nuvem de gotas inicial tal que a posição destas obedeça ao perfil de velocidade desenvolvido no tubo. Feito isso, as gotas são criadas de tal maneira que concentração de óleo dispersa na região de entrada do tubo se mantenha constante ao longo da simulação.

No caso da simulação de apenas uma gota de óleo, a mesma é gerada na posição $x/D = 0$ e $y/D = 0,01$, para que se possa analisar quantos passos são necessários para que a gota alcance a parte superior do duto. Esses dados são utilizados para determinar o tamanho máximo do duto e a melhor relação entre o número de Reynolds e de Froud e para o experimento numérico.

Além disso, essa subrotina também é responsável por determinar o valor do diâmetro de cada gota de óleo, valor esse que será necessário para o cálculo do volume das mesmas.

4.5 - Subrotina PRINT.FOR

Subrotina responsável por gravar os principais dados gerados a cada avanço de tempo em arquivos de texto. A função CONVERT.FOR, que está alocada dentro dessa subrotina, atua na numeração desses arquivos de saída intitulando-os com o passo atual da simulação.

4.6 - Subrotina VELOCITY_FIELD.FOR

Nessa subrotina são implementadas as equações responsáveis por calcular a velocidade do escoamento da fase contínua através do Perfil de Velocidades de Poiseuille e a velocidade da gota de óleo no meio fluido utilizando a Lei de Stokes. Essas equações foram desenvolvidas respectivamente nas Seções 3.3.1 e 3.3.2. E, através do processo de adimensionalização apresentado no final do capítulo anterior, chega-se nas formas finais das equações que são implementadas nessa subrotina:

A equação de Hagen-Poiseuille:

$$u = 2 \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \quad (4.4)$$

E a equação da Lei de Stokes:

$$V = \frac{\text{Re}}{18\text{Fr}} \left(\frac{\rho_{\text{água}} - \rho_{\text{óleo}}}{\rho_{\text{água}}} \right) d^2 \quad (4.5)$$

4.7 - Subrotina EULER_ADVECTION.FOR

Como o próprio nome sugere, essa subrotina é responsável por modelar o deslocamento advectivo de uma gota de óleo genérica, i , utilizando o método de primeira ordem de Euler, cuja discretização fornece a nova posição da gota de óleo após um incremento de tempo $delt$:

$$poil(i,1) = poil(i,1) + voil(i,1) * delt \quad (4.6)$$

$$poil(i,2) = poil(i,2) + voil(i,2) * delt \quad (4.7)$$

A finalidade principal dessa subrotina é a de calcular, os resultados das duas equações anteriores para que uma nuvem de Z gotas de óleo possa ser advectada.

Aproveitando o processo iterativo de advecção que resulta em novas posições para cada gota dessa nuvem, pode-se encontrar as posições extremas dessa nuvem no eixo horizontal. Essas posições são utilizadas para determinar o domínio das caixas onde haverá o cálculo da coalescência.

4.8 - Subrotina REFLECTION.FOR

Gotas de óleo que eventualmente ultrapassem o limite superior do domínio fluido são refletidas de volta para o limiar desse domínio através da subrotina REFLECTION.FOR. Essa subrotina simula as condições de choque entre as gotas de óleo e a parede do tubo.

4.9 - Subrotina BOUNDARY.FOR

Essa é a primeira de quatro subrotinas que são direcionadas somente para o cálculo da coalescência. A estrutura original para o estudo da coalescência foi desenvolvida por Andrade (2017). A subrotina BOUNDARY.FOR utiliza, pela primeira vez no programa, a variável *LEVEL*, que calcula quantas caixas virtuais serão utilizadas nesse cálculo. Essas caixas virtuais atuam na redução do tempo utilizado no cálculo da coalescência; isto será explicado detalhadamente adiante.

$$N_{caixas} = 2^{(2*LEVEL)} \quad (4.8)$$

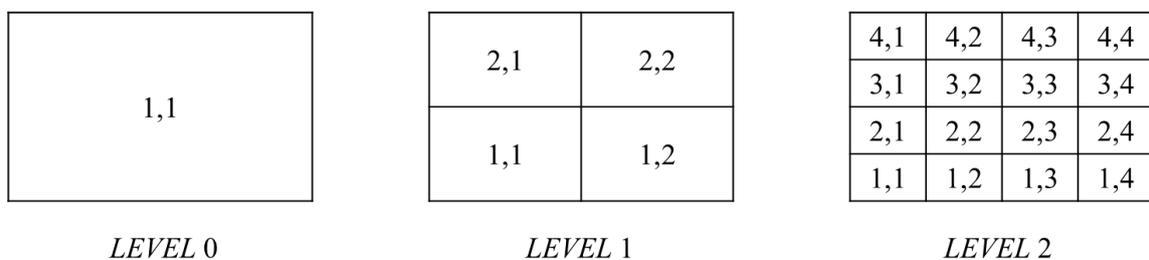


Figura 4.2 – Exemplo de estrutura de caixas para o cálculo da coalescência.

A BOUNDARY.FOR também é responsável por executar as matrizes COUNTER e ZBOX, que são encarregadas, respectivamente, de guardar a posição de cada gota da nuvem em relação à caixa a que ela pertence, e apontar qual caixa (i, j) possui a maior quantidade de gotas. Esse cálculo é realizado para que na próxima subrotina, BOX_STRUCTURE.FOR, já se conheça o tamanho necessário para a alocação dinâmica da matriz BOX.

4.10 - Subrotina BOX_STRUCTURE.FOR

Essa subrotina localiza cada gota da nuvem em relação às caixas virtuais e, utilizando a matriz $COUNTER(i, j)$, faz uma ligação do número de identificação da gota na nuvem (representado por “k”) com o número que ela representa dentro da caixa na qual está, que é o próprio $COUNTER(i, j)$. Com isso, tem-se a matriz $BOX(i, j, COUNTER(i, j)) = k$ exemplificada na Figura 4.3:

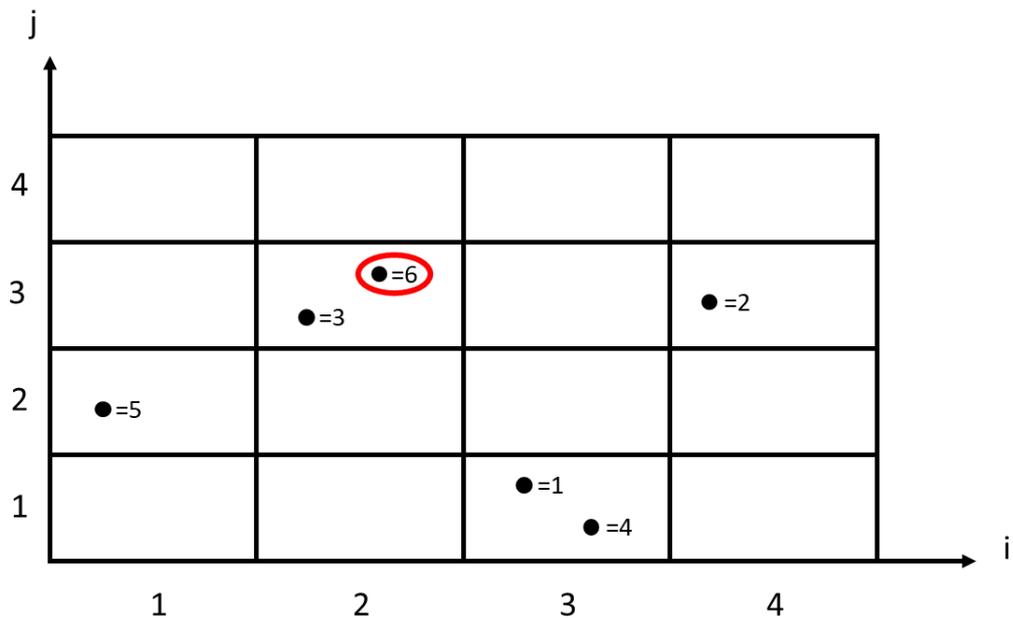


Figura 4.3 – Representação do posicionamento de gotas em uma matriz composta por 16 caixas virtuais (LEVEL 2).

- A sexta gota da nuvem ($k = 6$) está na caixa $(2, 3)$, onde já existe uma gota ($k = 3$); assim, a matriz BOX guarda a posição dessa gota da seguinte maneira: $BOX(2, 3, 2) = 6$. Isso

significa que a gota número 6 na escala global, “*k*”, é a segunda gota ($COUNTER(i, j) = 2$) na caixa (2,3).

4.11 - Subrotina COALESCENCE.FOR

É nessa subrotina que estão os principais cálculos utilizados para a coalescência das gotas de óleo, apresentados na Seção 3.4. O trabalho realizado aqui é de comparar a posição de uma gota da nuvem com todas as outras e calcular se a distância entre elas é suficiente para que coalesçam. Porém, como a quantidade de gotas é quase sempre um número da ordem de 10^3 ou maior, esse trabalho torna-se lento, já que a cada passo da simulação o programa terá que fazer essa checagem das distâncias. Por isso, desenvolveu-se o método das caixas virtuais, que discretizam o domínio em regiões menores para que o cálculo computacional seja menor. Essas caixas virtuais são implementadas na subrotina COALESCENCEBOX.FOR.

4.12 - Subrotina COALESCENCEBOX.FOR

A subrotina COALESCENCEBOX.FOR possui o mesmo algoritmo da subrotina anterior, porém, com a adição do cálculo das caixas virtuais e consequente diminuição do tempo de processamento do programa.

Essa subrotina fixa uma gota de uma caixa virtual qualquer e compara sua posição global com outras gotas, porém, para que essa comparação não seja feita com gotas que estejam muito distantes da gota fixada, o que seria desnecessário já que, devido à distância elas não se coalesceriam, é determinado através do algoritmo um subdomínio onde essa comparação é feita. Esse subdomínio contemplava, inicialmente, as oito caixas virtuais ao redor da caixa fixada e mais as dezesseis caixas que fazem fronteira com essas oito, porém, com o desenvolvimento do trabalho, o tamanho desse subdomínio passou a ser determinado por um algoritmo de varredura dinâmica, que será apresentado na seção 5.3.2.

A Figura 4.4 exemplifica o que foi explicado anteriormente. A caixa fixada é a que está em vermelho e as caixas que formam o domínio estão em amarelo. A gota escolhida, representada pela letra “*k*”, é comparada apenas com as outras gotas que estão no domínio

amarelo e, também, com gotas que estão na sua caixa. Esse procedimento reduz consideravelmente o tempo do cálculo da coalescência, já que o programa não precisa comparar a gota escolhida com todas as gotas da nuvem, o que geraria um cálculo computacional desnecessário.

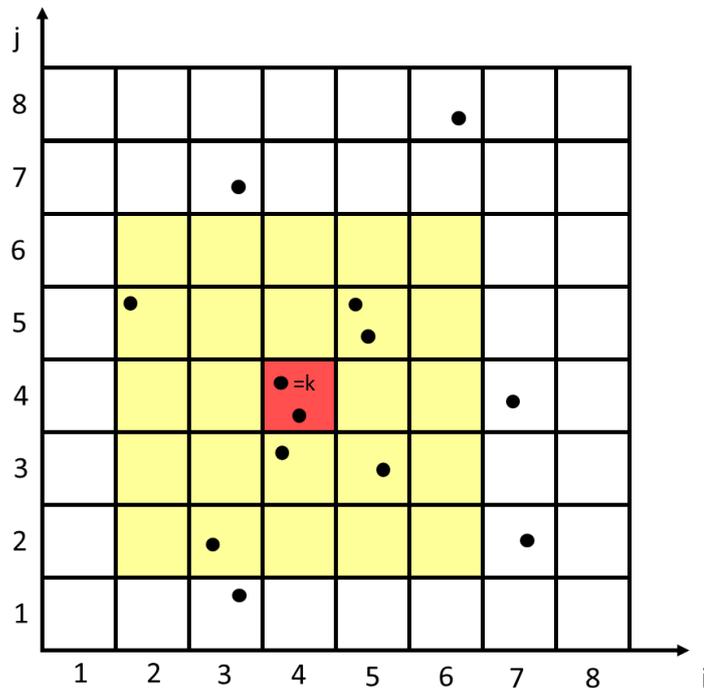


Figura 4.4 – Representação do funcionamento da subrotina COALESCENCEBOX.FOR em uma matriz composta por 64 caixas virtuais (*LEVEL 3*).

Quando a gota fixada coalesce com uma outra gota, sua posição e volume são recalculados e essa gota coalescida precisa ser retirada da simulação para que isso não se repita na próxima iteração. O procedimento de retirada da gota é realizado pela função FLAG, que identifica quando ocorre a coalescência e apaga da nuvem o índice dessa gota.

CAPÍTULO 5

ANÁLISE DE RESULTADOS

5.1 - Introdução

No presente capítulo são apresentados os principais resultados numéricos obtidos utilizando um método de partículas puramente Lagrangeano para o transporte de gotas de óleo dispersas em água; este tipo de escoamento bifásico se desenvolve no interior de um duto de seção circular constante e orientado horizontalmente.

A primeira classe de resultados consiste na análise da trajetória de uma gota de óleo isolada no interior do duto com o propósito de estimar o comprimento máximo horizontal alcançado pela gota de óleo até que ela atinja a parede superior do tubo. Este comprimento máximo corresponde ao comprimento do tubo necessário para que a sedimentação das gotas de óleo aconteça e o óleo possa ser retirado da água naquela região do tubo com um bom rendimento para a eficiência de separação. A gota de óleo é gerada na seção de entrada do tubo, muito próxima da parede inferior. Este tipo de resultado permite que se faça uma aferição para um valor apropriado da relação entre os parâmetros adimensionais número de Reynolds, Re , e número de Froude, Fr , em função do comprimento do duto utilizado na separação das fases. Com os resultados obtidos é possível também estimar o número total de avanços no tempo para um incremento de tempo fixo, Δt , para que a gota alcance a parte superior do tubo.

A segunda classe de resultados consiste na simulação numérico-computacional utilizando o programa desenvolvido em linguagem FORTRAN, veja a Figura 4.1, para movimento em regime permanente de uma nuvem de gotas de óleo dispersas na água. As aferições apresentadas para a situação da trajetória de uma gota de óleo isolada no interior do tubo são utilizadas para a definição de alguns parâmetros iniciais das simulações com a nuvem de gotas. Para comprovar a eficiência da coalescência no quesito tempo de processamento, foram realizadas simulações utilizando algumas concentrações de óleo/água e com a presença, ou não, do fenômeno da coalescência.

Em todos os casos analisados o incremento de tempo foi de $\Delta t = 0,01$, o diâmetro das gotas de óleo igual a $d = 0,001$, o fator de recobrimento igual a $\beta = 0,99$, e as propriedades termodinâmicas da emulsão são adotadas constantes durante toda a simulação numérica, uma vez que não há efeitos de troca de calor.

É importante destacar que, durante esse trabalho, o código computacional passou por várias modificações para que ganhasse generalidade, coerência com os fenômenos físicos e para que fosse otimizado em relação ao tempo de processamento, que é o principal objetivo dessa obra. O programa foi compilado com o *Intel Fortran Compiler for Linux*, em um computador com as seguintes configurações: INTEL CORE I7 - 2.8GHZ (BOX) 8MB CACHE (i7-860), MB INTEL DH55TC, 8GB RAM DDR3 1333 MHZ. Nesta Dissertação de Mestrado não é utilizada nenhuma técnica de processamento paralelo para a aceleração de cálculos.

5.2 - Trajetória de uma Gota de Óleo Isolada

A Figura 5.1 ilustra a situação de uma gota de óleo gerada na seção de entrada do tubo na posição $(x/D, y/D) = (0,0;0,01)$. Pode-se ainda identificar a presença do perfil de Poiseuille, que simula a velocidade da fase contínua, representada pela água.

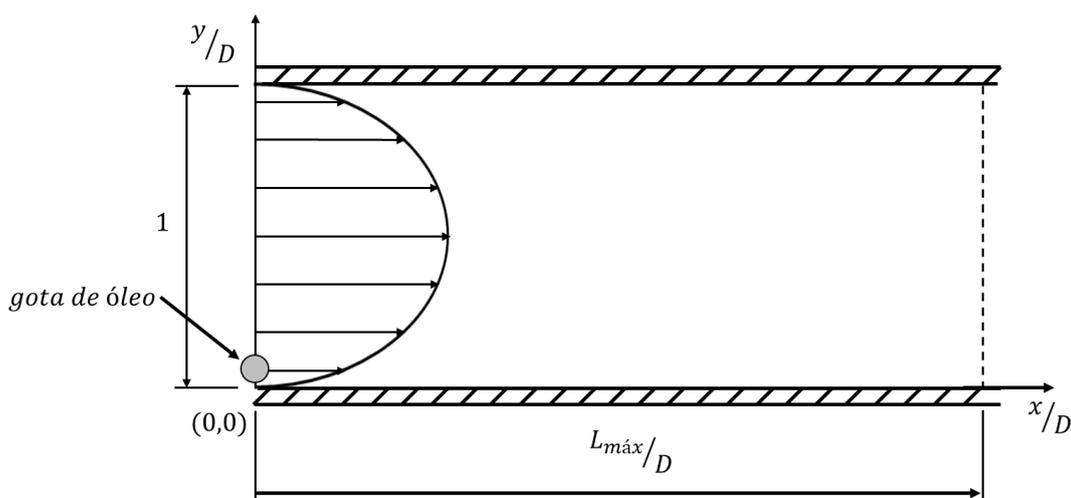


Figura 5.1 – Posição de geração de uma gota de óleo na seção de entrada de um tubo.

Após a realização de testes preliminares para analisar a influência da relação Re/Fr no diâmetro da gota, chegou-se ao valor de $d/D = 0,001$, como já dito anteriormente.

As propriedades termodinâmicas da emulsão foram calculadas a partir das Equações 4.1, 4.2 e 4.3 assumindo a temperatura da emulsão de 18° C. Os experimentos numéricos assumem óleo cru e água potável como as fases que compõem a mistura heterogênea. Estes valores permanecem constantes durante toda a simulação numérica para a obtenção dos resultados deste trabalho.

A Tabela 5.1 apresenta os valores encontrados para o comprimento do tubo em função da relação Re/Fr .

Na primeira coluna da Tabela 5.1 encontra-se os valores da relação Re/Fr variando de 1×10^6 à $10,5 \times 10^6$. Na coluna seguinte, STOP indica o número total de avanços que a gota de óleo foi submetida até que atingisse pela primeira vez a parede superior do tubo. Esta foi a condição de parada do programa desenvolvido para os experimentos numéricos apresentados na Seção 5.2. Assume-se que a trajetória descrita por esta gota de óleo permita que se faça uma boa estimativa da posição final na direção axial no duto, onde o óleo já se encontraria separado da água. Este tipo de resultado é muito importante, porque traz indicativos do número total de avanços no tempo necessário para uma simulação numérica quando uma nuvem de gotas de óleo estiver presente no interior do duto.

A partir desses dados, levando em consideração que, para o projeto de um separador gravitacional, precisa-se alinhar tamanho com eficiência de separação, o valor escolhido para o comprimento do tubo foi de $L_{m\acute{a}x}/D \cong 20$, que resulta na escolha de um valor de $7,5 \times 10^6$ para relação Re/Fr . Esse valor é utilizado nas posteriores simulações com nuvens de gotas, embora outro valor pudesse ser escolhido.

Tabela 5.1 – Testes para obtenção do melhor valor para a relação Re/Fr fixando-se $d/D = 0,001$.

Re/Fr (x10 ⁶)	STOP	L _{máx} /D
1	11745	158,20
1,5	7830	105,47
2	5873	79,10
2,5	4698	63,28
3	3915	52,73
3,5	3356	45,20
4	2937	39,55
4,5	2610	35,16
5	2349	31,64
5,5	2136	28,76
6	1958	26,37
6,5	1807	24,34
7	1678	22,60
7,5	1566	21,09
8	1469	19,78
8,5	1382	18,61
9	1305	17,58
9,5	1237	16,65
10	1175	15,82
10,5	1119	15,07

Para exemplificar os casos investigados na Tabela 5.1, a Figura 5.2 ilustra a trajetória da gota de óleo para $Re/Fr = 7,5 \times 10^6$. Nesta situação foram necessários 1566 avanços no tempo para que a gota de óleo atingisse $L_{máx}/D \cong 21,09$.

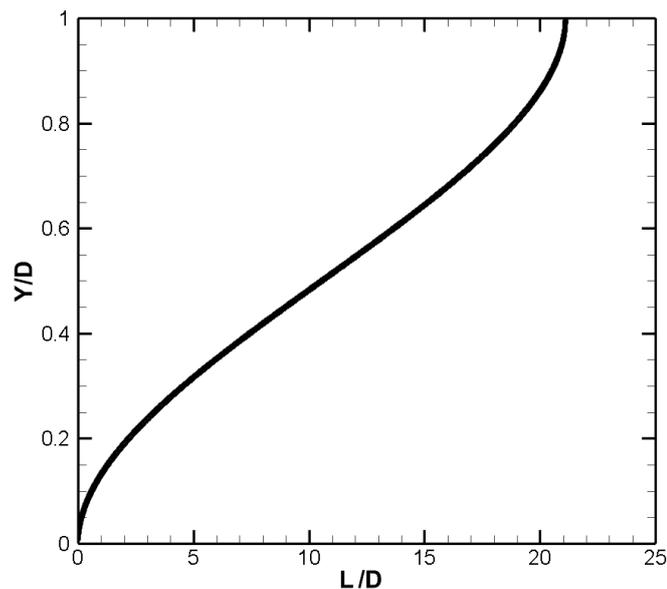


Figura 5.2 – Trajetória da gota de óleo usando o esquema de avanço de primeira ordem de Euler com $d/D = 0,001$.

5.3 - Análise da Coalescência de Gotas de Óleo

Nessa Seção serão apresentadas as etapas desenvolvidas para que o algoritmo ganhasse generalidade e coerência em relação ao fenômeno da coalescência. Primeiramente é implementado o cálculo da concentração de óleo em água para a nuvem de gotas. Após isso, são apresentados os cálculos responsáveis pela definição do valor do *LEVEL* e finalmente, a análise do tempo de processamento para cada tipo de simulação: sem o fenômeno da coalescência, com coalescência, e com a coalescência auxiliada pelas caixas virtuais.

5.3.1 - Cálculo da Concentração de Gotas de Óleo em Água

Com o objetivo de que a concentração de óleo em água seja mensurada em porcentagem, é preciso estipular um volume de tubo pré-definido e saber quantas gotas devem ser geradas nele, por instante de tempo, para que a concentração pedida seja alcançada. Desta maneira, torna-se necessário definir um comprimento L^0/D correspondente à região de entrada do tubo onde essas gotas serão criadas.

Com isso, pode-se definir o volume adimensional de água dentro dessa região como:

$$g_{\text{água}} = \frac{\pi D^2 L^0}{4} \quad (5.1)$$

E juntamente com o volume de uma gota de óleo dado pela Equação (3.16) e o valor da concentração como um dado de entrada, pode-se estipular quantas gotas serão necessárias para que a concentração desejada possa ser alcançada.

$$m = C_{E(O/A)} \frac{g_{\text{água}}}{g_{\text{gota}}} \quad (5.2)$$

onde:

- m é a quantidade de gotas;
- $C_{E(O/A)}$ é a concentração de entrada pedida;

A Figura 5.3 ilustra essa região de entrada do tubo onde ocorre a geração de gotas. Como já explicado na Seção 4.3, as gotas são criadas seguindo o perfil de Hagen-Poiseuille, que é delimitado pelo valor de L^0/D . Os cálculos da conversão de porcentagem de concentração para número de gotas são implementados na subrotina INPUT.FOR.

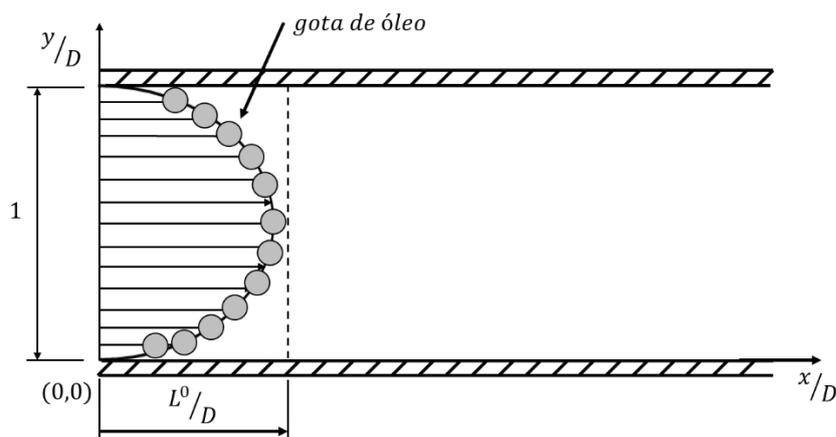


Figura 5.3 – Região na entrada do tubo para definição da concentração.

5.3.2 - Algoritmo de Varredura Dinâmica e Definição do Valor do *LEVEL*

Após uma bateria de testes para a definição da variável *LEVEL*, percebeu-se que havia uma discrepância nas quantidades finais de gotas na nuvem, o que vai de encontro com o que a variável *LEVEL* se propõe a fazer, que é atuar somente na diminuição do tempo de processamento e não diretamente no fenômeno da coalescência. A Tabela 5.2 apresenta os resultados dos testes para uma mesma concentração de óleo em água com o valor do *LEVEL* variando de 2 até 12.

Tabela 5.2 – Variação do número final de gotas de acordo com o valor do *LEVEL*

LEVEL	Ngotas
2	89
3	88
4	112
5	132
6	205
7	370
8	1.005
9	3.550
10	8.025
11	16.554
12	30.168

Analisando esses valores pode-se chegar à conclusão de que quanto maior o valor do *LEVEL*, maior era o número de caixas virtuais e, conseqüentemente, seus tamanhos eram menores, ocasionando em uma perda de informação quando a subrotina COALESCENCEBOX.FOR comparava a distância entre duas gotas. O raio de varredura para busca das gotas estava inicialmente restringido à 2 caixas em cada direção, por isso, se uma gota que possuísse um raio suficientemente grande para coalescer, mas seu centro estivesse fora da área de varredura, ela não seria visualizada pelo algoritmo e, como resultado, não coalesceria tornando o programa fisicamente incorreto.

Assim, implementou-se um algoritmo que calcula essa distância de coalescência de forma dinâmica, pois é função da razão entre o maior e o menor diâmetros das gotas da emulsão naquele passo. A Equação (5.3) estipula qual será a distância radial mínima, em número de caixas, que o algoritmo terá que cobrir caso a menor gota da emulsão coalesça com a maior.

$$n = \text{alfa} \left(\beta \frac{\text{doil}}{\Delta x_{\text{caixa}}} \right) \quad (5.3)$$

onde:

- *alfa* é a razão entre o maior e o menor diâmetros das gotas da emulsão naquele passo;
- *n* é o número de caixas na direção radial;
- *β* é o fator de recobrimento;
- *doil* é o diâmetro da gota que está sendo comparada;
- Δx_{caixa} é a dimensão das caixas que varia de acordo com o *LEVEL*.

A Tabela 5.3 apresenta os resultados dos mesmos testes apresentados na Tabela 5.2, porém, já com a varredura dinâmica implementada no algoritmo do programa. Note que o número final de N_{gotas} mantém uma tendência apesar da variação do *LEVEL*.

De posse dessa análise, começou-se a averiguar qual o melhor valor para a variável *LEVEL* em relação ao tempo de processamento. A Tabela 5.4 apresenta o resultado de simulações para três concentrações distintas, 30%, 60% e 90%, e seus respectivos tempos de processamento para o fenômeno da coalescência.

Tabela 5.3 – Variação do número final de gotas após o ajuste implementado pela varredura dinâmica.

LEVEL	Ngotas
2	2.696
3	3.366
4	3.157
5	3.109
6	3.340
7	3.271
8	3.169
9	3.289
10	3.185
11	3.226
12	2.825

Tabela 5.4 – Tempos de processamento para diferentes concentrações de óleo em água de acordo com o valor do *LEVEL*

LEVEL	Tempo de Coalescência (s)		
	$C_{E(O/A)} = 30\%$	$C_{E(O/A)} = 60\%$	$C_{E(O/A)} = 90\%$
-			
2	89,404	55,061	89,325
3	39,557	36,045	42,223
4	16,068	16,407	18,655
5	7,106	8,572	8,580
6	3,791	3,590	3,765
7	2,308	2,085	2,401
8	1,883	1,904	2,008
9	2,815	3,197	3,432
10	21,137	22,857	21,474
11	130,696	132,932	134,060
12	489,119	522,453	608,587

Analisando a Tabela 5.4 percebe-se que, em todas as três concentrações, o *LEVEL* que apresentou o menor tempo de cálculo foi o 8, por isso, esse é o valor utilizado nas simulações seguintes.

Para valores baixos, o *LEVEL* não faz muita diferença no tempo de processamento pois como o domínio está subdividido em poucas caixas, o algoritmo alcança todas as gotas da

nuvem tendo o mesmo esforço computacional do que nas simulações com a coalescência sem as caixas. No caso de valores altos, a quantidade de caixas se torna muito grande e faz com que o programa perca tempo analisando cada uma delas para encontrar gotas que poderiam coalescer com a gota analisada. Por isso, os valores intermediários tendem a ser um ótimo balanço entre número de caixas e tempo de processamento.

5.3.3 - Análise do Tempo de Processamento do Programa

Como a relação entre o comprimento máximo e o diâmetro da seção do tubo pode atingir valores da ordem de grandeza de até 10^2 no final da simulação numérica, adotou-se a técnica de imprimir apenas a posição das gotas de óleo que se encontram mais à frente no interior do tubo, a partir da seção de entrada. Um comprimento $\text{deltx}/D = 8$ é utilizado em todas as simulações para a seleção das gotas que são impressas nos arquivos instantâneos que armazenam resultados de trajetória da frente da nuvem de gotas; veja a Figura 5.4.

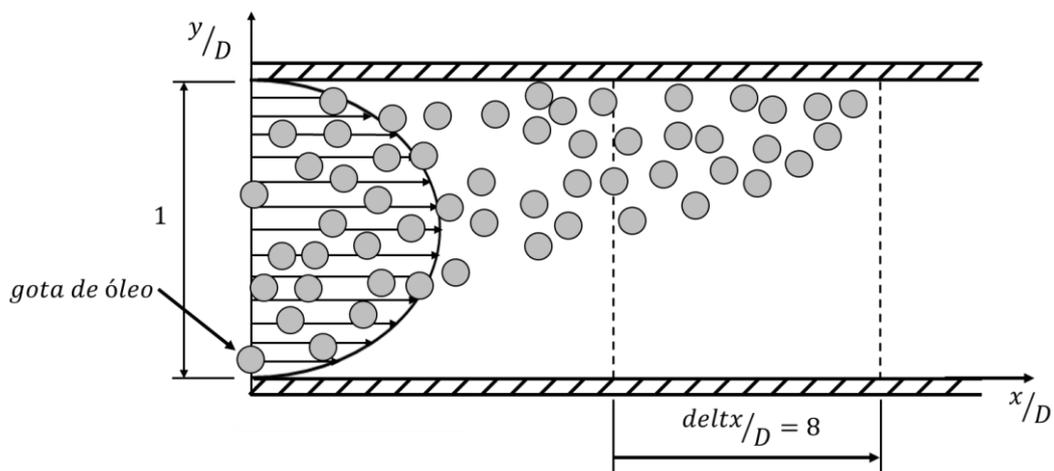


Figura 5.4 – Região na frente do tubo de comprimento deltx usada para a impressão da posição instantânea da nuvem de gotas.

Assim, de posse dos principais parâmetros já definidos e organizados na Tabela 5.5, deu-se início aos testes para a aferição do tempo de processamento para cada tipo de simulação:

sem o fenômeno da coalescência, com coalescência, e com a coalescência auxiliada pelas caixas virtuais.

Tabela 5.5 - Principais parâmetros definidos para as simulações de nuvens de gotas.

d/D	Δt	Re/Fr	LEVEL	β	T	deltx/D	STOP
0,001	0,01	$7,5 \times 10^6$	8	0,99	18°C	8	2000

As tabelas a seguir resumem os casos simulados para a evolução de nuvens de gotas de óleo dispersas na fase água. A Tabela 5.6 apresenta os resultados que não levam em conta a coalescência das gotas, ou seja, as gotas são somente advectadas até o valor de STOP já definido. A Tabela 5.7 se refere aos casos em que há a presença da coalescência das gotas, porém, sem o auxílio das caixas virtuais ($LEVEL = 0$). Por último, na Tabela 5.8, estão os casos simulados para a coalescência de gotas utilizando o artifício computacional das caixas virtuais ($LEVEL = 8$).

Tabela 5.6 – Simulação de uma nuvem de gotas sem a presença do fenômeno da coalescência.

Caso	$C_{E(O/A)}$	Ngotas	Lmax/D	dmax/D	Tempo de Coalescência (s)	Tempo de Processamento (s)
I	0,1%	29.993	21,11527	0,00100	-	25,288
II	30%	8.997.793	21,11658	0,00100	-	7.619,547
III	60%	14.996.270	21,11658	0,00100	-	12.665,952
IV	90%	26.993.378	21,11658	0,00100	-	22.940,916

Tabela 5.7 – Simulação de uma nuvem de gotas com a presença do fenômeno da coalescência ($LEVEL = 0$).

Caso	$C_{E(O/A)}$	Ngotas	Lmax/D	dmax/D	Tempo de Coalescência (s)	Tempo de Processamento (s)
V	0,1%	2.868	21,12409	0,00448	69,653	76,913
VI	30%	2.764	21,13544	0,00935	143,153	155,251
VII	60%	3.016	21,12676	0,01562	193,669	207,967
VIII	90%	2.815	21,12904	0,01876	152,808	166,238

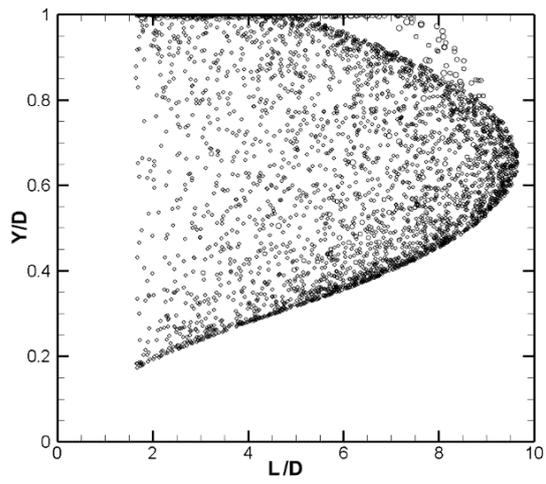
Tabela 5.8 – Simulação de uma nuvem de gotas com a presença do fenômeno da coalescência ($LEVEL = 8$).

Caso	$C_{E(O/A)}$	Ngotas	Lmax/D	dmax/D	Tempo de Coalescência (s)	Tempo de Processamento (s)
IX	0,1%	2.868	21,12409	0,00448	1,179	7,896
X	30%	3.799	21,12917	0,01166	1,888	15,766
XI	60%	3.169	21,12620	0,01730	1,898	15,056
XII	90%	3.335	21,12672	0,01716	2,032	15,462

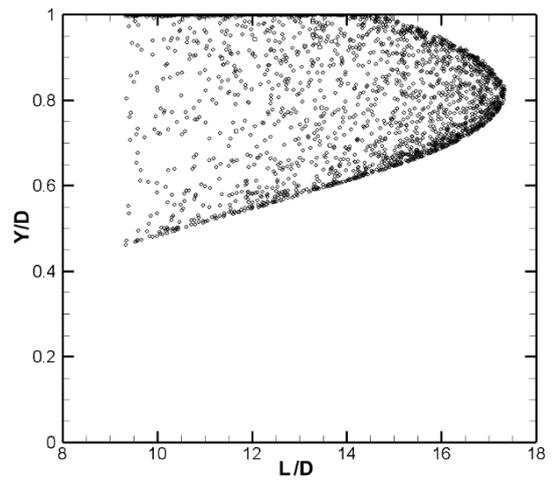
Nas Figuras 5.5 e 5.6 exemplificam-se quatro instantes de tempo da simulação numérica para os casos VIII e XII. Estes instantes mostram o registro temporal da posição das gotas de óleo dispersas na água.

Para a apresentação destes exemplos, visualizam-se as posições da frente da nuvem de gotas de óleo instantâneas após 500, 1000, 1500 e 2000 avanços. Como explicado anteriormente, é impressa apenas a frente da gota de óleo para o comprimento $\frac{\Delta x}{D} = 8$. Esta estratégia é de grande valia quando se deseja simular situações de comprimentos $\frac{L_{\max}}{D}$ com ordem de grandeza 10^2 e número final de gotas com ordem de grandeza 10^6 . O tempo de simulação numérica e o tamanho dos arquivos de saída destes casos será elevado, mas com a metodologia desenvolvida neste trabalho pode-se reduzir ambos sem a perda de informações importantes.

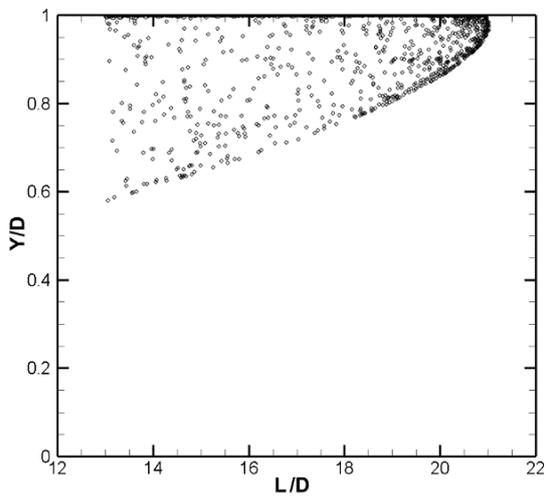
Nas Figuras 5.7 e 5.8 exemplificam-se as curvas de diâmetro de gota máximo para as simulações com coalescência. A importância desses valores se deve ao fato de que gotas de diâmetros maiores melhoram a eficiência da separação, já que a sua velocidade de sedimentação aumenta exponencialmente em função do diâmetro, o que é comprovado através da evolução do gráfico.



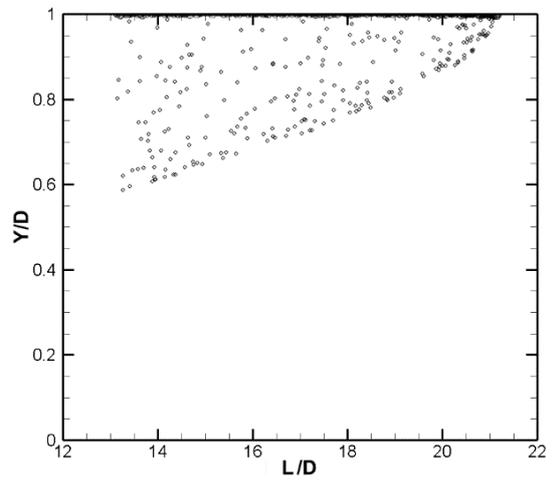
(a) após 500 avanços



(b) após 1000 avanços

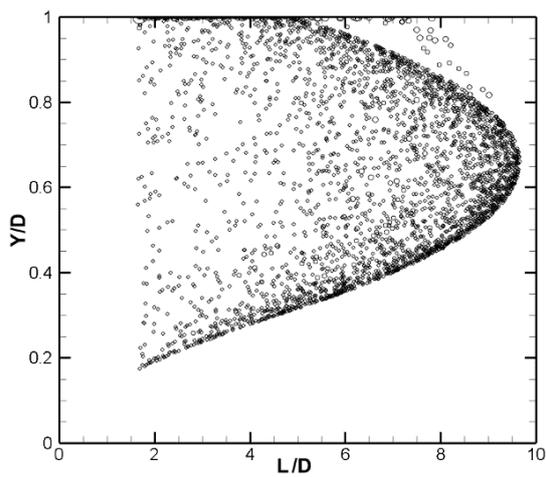


(c) após 1500 avanços

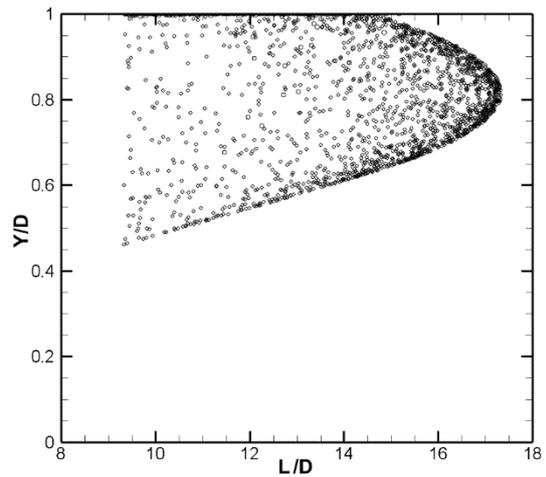


(d) após 2000 avanços

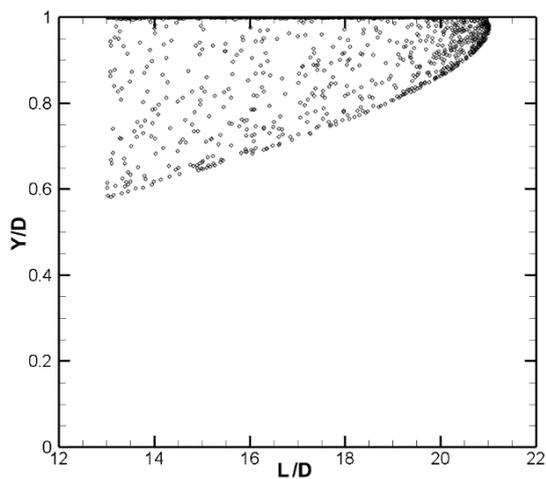
Figura 5.5 – Caso VIII: Evolução da nuvem de gotas de óleo em quatro instantes distintos.



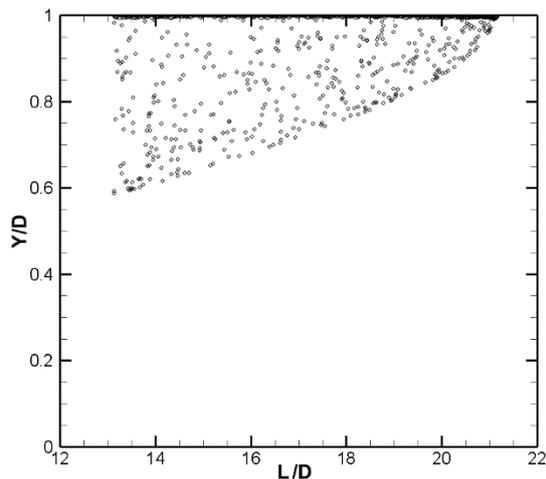
(a) após 500 avanços



(b) após 1000 avanços



(c) após 1500 avanços



(d) após 2000 avanços

Figura 5.6 – Caso XII: Evolução da nuvem de gotas de óleo em quatro instantes distintos.

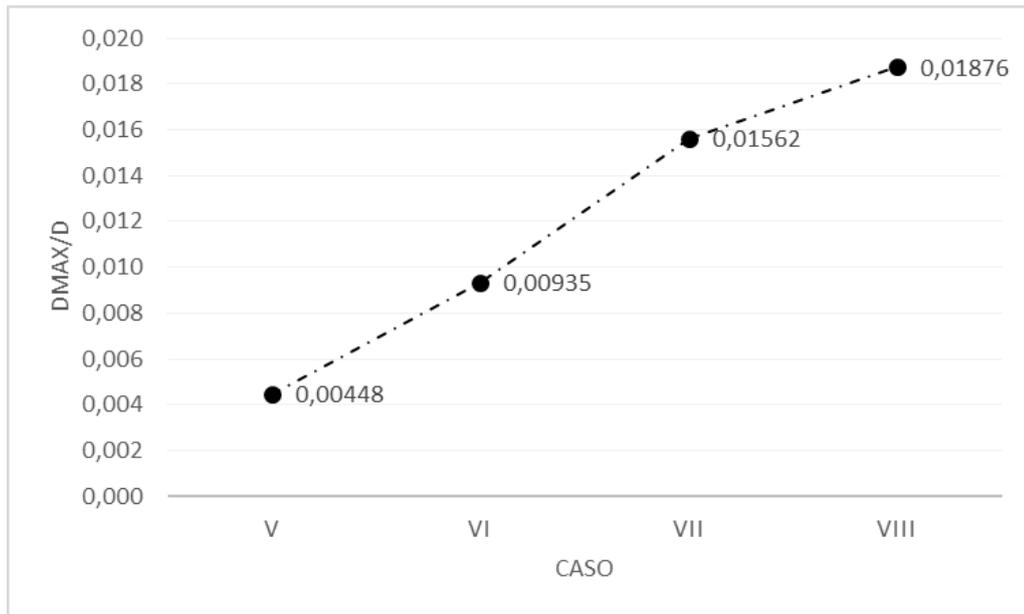


Figura 5.7 – Diâmetro máximo de gota para os casos de V à VIII.

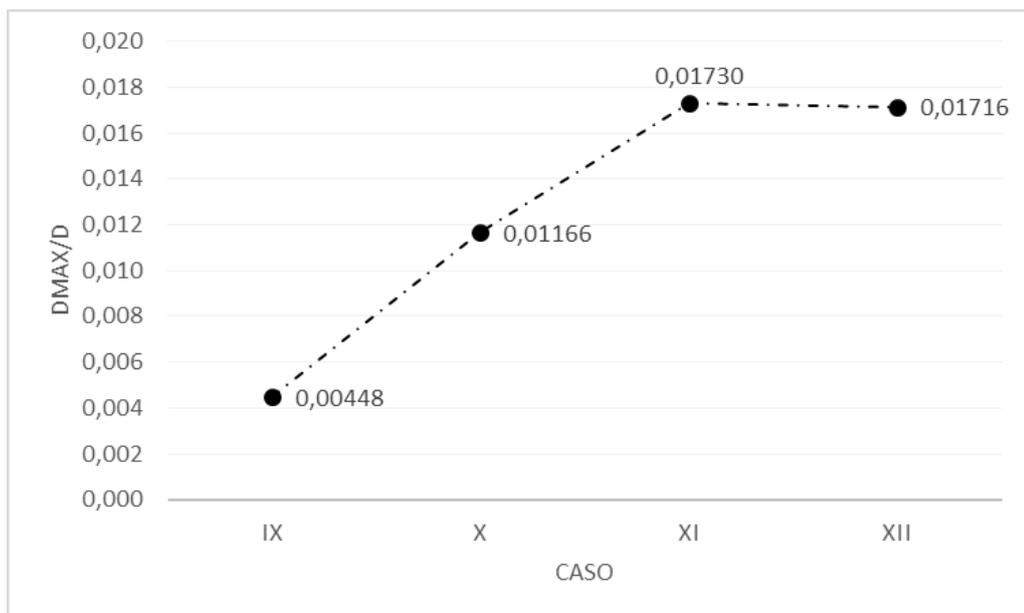


Figura 5.8 – Diâmetro máximo de gota para os casos de IX à XII.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS

6.1 - Conclusões

As emulsões constituem-se em um sistema heterogêneo formado por duas fases (fase contínua e fase dispersa), são termodinamicamente instáveis e para uma mistura entre água e óleo, podem ser classificadas em três tipos: óleo em água (O/A), água em óleo (A/O) e múltiplas ou complexas. O maior desafio na simulação numérica de escoamentos de emulsões é como descrever a interface que separa as duas fases. Neste contexto, a metodologia desenvolvida neste trabalho se constitui na base para estudos que incluam efeitos deste tipo.

Neste trabalho, o problema da análise do escoamento de emulsões é resolvido para a separação das fases óleo e água presentes no interior de um duto numa planta de processamento primário de petróleo. Entre as técnicas disponíveis para a separação das fases considera-se a separação gravitacional. O separador gravitacional utilizado numa planta de processamento primário de petróleo é um equipamento destinado a remover água produzida, não emulsionada, e geralmente fica posicionado imediatamente a jusante do manifold de produção, como primeiro ou segundo equipamento do trem de processamento primário.

A metodologia implementada neste trabalho consiste na geração de gotas de óleo, de diâmetro constante, na entrada de um duto de seção circular para representar certa concentração de óleo em água e, assim, são advectadas por um escoamento considerado lento e que segue o perfil de velocidades de Poiseuille. A velocidade instantânea induzida sobre uma gota de óleo genérica, k , é calculada através da aplicação da Segunda Lei de Newton considerando a situação em regime permanente.

O objetivo inicial deste trabalho foi o de criar um algoritmo que simulasse o fenômeno da coalescência e uma subsequente maneira de discretizar o domínio fluido para aumentar a eficiência desse modelo, principalmente para a redução do tempo final de uma simulação numérica típica. Os casos de I à IV apresentados na Tabela 5.6 não utilizam o fenômeno da

coalescência em seus escoamentos; eles servem apenas como uma base de comparação para com os casos de V à VIII que utilizam a subrotina COALESCENCE.FOR, e com os casos de IX à XII que já possuem uma redução do tempo final de processamento devido a utilização da subrotina COALESCENCEBOX.FOR.

Analisando os casos com o maior valor de concentração (90%), começou-se com o programa base, sem a presença de coalescência. O tempo gasto para calcular a advecção da nuvem de gotas até o STOP, indicado por “Tempo de Processamento (s)”, foi de aproximadamente 6 horas e 22 minutos; para o caso em que coalescência foi implementada esse tempo foi reduzido em 99,28%. Com o auxílio da subrotina COALESCENCEBOX.FOR, o tempo de processamento caiu ainda mais, cerca de 90,7% do valor anterior. A estrutura de caixas criada limitou o domínio de maneira eficiente em sub-regiões e, como isso, o conjunto de gotas que podem se coalescer é determinado de maneira mais rápida. Este cálculo leva, agora, cerca de 15 segundos para o número de caixas utilizadas ($LEVEL = 8$).

Os exemplos apresentados nas Figuras 5.5 (a) e 5.6 (a) mostram que, como o movimento das gotas de óleo na direção axial segue o perfil de velocidades de Poiseuille, a variação no diâmetro das gotas de óleo que coalescem influencia no cálculo da velocidade terminal, fazendo com que elas se sedimentem rapidamente na parte superior do tubo. As Figuras 5.5 (d) e 5.6 (d) indicam que o óleo possui o comportamento de já se encontrar bem separado da água no final da seção do tubo e que esta região pode ser utilizada para a coleta do óleo pela parte superior do tubo.

Já nas Figuras 5.7 e 5.8, estão representadas as curvas de diâmetro de gota máximo alcançado para os casos de V à VIII e de IX à XII, respectivamente. O aumento do diâmetro máximo acompanhando os valores crescentes de concentração comprova a eficiência do mecanismo da coalescência, uma vez que, uma maior concentração de óleo implica em mais gotas na emulsão e, a partir da coalescência dessas gotas, ao final da simulação, existirá gotas de diâmetros cada vez maiores.

De posse dessas análises, pode-se concluir que o programa atingiu o objetivo de simular o fenômeno da coalescência e, também, de principalmente, diminuir o tempo de processamento através da criação das caixas virtuais, sem que isso influenciasse na física da coalescência.

6.2 - Sugestões para Futuros Trabalhos

A metodologia desenvolvida neste trabalho é o ponto de partida para futuras análises envolvendo novos efeitos de interferência no movimento das gotas de óleo. O principal propósito é desenvolver separadores gravitacionais compactos de mistura emulsionada óleo e água.

Um separador gravitacional deve ser compacto, além de apresentar elevada eficiência de separação das fases contidas numa emulsão. No final da seção de testes de um duto e para uma amostra coletada na parte inferior da separação, o rendimento pode ser calculado considerando-se que o produto desejado é a água limpa. Sendo $C_{S(O/A)}$ e $C_{E(O/A)}$ as concentrações de óleo em água na saída e na entrada do duto, respectivamente, a eficiência da separação é calculada pela seguinte expressão:

$$\eta_{\text{inferior}} = 100 \times \left(1 - \frac{C_{S(O/A)}}{C_{E(O/A)}} \right) \quad (6.1)$$

Para que este cálculo possa ser realizado com sucesso são necessários estudos experimentais para a validação dos estudos numéricos. A Figura 6.1 mostra a seção de um tubo localizado no laboratório Núcleo de Separadores Compactos na UNIFEI.

A presente metodologia pode subsidiar projetos futuros para a construção de novas bancadas e, ao mesmo tempo, utilizar dados experimentais para ser validada. Ressalta-se aqui a dificuldade que existe para a realização de testes na bancada experimental, principalmente para a utilização de diferentes combinações de concentrações de óleo em água na seção de entrada do tubo e técnicas para a coleta de amostras de óleo e de água na seção de saída do tubo. Não foram comparados dados experimentais com resultados deste trabalho, uma vez que os estudos experimentais ainda se encontram em fase de análise no laboratório. A grande vantagem da metodologia desenvolvida neste trabalho é que ela se encontra adimensionalizada.



Figura 6.1 – Bancada experimental no laboratório Núcleo de Separadores Compactos na UNIFEI para a separação de óleo e água.

A primeira sugestão para a evolução da presente metodologia é realizar o cálculo da velocidade instantânea induzida sobre uma gota de óleo genérica, k , através da aplicação da Segunda Lei de Newton na seguinte forma:

$$m_k \frac{dV_k}{dt} = \rho_{\text{óleo}} \mathcal{G}_{\text{óleo}} \frac{dV_k}{dt} = \mathbf{F}_{\text{peso}} + \mathbf{F}_{\text{empuxo}} + \mathbf{F}_{\text{massa virtual}} + \mathbf{F}_{\text{arrasto}} + \mathbf{F}_{\text{sustentação}} + \mathbf{F}_{\text{tensão superficial}} \quad (6.2)$$

onde m_k é a massa da gota de óleo, dV_k é o incremento de velocidade que a gota de óleo sofre durante um intervalo de tempo dt , $\rho_{\text{óleo}}$ é a massa específica do óleo, $\mathcal{G}_{\text{óleo}}$ é o volume da gota de óleo (inicialmente assumida como esférica), \mathbf{F}_{peso} é a força de massa (gravidade), $\mathbf{F}_{\text{empuxo}}$ é a força de empuxo, $\mathbf{F}_{\text{massa virtual}}$ é a força correspondente à massa de água extra que a gota de óleo tem que deslocar quando acelera, $\mathbf{F}_{\text{arrasto}}$ é a força de arrasto, $\mathbf{F}_{\text{sustentação}}$ é a força de sustentação e $\mathbf{F}_{\text{tensão superficial}}$ é a força de tensão superficial.

A inclusão da força de tensão superficial permite que seja levada em conta efeito de deformação na interface entre a gota e a água. Este caso se aplica mais precisamente para gotas

de óleo de diâmetro maior; o diâmetro das gotas de óleo aumenta quando ocorre o fenômeno da coalescência.

A taxa de migração lateral, a posição de equilíbrio e a distribuição final das gotas de óleo são as principais características de escoamento multifásico no interior de um duto. Os principais parâmetros que governam este problema são: razão entre viscosidades, razão entre massas específicas, deformabilidade da gota, número de Reynolds e razão entre os diâmetros da gota e do duto. Mudanças nestes parâmetros resultam em novas e diferentes condições de escoamento e, portanto, diferentes taxas de migração e padrões de distribuição de partículas.

Para o estudo da separação das fases óleo e água, estas análises se tornam importantes e esta é a segunda sugestão para a sequência deste trabalho. Gao et al. (2017) estudaram a trajetória de gotas de óleo no interior de um tanque de água considerando-se a presença de várias forças externas atuantes sobre a superfície das partículas. As forças consideradas foram: força de arrasto, força de sustentação, força de massa virtual e a força de empuxo. Os autores verificaram que a força de sustentação pode ser desprezada e que a força de massa virtual não é importante para gotas de óleo de diâmetro menor do que 500 μm . As observações visuais e a modelagem numérica usando um método de partículas Lagrangeno mostraram que as gotas de óleo de diâmetro maior que 300 μm tendem a se separar da pluma de óleo e migrar para a parte superior do tanque. Estas observações servem de subsídios para futuras investigações numéricas utilizando os fundamentos desenvolvidos neste trabalho.

A inclusão na presente metodologia de diferentes efeitos de interferência sobre o comportamento dinâmico das gotas de óleo, tais como, movimento em regime não permanente, deformação da interface, quebra da gota e troca de calor com o ambiente têm como finalidade construir um algoritmo mais apurado e que faça uma previsão bastante confiável do comprimento final do duto para o cálculo da eficiência de separação.

Um separador gravitacional pode ser construído considerando-se configurações diferentes para um conjunto de dutos. Neste trabalho considerou-se um duto de seção circular isolado e que não troca calor com o meio externo. Não há muitos resultados na literatura para solução deste tipo de problema.

Finalmente, o futuro que se vislumbra para a linha de pesquisa Métodos Numéricos Aplicados em Fenômenos de Transporte, que vem sendo desenvolvida no âmbito do Programa

de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica na UNIFEI é: analisar a eficiência da separação das fases óleo e água no interior do duto para diferentes concentrações de óleo em água fornecidas na seção de entrada do duto; considerar o movimento individual de uma gota de óleo para a aferição de parâmetros importantes da simulação numérica antes de realizar as análises considerando-se uma nuvem de gotas de óleo dispersas; analisar a situação na qual a forma da gota de óleo varia durante uma simulação numérica típica e a sua interface se torna deformável.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Amini, S.; Mowla, D.; Golkar, M.; Esmaeilzadeh, F. **“Mathematical modelling of a hydrocyclone for the down-hole oil-water separation (DOWS)”**. Chemical Engineering Research and Design, v. 90, p. 2186-2195; 2012.

Andrade CL. **“Desenvolvimento de um algoritmo acelerador da modelagem de turbulência de um método de vórtices discretos Lagrangeano”**.]. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Itajubá; 2017.

Aoyama S, Hayashi K, Hosokawa S, Lucas D, Tomyama A. **“Lift force acting on single bubbles in linear shear flows”**. Int. J. Multiphase Flow; 96: 113-112; 2017.

Auflem, I. H., **“Influence of Asphaltene Aggregation and Pressure on Crude Oil Emulsion Stability”**. Norwegian University of Science and Technology. Doctor Ingenior Thesis; 2002.

Brakstad OG, Nordtug T, Throne-Holst M.; **“Biodegradation of dispersed macondo oil in seawater at low temperature and different oil droplet sizes”**; Marine Pollution Bulletin; 93 (1-2): 144-152; 2015.

B. Chakrabarty, A.K. Ghoshal, M.K. Purkait; **“Ultrafiltration of stable oil-in-water emulsion by polysulfone membrane”**; Journal of Membrane Science 325; 427–437; 2008.

Chen H, An W, You Y, Lei F, Zhao Y, Li J.; **“Numerical study of underwater fate of oil spilled from deepwater blowout”**; Ocean Engineering; 110 (part A): 227-243, 2015.

Cunha, Roberto E. P. **“Modelagem matemática de separação gravitacional de emulsões de petróleo”**; Dissertação de mestrado em Engenharia de Processos – Universidade Tiradentes de Aracajú-SE; 2017.

Ding L, Shu C, Ding H, Zhao N.; **“Stencil adaptative diffuse interface method for simulation of two-dimensional incompressible multiphase flows”**; Computers & Fluids; 39: 936-944; 2010.

Gao F, Zhao L, Shaffer F, Golshan R, Boufadel M, King T, Robinson B, Lee K.; **“Prediction of oil droplet movement and size distribution: Lagrangian method and vdrop-j model”**; International Oil Spill Conference; Abstract Number 306; 2017.

Geng X, Boufadel MC, Ozgokmen T, King T, Lee K, Lu Y, Zhao L. **“Oil droplets transport due to irregular waves: development of large-scale spreading coefficients”**; Marine Pollution Bulletin; 104 (1): 279-289; 2016.

Hiller W, Kowalewski TA. **“An experimental study of the lateral migration of a droplet in a creeping flow”**. Exp Fluids; 5(1): 43-8; 1986.

Hong, A.; Fane, A.G.; Burford, R., **“The effects of intermittent permeate flow and crossflow on membrane coalescence of oil-in-water emulsions”**. Desalination, v. 144, n. 1-2, p. 185-191; 2002.

Hong, A.; Fane, A.G.; Burford, R., **“Factors affecting membrane coalescence of stable oil-in-water emulsions”**. Journal of Membrane Science, v. 222, p. 19-39; 2003.

Jean-Louis Salager, Maria Isabel Briceño, Carlos Luis Bracho; **“Heavy Hydrocarbon Emulsions. Making use of the State of the Art in Formulation Engineering”** Reprinted Final draft of Chapter 20 (pp 455-495) from Encyclopedic Handbook of Emulsion Technology; 2001.

Jing S, Liyun L, Yeng H. **“Water-lubricated transport of high-viscosity oil in horizontal pipes: the water holdup and pressure gradient”**; Int. J. Multiphase Flow; 96: 70-85; 2017.

Kokal, S., **“Crude Oil Emulsions: A State-of-the-Art Review”**. SPE 77947, SPE Annual Technical Conference and Exhibition. Proceedings. San Antonio, Texas, EUA; 2002.

Korotenko KA, Mamedov RM, Kontar AE, Korotenko LA. **“Particle tracking method in the approach for prediction of oil slick transport in the sea: modeling oil pollution resulting from river input”**; Journal of Marine Systems; 48 (1-4): 159-170; 2004.

Lan H, Khismatullin DB. **“A numerical study of the lateral migration and deformation of drops and leukocytes in a rectangular micro channel”**; Int. J. Multiphase Flow; 47: 73-84; 2012.

Manning FS, Thompson RE. **“Oilfield Processing of Petroleum, vol. 1”** Natural Gas, Published 1991, 408pp.

Monographs on Refinery Environmental Control – Management of Water Discharges: **“Design and Operation of Oil-Water Separators”**; API Publication, First Edition, February; 1990.

Mortazavi S., Tryggvason GA. **“A numerical study of the motion of drops in poiseuille flow”**. Part 1. lateral migration of one drop. J. Fluid Mech 2000; 411: 325-50; 2000.

Oliveira, A.G.; **“Caracterização da Distribuição do Tamanho de Gotas em Emulsões Água e Óleo Utilizando Diferentes Técnicas de Medição”**. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Itajubá; 2010.

Qiao, X.; Zhang, Z.; Yu, J.; Ye, X., **“Performance characteristics of a hybrid membrane pilot-scale plant for oilfield-produced wastewater”**. Desalination, v. 225; 2008.

Ramseur JL; **“Deepwater Horizon Oil Spil: The Fate of the Oil”** Congressional Research Service 2010.

Razi M, Pourghasemi M. **“Direct numerical simulation of deformable droplets motion with uncertain physical properties in macro and micro Channels”**. Computers & Fluids; 154: 200-210; 2017.

Rosa JJ. **“Desenvolvimento de um Novo Processo de Tratamento de Águas Oleosas - Processo FF”** Laboratório de Tecnologia Mineral e Ambiental (LTM)-DEMIN-PPGEM-UFRGS; 2014.

Saidi, M.; Maddahian, R.; Farhanieh, B.; Afshin, H., **“Modeling of flow field and separation efficiency of a deoiling hydrocyclone using large eddy simulation”**. International Journal of Mineral Processing, v. 112-113, p. 84-93; 2012.

Silva, Rosivânia da Paixão. **“Geração e Caracterização Reológica de Emulsões de Água em Óleo Pesado para Aplicações em Projetos de Separadores Gravitacionais.”** Campinas, SP: [s.n.]; 2004.

Sokolovi, R.M.S.; Sokolovi, S.M; Sevic, S., **“Oily water treatment using a new steady-state fiber-bed coalesce”**. Journal of Hazardous Materials, v. 162, n. 1, p. 410-415; 2009.

Stewart, M. & Arnold, K., **“Produced Water Treatment Field Manual.”** Part 1 - Produced Water Treating Systems, p. 1-134; 2011.

Stokes, G. G., **“On the Effect of the Internal Friction of Fluids on the Motion of Pendulums.”** Cambridge Philos. Trans. 9, 8-106; 1851.

Tryggvason GA, Bunner B, Esmaceli A, Juric D, Al-Rawahi N, Tauber W. **“A front-tracking method for the computations of multiphase flow.”** J Comp Phys; 169(2): 708-59; 2001.

Unverdi SO, Tryggvason GA. **“A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows.”** J Comp Phys; 100(1): 25-37; 1992.

Wang Z, DiMarco SF, Socolofsky SA. **“Turbulence measurements in the northern gulf of Mexico: application to the deepwater horizon oil spill on droplet dynamics: deep sea research part I.”** Oceanographic Research Papers; 109: 40-50; 2016.

White, F. M.; **“Mecânica dos Fluidos”**, McGraw-Hill, 4ª edição; 2002.

Zhao L, Shaffer F, Robinson B, King T, D’Ambrose C, Pan Z, Gao F, Miller RS, Conmy RN, Boufadel MC. **“Underwater oil jet: hydrodynamics and droplet size distribution.”** Chemical Engineering Journal; 299: 293-303; 2016.

Zhao L, Boufadel MC, Adams E, Socolofsky SA, King T, Lee K, Nedwed T. **“Simulation of scenarios of oil droplet formation from the deepwater horizon blowout.”** Marine Pollution Bulletin; 101 (1): 304-319; 2015.

Zhou Z, Jin G, Tian B, Ren J. **“Hydrodynamics force and torque models for a particle moving near a wall at finite particle Reynolds numbers.”** Int. J. Multiphase Flow; 92: 1-19; 2017.

Norma API Publication 421; **“Desing and Operation of Oil-Water Separators”**, 1990.