

Thomás Machado Martinoia

Impacto de Operações Transientes na Mistura Interfacial em Polidutos

Dissertação de Mestrado

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

Orientador: Profa. Angela Ourivio Nieckele Co-orientador: Prof. Luis Fernando Gonçalves Pires

Rio de Janeiro Março de 2016



Thomás Machado Martinoia

Impacto de Operações Transientes na Mistura Interfacial em Polidutos

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

> Profa. Angela Ourivio Nieckele Orientadora

Departamento de Engenharia Mecânica - PUC-Rio

Prof. Luis Fernando Gonçalves Pires

Co-orientador SIMDUT – Núcleo de Simulações Termo-hidráulicas de Dutos PUC-Rio

> **Prof. Felipe Bastos de Freitas Rachid** Departamento de Engenharia Mecânica – UFF

> > Profa. Mônica Feijó Naccache

Departamento de Engenharia Mecânica - PUC-Rio

Prof. Márcio da Silveira Carvalho Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico - PUC-Rio

Rio de Janeiro, 31 de março de 2016

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

Thomás Machado Martinoia

Graduou-se em Engenharia Mecânica na Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro em 2011. Cursou Engenharia de Dutos no CCE/PUC-Rio em 2013. Participou de diversos congressos na área de petróleo e gás. É gerente de operações e treinamento no Núcleo de Simulação Termo-hidráulica de Dutos da PUC-Rio.

Ficha Catalográfica

Martinoia, Thomás Machado

Impacto de operações transientes na mistura interfacial em polidutos / Thomás Machado Martinoia ; orientadora: Angela Ourivio Nieckele ; coorientador: Luis Fernando Gonçalves Pires. – 2016. 104 f. : il. (color.) ; 30 cm

Dissertação (mestrado)–Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica, 2016. Inclui bibliografia

1. Engenharia mecânica – Teses. 2. Operação de oleodutos. 3. Interface. 4. Volume de mistura. 5. Dispersão axial. 6. Transiente. I. Nieckele, Angela Ourivio. II. Pires, Luis Fernando Gonçalves. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. IV. Título.

CDD: 621

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 1321770/CA

Dedico esta dissertação à minha família, aos meus colegas de trabalho e estudo na PUC e TRANSPETRO e à comunidade de dutos.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer a todos que me ajudaram a vencer os desafios desta pesquisa, seja no aspecto pessoal ou diretamente profissional.

À minha família pelo apoio incondicional e estímulo para o desenvolvimento acadêmico.

À minha namorada Fernanda Figueira por estar ao meu lado nos momentos mais prazerosos e também nos mais difíceis desta etapa da minha vida.

À minha orientadora Angela Ouvirio Nieckele, que se disponibilizou a orientar esta pesquisa e forneceu apoio imprescindível para o meu entendimento e modelagem do problema.

Aos colegas de trabalho do SIMDUT PUC-Rio, especialmente o meu coorientador Luis Pires e os amigos Leonardo Motta, Claudio Veloso, Philipe Krause, Bruno Amorim e Max Cordeiro que forneceram apoio toda vez que necessitei ao longo deste trabalho.

A Luciana Boher e Souza pela ajuda rápida quando precisei.

A todos os professores que me ensinaram muito ao longo das aulas do mestrado que frequentei.

Aos professores que se disponibilizaram para ser parte da comissão examinadora.

A toda equipe do departamento de engenharia mecânica da PUC.

Resumo

Martinoia, Thomás Machado; Nieckele, Angela Ouvirio Impacto de operações transientes na mistura interfacial em polidutos. Rio de Janeiro, 2016. 104p. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

O transporte de diferentes produtos através de um oleoduto (poliduto) é muito utilizado em todo o mundo, pois garante ao processo eficiência operacional e econômica. Porém, possui como efeito colateral a produção de uma mistura interfacial dos produtos, que pode levar à perda de qualidade destes devido à contaminação. Geralmente, o problema é formulado considerando escoamento com vazão constante no tempo enquanto a interface atravessa o comprimento do oleoduto. Apesar desta simplificação ser efetiva para muitos casos, transientes são muito comuns em operações reais de oleodutos. Este trabalho visa analisar a influência do comportamento transiente de polidutos no comprimento da região de mistura. Uma formulação difusiva é empregada, a qual depende do coeficiente de dispersão axial. Uma análise criteriosa é realizada das diversas correlações disponíveis para este coeficiente, mostrando ser fundamental considerar a dependência deste com o número de Reynolds e de Schmidt. O modelo matemático é discretizado pelo método de volumes finitos com aproximações de segunda ordem espacial e temporal. A metodologia foi validada para condições de escoamento com vazão constante, e aplicada a situações operacionais transiente, as quais foram comparadas com dados de campo de polidutos reais. O modelo fornece excelente previsão do comprimento da região de mistura em operações com vazão variável ou com paradas de curta duração. Incerteza maior é obtida no caso de paradas longas, somente se a interface se encontrar em regiões inclinadas.

Palavras-chave

Operação de oleodutos; interface; volume de mistura; dispersão axial; transiente.

Abstract

Martinoia, Thomás Machado; Nieckele, Angela Ouvirio (Advisor) **Pipeline operation impact on interfacial mixing volumes**. Rio de Janeiro, 2016. 104p. MSc. Dissertation - Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

The transport of different products through a pipeline is widely used around the world as it ensures to the process operational and economic efficiency. However, it has as a side effect of creating an interfacial product mixture, which can lead to loss of quality due to contamination. Typically, the problem is analyzed considering constant flow rate over time while the interface travels along the pipeline length. Although this simplification is effective for several cases, transient operations are very common in practice. Therefore, this work analyzes the influence of transient operations on the mixture region length. A diffusive formulation is employed, based on an axial dispersion coefficient. A careful analysis of several correlations available for the axial dispersion coefficient is performed, showing the fundamental importance of considering its dependence to the Reynolds and Schmidt number. The mathematical model is discretized by the finite volume method with second order approximations on both time and space domains. The methodology is validated for constant flow rate and employed to transient operation situations, being compared to field data of real pipelines. The model offers excellent prediction of the mixture region length for operations with transient flow rates and pumping shut-down conditions of short duration. A higher uncertainty is obtained in the case of long lasting shut-downs if the interface stops on leaning regions of the pipeline.

Keywords

Pipeline operation; interface; mixing volume; axial dispersion; transient.

Sumário

1 Introdução	20	
1.1 Objetivo	25	
1.2 Organização da Dissertação	25	
2 Revisão Bibliográfica	26	
3 Modelo Matemático	30	
3.1 Equacionamento	30	
3.2 Condições de Contorno e Inicial	34	
3.3 Distribuição de Concentração para uma Interface com		
Velocidade Constante	35	
4 Coeficiente de Dispersão Axial	38	
4.1 Modelo de Taylor (1953, 1954)	39	
4.2 Correlação de Levenspiel (1958)	42	
4.3 Correlação de Austin e Palfrey (1964)	44	
4.4 Correlação de Krantz e Wasan (1974)	46	
4.5 Modelos "Scraper wash-off" de Udoetok e Nguyen (2009) e		
Patrachari (2012)		
4.6 Correlação Teórica de Patrachari (2012)		
4.7 Avaliação das Correlações para Diferentes Regimes de		
Escoamento 57		
5 Método Numérico	66	
6 Validação	71	
6.1 Validação do método numérico para escoamento com		
velocidade constante	71	
6.2 Escoamento com Velocidade Constante	72	

6.3	Escoamento com Partida e Parada	73
7	Comparação com Dados de Campo	78
7.1	Metodologia de Tratamento de Dados de Campo	79
7.2	Dados de Campo para Escoamento de Velocidade	
Apro	oximadamente Constante	81
7.3	Operação com 1 Parada de Curta Duração	85
7.4	Operação com 1 Parada de Longa Duração	89
7.5	Operação com 2 Paradas de Longa Duração	92
7.6	Operação com Vazão Variável sem Paradas	96
8	Conclusões e Sugestões	100
Referências bibliográficas 102		

Lista de Figuras

Figura 1.1 – Fluxograma esquemático de poliduto transportando	
bateladas (Traduzida de Gomes, Rachid, Araujo, 2002)	21
Figura 1.2 – Crescimento da região de mistura em um oleoduto	21
Figura 1.3 – Comprimento de mistura e linhas de corte	22
Figura 3.1 – Ordem de grandeza dos comprimentos envolvidos e referenciais	33
Figura 3.2 – Condição inicial – Interface degrau	35
Figura 4.1 – Valores de $F(r/R)$ assumidos por Taylor para o perfil de velocidade turbulento	41
Figura 4.2 – Desempenho da equação de Taylor para dispersão turbulenta (Adaptado de Patrachari, 2012)	42
Figura 4.3 – Coeficiente de dispersão axial em função do número de Reynolds (Levenspiel, 1958)	44
Figura 4.4 – Comprimento adimensional da região de mistura por Número de Reynolds para dutos de 2" e 8". Adaptado de Austin e Palfrey (1964)	45
Figura 4.5 – Correlação entre coeficiente de dispersão e número de Reynolds para diferentes diâmetros. Austin e Palfrey (1964)	45
Figura 4.6 – Coeficiente de dispersão axial em função do número de Reynolds (Krantz e Wasan, 1974)	47
Figura 4.7 – Perfil de velocidade turbulento (A) e mistura atrás de <i>pig</i> de disco imaginário (B) (Udoetok e Nguyen, 2009)	49
Figura 4.8 – Comparação entre k experimental e previsto pela equação 68 (Patrachari, 2012)	52

Figura 4.9 – Perfis de contribuição para a tensão cisalhante dos efeitos viscosos e turbulentos (adaptado de Pope, 2000)	53
Figura 4.10 – Contribuições viscosas e turbulentas ao coeficiente de dispersão axial efetivo adimensional (adaptado de Patrachari, 2012)	57
Figura 4.11 – Correlações de Taylor, Austin & Palfrey (d=8") e Udoetok & Nguyen para o coeficiente de dispersão axial na região turbulenta	63
Figura 4.12 – Correlações de Levenspiel, Krantz e Wasan e Patrachari para o coeficiente de dispersão axial com Schmidt = 100	63
Figura 4.13 – Correlações de Krantz e Patrachari para o coeficiente de dispersão axial com Schmidt = 1000.	64
Figura 4.14 – Correlação de Krantz e Wasan para o coeficiente de dispersão axial com Schmidt = 100 e 1000.	64
Figura 4.15 – Correlação de Patrachari para o coeficiente de dispersão axial com Schmidt = 100, 1000 e 5000.	65
Figura 5.1 – Esquema da malha aplicada ao problema	66
Figura 5.2 – Distância adimensional ao centro para cada ponto da malha	68
Figura 6.1 – Comparação da distribuição da concentração ao longo do comprimento adimensional obtida numericamente e a solução analítica	73
Figura 6.2 – Volume de mistura em função da concentração admissível para caso com velocidade constante. Numérico x Analítico	73
Figura 6.3 – Vazão em função do tempo para caso com 3 paradas.	74
Figura 6.4 – Velocidade ao longo de $ au$ para simulação de 3 paradas	75
Figura 6.5 – Coeficiente de dispersão adimensional ao longo de $ au$ para o caso de 3 paradas.	76
Figura 6.6 – Velocidade ao longo de $ au$ para o caso de 3 paradas.	76
Figura 6.7 – Comprimento adimensional de mistura ao longo de $ au$ para simulação de 3 paradas.	77

Figura 7.1 – Perfil de elevação do oleoduto.	78
Figura 7.2 – Série de dados de campo de massa específica em função do tempo	80
Figura 7.3 – Dados de campo para a massa específica em função do tempo	82
Figura 7.4 – Concentração ao longo do comprimento adimensional para escoamento de velocidade constante (<i>KS</i> por correlação Taylor 1954)	83
Figura 7.5 – Comprimento adimensional de mistura em função de $ au$ para escoamento de velocidade constante	84
Figura 7.6 – Concentração ao longo do comprimento adimensional para escoamento de velocidade constante (<i>KS</i> por correlação Krantz e Wasan 1974)	85
Figura 7.7 – Vazão de campo ao longo do tempo – 1 parada de curta duração	86
Figura 7.8 – Velocidade ao longo de $ au$ – 1 parada de curta duração	86
Figura 7.9 – Concentração ao longo de <i>y</i> com 1 parada de curta duração e vazão constante – Correlação Patrachari (2012)	87
Figura 7.10 – Comprimento adimensional de mistura ao longo de $ au$ com 1 parada de curta duração – Correlação Patrachari (2012)	87
Figura 7.11 Concentração ao longo de <i>y</i> com 1 parada rápida. Correlação de Levenspiel e de Krantz e Wasan	89
Figura 7.12 – Vazão de campo ao longo do tempo – 1 parada longa	90
Figura 7.13 – Velocidade ao longo de $ au$ – 1 parada longa	90
Figura 7.14 – Concentração ao longo de <i>y</i> com 1 parada longa e vazão constante	91
Figura 7.15 – Comprimento adimensional de mistura ao longo de $ au$ para simulação com 1 parada longa	92

Figura 7.16 – Vazão de campo ao longo do tempo – 2 paradas longas

Figura 7.17 – Velocidade ao longo de $ au$ – 2 paradas longas	93
Figura 7.18 – Concentração ao longo de y com 2 paradas longa	94
Figura 7.19 – Comprimento adimensional de mistura ao longo de $ au$ com 2 paradas longas	94
Figura 7.20 – Perfil de elevação e locais de parada longas do centro da interface – paradas longas: Caso 1 e Caso 2.	96
Figura 7.21 – Vazão de campo ao longo do tempo – vazão variável	97
Figura 7.22 – Velocidade ao longo de $ au$ – vazão variável.	97
Figura 7.23 – Concentração ao longo de y com vazão variável	98
Figura 7.24 – Comprimento adimensional de mistura ao longo de $ au$	
com vazão variável	98

93

Lista de Tabelas

Tabela 4.1 – Coeficientes da equação para o cálculo do coeficiente de dispersão	47
Tabela 4.2 – Coeficientes da equação para o cálculo do coeficiente de dispersão na região de transição	48
Tabela 4.3 – Correlações para o coeficiente de dispersão axial implementadas por regime de escoamento	59
Tabela 4.4 – Pesos moleculares médios adotados	62
Tabela 5.1 – Teste de malha para volume de mistura (m ³)	68
Tabela 6.1 – Propriedades dos Produtos	72
Tabela 7.1 – Propriedades dos Produtos. Caso com Velocidade Constante	81
Tabela 7.2 – Comprimentos operacionais de mistura: real e calculado com correlação de Taylor (1954)	84
Tabela 7.3 – Propriedades dos Produtos. Caso com 1 Parada Rápida	85
Tabela 7.4 – Comprimentos operacionais de mistura para 1 parada de curta duração	88
Tabela 7.5 – Propriedades dos Produtos. Caso com 1 Parada Longa	90
Tabela 7.6 – Comprimentos operacionais de mistura para 1 parada Ionga	91
Tabela 7.7– Propriedades dos Produtos – Caso com 2 Parada Longas	92
Tabela 7.8 – Comprimentos operacionais de mistura para 2 paradas longas.	95
Tabela 7.9 – Propriedades dos Produtos. Vazão Variável	96

Tabela 7.10 – Comprimentos operacionais de mistura: real ecalculados com correlação de Patrachari - caso 7.6

99

Nomenclatura

Α	área da secção transversal do duto
a_{δ}	contribuição viscosa à dispersão efetiva
A_{δ}	área da secção transversal ocupada pela região viscosa
С	concentração do produto "1" no produto "0"
C _{corte,i}	concentração admissível do produto i na mistura
d	diâmetro do duto
D	coeficiente de difusão molecular
f	fator de atrito de Fanning
k	expoente para o modelo Scraper wash-off
К, К _Е	coeficiente de dispersão efetivo
K _L	coeficiente de dispersão adimensional por comprimento do duto
K _S	coeficiente de dispersão adimensional por diâmetro do duto
K_T	coeficiente de dispersão turbulento
K_V	coeficiente de dispersão viscoso
L	comprimento do duto
Lop	comprimento operacional de mistura baseado nas concentrações de
	campo
M_{mol}	massa molecular
n _u	expoente no perfil de velocidade de lei de potência de Prandtl
Q	vazão
r	distância radial
R	raio do duto
Re	número de Reynolds baseado no diâmetro do duto
Re _c	número de Reynolds crítico para o modelo de Austin e Palfrey

Re _{leve}	número de Reynolds com as propriedades do líquido mais leve
S	comprimento de mistura ou comprimento contaminado
Sc	número de Schmidt
S_y	comprimento de mistura adimensional em função de L
t	tempo, tempo de residência da interface no duto
th	espessura de parede do duto
t _t	tempo de residência da interface no duto
и	velocidade local no raio r
\overline{U}	velocidade média na secção transversal
u _o	velocidade máxima ou velocidade no centro do duto
u_{δ}	velocidade na fronteira da região viscosa
$u_{\delta,corr}$	velocidade corrigida na fronteira da região viscosa
$u_{ au}$	velocidade de atrito
V	volume do plug de mistura
V_{An}	volume anular ocupado pena subcamada viscosa
\forall_{mol}	volume molecular
\checkmark	volume da região de mistura
x	distância longitudinal
x_m	posição do centro da interface ao longo do comprimento
У	distância adimensional ao centro da interface
<i>y</i> ⁺	distância adimensional da parede
Ζ	função de Reynolds na curva ajustada Levenspiel
$Z(p_i)$	função da concentração na extremidade da interface

Letras Gregas

α	coeficiente linear de Reynolds para coeficiente de dispersão axial
β	expoente de Reynolds para coeficiente de dispersão axial
δ	espessura da região viscosa

- δ_{v} espessura da subcamada viscosa
- *ɛ* rugosidade
- ΔP queda de pressão ou perda de carga
- ν viscosidade cinemática
- μ viscosidade dinâmica
- ho massa específica
- au comprimento desenvolvido adimensional
- au_w tensão de cisalhamento na parede
- ω expoente de Reynolds na curva ajustada para Levenspiel

"The secret of getting started is breaking your complex, overwhelming tasks into small manageable tasks, and then starting on the first one." –

Mark Twain

1 Introdução

Oleodutos são o principal meio de transporte para petróleo e combustíveis no Brasil. Apenas a Transpetro, operadora estadual da maior malha de oleodutos brasileira, transportou 800 milhões de m³ de petróleo, derivados e etanol em 2013. A malha de oleodutos operada pela Transpetro no Brasil conta com mais de 7,500 km de extensão, que ligam 21 terminais terrestres e 28 terminais aquaviários em 2015. Estes números são ainda maiores em países desenvolvidos como os Estados Unidos, por exemplo que conta com uma malha de mais de 300,000km para produtos refinados. O modal de dutos está estabelecido no mundo todo com excelente custo benefício, eficiência e segurança reconhecidos pela indústria de óleo e gás.

Oleodutos que transportam mais de um produto são comuns no Brasil e no mundo todo e usualmente recebem o nome de polidutos. No Brasil, existem mais de 30 oleodutos que transportam produtos diferentes num mesmo sistema. Estes oleodutos possuem dimensões e características variadas, abrangendo desde diâmetros relativamente pequenos (8" – 10") até diâmetros maiores (20" – 24") e extensões que variam de menos de 1km a mais de 300km.

O transporte de produtos em bateladas é uma prática comum e que garante aos polidutos eficiência e preço. Este consiste no transporte sequencial de diferentes produtos ou de diferentes qualidades de um mesmo produto em um mesmo oleoduto sem qualquer tipo de separação física. Bateladas tipicamente têm volumes da ordem de 5,000 m³ e são organizadas conforme a demanda de mercado pela logística. Apesar do transporte em bateladas oferecer à indústria a possibilidade de movimentação de diversos produtos por um mesmo oleoduto, conferindo preço e agilidade nas entregas, este também provoca um efeito colateral que é a perda de produto ou de qualidade de produto devido a contaminação por mistura na região de interface. Uma vez contaminado, um produto pode ser misturado naquele de qualidade inferior quando possível, ou retornar ao processo de refino. A Figura 1.1 apresenta fluxograma esquemático de um poliduto transportando os produtos A e B e a região da mistura formada entre as bateladas desses produtos. No esquema ilustrado, pode-se observar que inicialmente, o produto A foi introduzido na tubulação. No instante ilustrado, a válvula de entrada do produto A encontra-se desligada e o produto B está sendo introduzindo na tubulação. Uma região de mistura é criada e no recebimento três tanques são utilizados para separar os produtos A e B e o produto gerado pela mistura dos dois.



Figura 1.1 – Fluxograma esquemático de poliduto transportando bateladas (Traduzida de Gomes, Rachid, Araujo, 2002)

Combustíveis possuem especificações bem delimitadas pelas agências reguladoras devido à natureza de sua função e ao funcionamento dos motores em que serão aplicados. Isso torna a manutenção dos produtos dentro de especificação uma preocupação primordial para o transportador dos combustíveis.

A Figura 1.2 apresenta um desenho esquemático onde um oleoduto cheio de produto A recebe o produto B, formando a região de mistura na interface entre os dois produtos e esta região aumenta conforme a interface é deslocada no oleoduto. O comprimento percorrido pela região da interface L2 no esquema da direita é maior que o L1 da esquerda.





Próximo aos tanques de envio, esta região é mínima e tipicamente causada pela manobra de troca de tanques que exige que a válvula de envio do produto original (A) que estava sendo enviado ao oleoduto permaneça aberta até que a válvula do tanque do próximo produto (B) esteja completamente aberta. O tempo de abertura e fechamento dessas válvulas é geralmente da ordem de 1 minuto. Conforme a estação de envio bombeia o produto B para o oleoduto, a região de mistura percorre o comprimento do oleoduto, aumentando de tamanho gradualmente devido à dispersão entre os produtos A e B, e atinge seu tamanho máximo no recebimento quando os produtos são destinados aos respectivos tanques de recebimento.

A Figura 1.3 ilustra esquematicamente, um poliduto com diversas trocas de produto. A linha continua em vermelho representa a concentração do produto A no fluido, sendo 0 na linha inferior e 1 na linha superior. As linhas pontilhadas são chamadas linha de corte e estão localizadas na concentração máxima admissível do produto A no B na parte inferior e na diferença de 1 menos a concentração máxima de B no A na parte superior. Observa-se que devido a mistura de diferentes produtos, ocorre uma perda de produto puro, resultando em um volume final menor do que o inicial. O comprimento da região de mistura é definido como o comprimento de tubulação onde a concentração dos produtos encontra-se dentro das linhas de corte. A região "c" indicada na figura indica a região onde o produto B encontra-se fora das especificações e a região "d" corresponde ao produto A.



Figura 1.3 – Comprimento de mistura e linhas de corte

O volume da região de mistura \forall pode ser obtido pelo produto da área transversal do duto A_d pelo comprimento de mistura (*S*), $\forall = A_d S$. A medida do comprimento da interface depende do conhecimento da posição de suas extremidades. Num procedimento operacional normal, estes valores são obtidos indiretamente pelo histórico de um densímetro, geralmente localizado nos extremos do duto. Teoricamente, o início da interface é definido quando ocorre variação na medida do densímetro. Quando a resposta do densímetro volta a ficar

constante, igual à densidade do outro produto, considera-se que o fim da interface foi obtido.

Na prática, esses dois extremos são impossíveis de serem determinados com certeza absoluta. Existem variações nas densidades dos produtos com a pressão e temperatura, além de erros associados aos instrumentos, tanto densímetros quando sensores de vazão. Assim, deve-se considerar que existirá uma linha de corte da interface, que será função da concentração máxima permitida de um produto no outro e dessas incertezas. O comprimento da região de mistura, representado esquematicamente na Figura 1.3, será calculado pela soma dos valores *c* e *d*,onde:

- c é o comprimento de mistura de uma interface que será retirado do produto B;
- d é o comprimento da mistura de uma interface que será retirado do produto A.

Cada batelada transportada ao longo de um poliduto formará duas regiões de interface, uma a montante e outra a jusante.

De acordo com o modelo desenvolvido por Taylor (1954) e amplamente utilizado, o volume contaminado (ou comprimento de mistura) pode ser estimado como sendo diretamente proporcional à raiz quadrada do comprimento de duto percorrido pela interface dos produtos.

Diferentes técnicas foram utilizadas pela indústria para tentar diminuir a extensão da região de mistura, como por exemplo utilizar separadores físicos entre os produtos. Contudo, estas técnicas não demonstraram eficiência em seu objetivo suficientes para superar as tarefas e custos adicionais que provocam.

Na região de mistura, os produtos se misturam basicamente devido à ação da turbulência, do perfil de velocidade do escoamento e da difusividade molecular entre os dois produtos ao longo do comprimento percorrido. Em tubulações inclinadas, o efeito da gravidade sobre produtos de massas específicas diferentes também pode influenciar na mistura dos produtos. A região de mistura, comumente chamada de *Transmix* pela indústria de polidutos, cresce ao longo do oleoduto, à medida que é transportada ao longo do comprimento deste.

O problema da contaminação de produtos na região de interface entre bateladas tem sido uma preocupação da indústria desde o início da operação dos primeiros polidutos, devido às especificações rígidas para cada tipo de combustível como gasolina, diesel e etanol. Mais recentemente, novas regulamentações ambientais que determinam a produção de combustíveis com menor nível de enxofre trouxeram esta preocupação à tona novamente. Por exemplo, um poliduto que transporta diesel S10 (teor de enxofre máximo de 500 mg/kg) e S500 (teor de enxofre máximo de 500 mg/kg) deve ser operado da tal forma que o produto de menor qualidade não contamine o outro, causando assim prejuízos.

A mistura de produtos na região da interface é um fenômeno com consequências econômicas diretas para as companhias transportadoras de combustíveis e influencia desde o projeto à operação de oleodutos. Parâmetros como as dimensões de um duto, vazões dos produtos, regimes de escoamento e os tempos de trânsito de válvulas são de grande importância e operadores e projetistas precisam saber o efeito destes parâmetros no volume de mistura final. Um projeto mal elaborado ou operação indevida pode vir a acrescentar custos de perda de produto ou perda de valor agregado de produtos aos custos normais de operação, o que aumentaria a tarifa de transporte e consequentemente o preço dos combustíveis. Assim, é importante estimar e minimizar os volumes de mistura decorrentes da operação de polidutos.

Uma região de mistura pode percorrer o comprimento do duto de inúmeras maneiras, dependendo da programação do oleoduto. Por exemplo, esta pode ser transportada sob vazão constante, sob vazões diferentes em uma sucessão de regimes permanentes, pode sofrer transientes de partida e parada, pode permanecer parada por um determinado tempo e outras condições operacionais.

O transiente associado à parada e partida é de especial interesse em tempos de crise econômica como a que o Brasil vive atualmente. Quando o consumo energético está em baixa, a demanda pelo transporte de combustíveis diminui e eventualmente os sistemas começam a operar abaixo de sua capacidade nominal, o que resulta na necessidade de parar os sistemas ou de operá-los com vazões menores.

Os trabalhos disponíveis na literatura sobre o tema usualmente utilizam uma simplificação do problema que supõe velocidade constante ao longo do tempo, ou seja, vazão constante enquanto a região de mistura atravessa o comprimento do duto. Na prática, os oleodutos são submetidos a operações em regimes transientes com diversas paradas e partidas, sendo comum, a interface levar dias até alcançar seu destino final. Dessa forma, para que análises realistas sejam realizadas, é necessário desenvolver uma metodologia que considere o comportamento transiente das operações.

O fenômeno da mistura de produtos na região da interface é regido tipicamente pelo número de Reynolds e de Schmidt. Diversos autores encontrados na literatura disponível, pesquisaram a relação entre o escoamento e a intensidade de mistura ao longo da região da interface, sendo que a maioria adotou uma abordagem empírica. Estas pesquisas disponibilizaram correlações que permitem obter um coeficiente de dispersão que rege a mistura dos produtos ao longo de seu transporte. Este coeficiente foi levantado por diversos autores de forma analítica a partir dos perfis de velocidade do escoamento e também de forma empírica. No entanto, não existe consenso com relação ao melhor tratamento para avaliar o coeficiente de dispersão no regime totalmente turbulento, nem na região de transição entre o regime laminar e turbulento.

1.1 Objetivo

A presente pesquisa tem por objetivo estudar a mistura de produtos na região da interface, ao longo do transporte em oleodutos submetidos a diferentes condições operacionais. Para isso, pretende-se: 1) Desenvolver uma metodologia para calcular numericamente a concentração dos produtos na região de interface quando submetidos a operações com vazões variáveis, paradas e partidas; 2) Desenvolver metodologia para tratamento de dados de campo de modo a comparar os resultados numéricos obtidos com resultados reais de modo a validar o modelo e o método numérico; 3) Avaliar o desempenho das correlações disponíveis na literatura para o coeficiente de dispersão axial, de modo a avaliar da melhor forma possível a região de mistura em operações reais.

1.2 Organização da Dissertação

A presente dissertação está dividida em sete capítulos.

O Capítulo 2 apresenta uma breve revisão bibliográfica dos trabalhos relevantes a esta pesquisa.

O modelo matemático utilizado neste trabalho é apresentado no Capítulo 3, sendo que o detalhamento das correlações para o coeficiente de dispersão axial selecionadas para serem investigadas são apresentadas no capítulo 4.

O Capítulo 5 apresenta o modelo numérico desenvolvido e aplicado a este trabalho, sendo que a validação da metodologia é descrita no Capítulo 6.

O estudo do escoamento operando no regime transiente, submetido a diferentes condições operacionais, com comparações com dados de campo é realizado no Capítulo 7.

Finalmente, o Capítulo 8 reúne as principais conclusões desta pesquisa e sugere trabalhos futuros.

25

2 Revisão Bibliográfica

O fenômeno da dispersão axial em dutos é um fenômeno composto que depende basicamente das propriedades dos produtos transportados, da geometria do duto e do escoamento. O problema foi abordado experimentalmente por muitos autores ao longo dos anos desde os anos 1940, o que garante à literatura uma base de dados diversa que permite distinguir bem a influência de alguns parâmetros sobre a magnitude deste fenômeno. Estão disponíveis diversos modelos na literatura para estimar o comprimento da região de mistura, dadas as condições de concentração máxima de um produto no outro e também para estimar o coeficiente de dispersão axial isoladamente. A grande maioria dos modelos disponíveis são experimentais, o que limita sua aplicabilidade às condições recomendadas por seus autores. Ainda não está disponível na literatura um modelo único que reproduza o fenômeno da dispersão axial em dutos por completo.

Ao longo dos anos 1940, diversos autores realizaram pesquisas a respeito da contaminação longitudinal de petróleo e derivados, como por exemplo Fowler & Brown (1943); Birge (1947) e Simth & Sulze (1948). Estas primeiras investigações foram predominantemente empíricas e os autores observaram que a região contaminada é função de parâmetros do sistema como seu volume, propriedades (densidade e viscosidade) e velocidade do fluido. Observações do escoamento permitiram concluir que o comprimento contaminado era diretamente proporcional ao comprimento do duto e inversamente proporcional a velocidade do fluido (ou número de Reynolds). Sendo observações de natureza empírica, estas usualmente forneciam informações que eram úteis apenas para os sistemas em que foram feitas. Contudo, o que havia em comum entre as observações foi a base para que mais tarde outros pesquisadores viessem a conectar estas informações e desenvolver modelos baseado na teoria de difusão de massa.

Um dos primeiros autores a elaborar uma análise teórica do fenômeno de dispersão axial foi Taylor (1922). O termo dispersão axial se refere à contaminação longitudinal devido aos efeitos convectivos e difusivos, predominantes no escoamento de bateladas de produtos em oleodutos. Este foi sugerido amplamente como o fenômeno governante do processo de mistura em interfaces em oleodutos. Através de um balanço energético de um escoamento turbulento, Taylor propôs uma equação para determinar o comprimento da região de mistura (ou região de contaminação) em função da velocidade do fluido e do coeficiente de correlação da flutuação da velocidade turbulenta em um determinado instante de tempo. A necessidade de estimar o coeficiente de correlação da velocidade dificulta sua aplicação.

Em 1953, Taylor publicou um trabalho avaliando o aspecto teórico deste tópico para mistura em escoamentos em regime laminar, seguido por um trabalho separado em 1954 que analisa o fenômeno em escoamentos turbulentos. Taylor (1953; 1954) modelou o fenômeno como um processo transiente de difusão, com o coeficiente de dispersão estimado através de uma combinação de mistura por difusão molecular ou turbulenta e convecção considerando os perfis de velocidade inerentes aos dois regimes de escoamento. As análises de Taylor revelaram que o coeficiente de dispersão axial normalizado pelo diâmetro do duto e velocidade do escoamento diminui com o número de Reynolds no regime turbulento ao contrário do aumento observado no regime laminar. Os conceitos introduzidos por Taylor serviram de ponto de partida para uma série de trabalhos que analisaram a dispersão axial.

Devido a essa diferença no comportamento do coeficiente de dispersão axial entre os regimes laminar e turbulento, muitos autores se ativeram a tratar os regimes de escoamento com equacionamentos separados, o que implica em uma descontinuidade no comportamento. Dados experimentais levantados na literatura, contudo, apresentam um comportamento mais contínuo, devido ao fato da transição entre os regimes de escoamento não ocorrer em um número de Reynolds específico e sim numa faixa.

Investigações realizadas após os trabalhos de Taylor (Aris 1956; Levenspiel, 1958) mostraram que difusividade molecular (ou número de Schmidt) também influencia a dispersão no regime turbulento. Outros autores questionaram a validade do perfil de velocidade empregado por Taylor (1954) em seus modelos (Barkelew et al., 1957; Flint e Eisenklam, 1969; Chatwin,1971; Krantz e Wasan 1974; Maron, 1978; Araujo et al. 2002) assim como a aplicabilidade da analogia de Reynolds (Sjenitzer 1958; Flint e Eisenklam 1969) a certas situações, sugerindo que um perfil de velocidade mais exato melhoraria as previsões dos coeficientes de dispersão. Tentativas de melhorar a faixa de trabalho do modelo foram feitas buscando incorporar efeitos de anisotropia no coeficiente de difusão, devido à mistura progressiva (Krantz and Wasan, 1974; Araujo et al., 2002; Ekambara e Joshi, 2003); o que aumenta a complexidade do modelo.

Austin e Paulfrey (1964) publicaram um dos principais avanços na investigação da dispersão axial. Eles reuniram dados experimentais disponíveis na literatura sobre dispersão axial e propuseram determinar o coeficiente de dispersão axial levando em consideração o fato da região turbulenta ser formada de três sub-regiões: sub-camada laminar, camada amortecedora e núcleo turbulento, cada uma com um perfil diferente de velocidade. Procedimento análogo para determinar as características de difusão foi elaborado mais tarde por outros autores (Chatwin 1973; Chikwendu e Ojiakor, 1985; Smith, 1987). Como trabalhos empíricos que obtêm valores dos parâmetros de experimentos, descrevendo uma variedade de sistemas, estes têm aplicabilidade limitada a casos específicos.

Patrachari (2012) avalia o desempenho de diversos modelos para o coeficiente de dispersão, tanto teóricos como experimentais, e explica porque eles falham em estimar com exatidão o coeficiente de dispersão axial em escoamento com Reynolds baixos e moderados (< 70,000). O modelo desenvolvido por Patrachari é baseado no de Taylor (1954) para dispersão axial turbulenta com modificações que permitem que as equações sejam aplicáveis à todos os números de Reynolds do regime turbulento. Seu modelo é baseado na ideia de que a subcamada viscosa detém papel importante na dispersão axial e que sua análise pode fornecer perfis de velocidade que levarão a previsões melhores para a região de mistura.

De acordo com o levantamento bibliográfico realizado, o estudo da região da mistura na presença de partidas e paradas foi pouquíssimo estudado. Em 2001, Baptista et al. publicaram um artigo especificamente sobre o problema da mistura em polidutos sob condições de partidas e paradas. Este trabalho apresenta um modelo para estimar o volume de mistura levando em consideração a inércia dos fluidos na equação de quantidade de movimento linear e considera que o coeficiente de dispersão depende da concentração. As equações que governam o modelo foram resolvidas de forma desacoplada para a velocidade média e a concentração. A equação de conservação de quantidade de movimento linear é resolvida como um problema de valor inicial com o método Runge-Kutta de quarta ordem. Já a equação de concentração é discretizada utilizando diferenças finitas e resolvida com um método preditor corretor. A avaliação do desempenho do modelo para prever concentrações em regiões de mistura é limitada a um oleoduto sob diferentes condições operacionais, com 0, 2 e 3 paradas. Os resultados do trabalho mostram que cada parada pode causar até 4% de acréscimo no volume de mistura quando comparados com o volume sem

28

paradas. Baptista et al. (2001) também afirmaram que, baseado em suas simulações numéricas, o número de partidas e paradas tem maior influência sobre o volume misturado que o tempo ocorrido de cada parada.

3 Modelo Matemático

Neste capítulo, é apresentada a modelagem matemática empregada para avaliar o fenômeno da dispersão axial, através da determinação das regiões de mistura na interface entre dois produtos em polidutos.

Conforme explicado no Capítulo 1 e ilustrado na Figura 1.3, o comprimento de mistura *S* corresponde a região onde a concentração do produto A varia entre dois limites pré-definidos (valor de corte) como aceitáveis para considerar cada produto como "puro", $C_{corte,A}$ e $C_{corte,B}$, respectivamente

$$S = x(C_A \ge C_{corte,A}) - x(C_A \le C_{corte,B})$$
(1)

Uma vez que, em condições reais de operação, a vazão sofre grandes variações ao longo do tempo, devido à necessidades operacionais como partida e parada do duto, troca de bombas e mudança de arranjos de bombas, as análises mais simplificadas assumindo regime permanente não são adequadas. Dessa forma, torna-se necessário, desenvolver um modelo que permita determinar a região de mistura na presença de vazão variável ao longo do tempo.

A seguir é descrito o modelo matemático utilizado no presente trabalho para a determinação do comprimento da região da interface, a partir da distribuição de concentração. Ainda neste capítulo, apresenta-se a solução particular para o perfil de concentração para o caso de velocidade constante.

3.1 Equacionamento

O fenômeno de dispersão ocorre ao longo do duto, conforme a interface percorre o comprimento entre base expedidora e recebedora. Comprimentos de oleodutos têm outra ordem de grandeza quando comparados com comprimentos de interface. Comprimentos de oleodutos estão tipicamente da ordem de dezenas ou centenas de quilômetros enquanto que comprimentos de interface se desenvolvem em centenas de metros, conforme ilustrado na Figura 3.1.

A determinação da região da mistura pode ser obtida pela distribuição da concentração (C_i) de um dos produtos i (i = A ou B) ao longo na tubulação, definida como

$$C_i = \frac{\rho_i - \rho_A}{\rho_B - \rho_A} \tag{2}$$

onde ρ_i é a massa específica do produto *i*.

A concentração pode ser obtida a partir da equação de conservação de massa de uma espécie

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} C_i = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_i + m_{C_i}$$
(3)

onde *t* é o tempo e \vec{V} é o operador gradiente. \vec{u} é o vetor velocidade, $\vec{J_i}$ é o fluxo difusivo de massa da espécie *i* em relação a velocidade média em massa. e m_{C_i} é a fonte de espécie, devido à por exemplo, mudança de fase ou reação química. O fluxo de difusivo de massa da espécie *i* em relação a mistura pode ser avaliado com a lei de Fick

$$\vec{J}_i = -D \ \vec{\nabla} C_i \tag{4}$$

onde D é o coeficiente de difusão.

A equação para determinar a concentração pode ser escrita em coordenadas cilíndricas para um duto circular, considerando simetria angular, e desprezando fonte/sorvedouro de espécie como

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + u_x \frac{\partial C_i}{\partial x} + u_r \frac{\partial C_i}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D \frac{\partial C_i}{\partial r} \right)$$
(5)

onde x e r são as coordenadas axial e radial, e u_x e u_r são os componentes de velocidade nas direções axial e radial, respectivamente.

Uma hipótese que pode ser introduzida consiste em considerar que os diferentes produtos são incompressíveis, tendo em vista a ordem de grandeza da velocidade do som em oleodutos (da ordem de 1km/s).

$$\rho_A = cte, \, \rho_B = cte \to \vec{\nabla} \cdot \vec{U} = 0 \tag{6}$$

A hipótese de incompressibilidade também pode ser aplicada na região da interface, pois a ordem de grandeza dos comprimentos de interface (centenas de metros) é muito menor do que o comprimento dos polidutos (quilômetros).

Uma vez que os polidutos possuem quilômetros de comprimento e diâmetro de apenas alguns centímetros, pode-se considerar que o escoamento só possui um componente de velocidade u_x , o qual não varia axialmente devido a condição de incompressibilidade.

$$\vec{U} = u_x \,\vec{\iota} \tag{7}$$

Esta hipótese é muito conveniente, pois elimina a necessidade de se resolver as

equações de conservação de massa e quantidade de movimento linear para a determinação da velocidade e pressão.

Visando simplificar ainda mais o problema, pode-se considerar que a concentração só possui variação da direção axial e os efeitos de convecção e difusão dos produtos na direção radial são introduzidos na equação, através do coeficiente de dispersão K_E , com a convecção axial governada pela velocidade média na seção transversal $u_x = \overline{U}$. A equação resultante toma a seguinte forma

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \overline{U} \ \frac{\partial C_i}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K_E \frac{\partial C_i}{\partial x} \right] \tag{8}$$

O coeficiente de dispersão K_E tipicamente é função do número de Reynolds *Re* e de Schmidt *Sc*

$$Re = \frac{\overline{U} d}{V}$$
(9)

$$Sc = \frac{v}{D}$$
 (10)

onde d = 2R é o diâmetro do duto, $v = \mu/\rho$ é a viscosidade cinemática, $\mu e \rho$ correspondem, respectivamente, a viscosidade molecular e massa específica da mistura. A viscosidade cinemática da mistura depende das concentrações e das viscosidades dos dois produtos A e B (Gambill, 1959)

$$v^{\frac{1}{3}} = C_A v_A^{\frac{1}{3}} + C_B v_B^{\frac{1}{3}}$$
(11)

A massa específica da mistura pode ser calculada como uma média em função das concentrações dos produtos,

$$\rho = C_A \,\rho_A \, + C_B \rho_B \tag{12}$$

A partir da hipótese de incompressibilidade, tem-se que a velocidade média na seção transversal é igual a velocidade média na entrega do produto na saída da tubulação \overline{U} . Considerando a velocidade uniforme na seção transversal, a velocidade axial $u_x = u(t)$ só varia com o tempo

$$u(t) = \overline{U}$$
 , $\overline{U} = \frac{Q(t)}{A}$ (13)

sendo Q a vazão volumétrica na saída da tubulação e A a área da seção transversal de escoamento.

A posição da interface, x_m , existente no interior do domínio de comprimento L ($x_m \in [0, L]$) corresponde a posição do ponto médio da interface, onde as concentrações dos dois produtos são iguais a 0,5 [$C_A(x,t) = C_B(x,t) = 0,5$]. A posição da interface, x_m , para cada instante de tempo, pode ser facilmente

determinada integrando

$$\frac{dx_m}{dt} = u(t) \qquad \log \alpha \qquad x_m = \int_0^t u(t')dt' \qquad (14)$$

Figura 3.1 - Ordem de grandeza dos comprimentos envolvidos e referenciais

Para resolver a equação (3), Baptista et al. (2001) utilizaram uma mudança de referencial através de uma mudança de variáveis que desloca o centro do domínio para a posição da interface ($x' = x - x_m$). Definindo esta coordenada de forma adimensional, tem-se

$$y = \frac{x}{L} - \tau \tag{15}$$

onde

$$\tau = \frac{x_m}{L} = \frac{1}{L} \int_0^t u(t') dt'$$
(16)

Note que para qualquer instante de tempo, y = 0 corresponde a posição do centro da interface. τ é a posição adimensional da interface.

Para rescrever a equação (3) em função de $y \in \tau$, utiliza-se que

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial C_i}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} + \frac{\partial C_i}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t}$$
(17)

$$\frac{\partial C_i}{\partial x} = \frac{\partial C_i}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial x} + \frac{\partial C_i}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial x}$$
(18)

sendo

$$\frac{\partial \tau}{\partial t} = \frac{u}{L} \qquad \qquad \frac{\partial y}{\partial t} = -\frac{u}{L} \tag{19}$$

$$\frac{\partial \tau}{\partial x} = 0 \qquad \qquad \frac{\partial y}{\partial x} = \frac{1}{L} \tag{20}$$

A equação 3 reescrita em função das novas variáveis é apresentada abaixo:

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial y} \left[K_L \frac{\partial C_i}{\partial y} \right] \tag{21}$$

onde K_L é o coeficiente de dispersão axial adimensional definido em função da velocidade média na saída do poliduto e do comprimento do mesmo como

$$K_L = \frac{K_E}{L \, \overline{U}} \tag{22}$$

Vale observar que o coeficiente de dispersão K_L é variável com relação ao tempo (e portanto a τ) e a y, pois depende da difusão e convecção entre os produtos, da posição da interface, e da velocidade de bombeamento na saída.

E comum na literatura, apresentar os dados do coeficiente de dispersão axial adimensionalizado pelo diâmetro. Define-se, portanto a variável K_s .

$$K_S = \frac{K_E}{d\,\overline{U}} \tag{23}$$

Desse modo, a operação de deslocamento de uma interface ao longo do comprimento do duto se dá de $\tau = 0$ (envio) a $\tau = 1$ (recebimento). Este modelo matemático visa obter a concentração de um produto em função de *y* após a interface x_m ter percorrido o comprimento do duto, *L*.

Uma limitação deste modelo é que se o fluido no oleoduto está parado, não ocorre difusão entre as espécies, i.e., o perfil de concentração não se altera durante o período de parada. Isto ocorre, pois se o fluido no oleoduto está parado, $\overline{U} = 0$, o coeficiente de difusão adimensional é infinito, e a posição adimensional da interface τ não se move. No entanto, verificou-se que esta aproximação é aceitável, uma vez que a contribuição da difusão molecular quando o fluido no oleoduto está parado é desprezível em relação à dispersão que acontece quando a interface está em movimento. Outro efeito que não está sendo modelado é a dispersão resultante do efeito da gravidade sob fluidos de massa específica diferentes. Este efeito acontece em trechos verticais e inclinados.

Para completar a definição do modelo é necessário introduzir um modelo para o coeficiente de dispersão, o que é realizado no próximo capítulo.

3.2 Condições de Contorno e Inicial

Por definição, consideramos que o produto "A" é o produto que já se encontrava no oleoduto e o produto "B" é o produto que irá deslocar a interface.

Para definir as condições de contorno para a equação (21), considera-se que longe da posição da interface, o fluxo de massa de uma espécie na outra é nulo

$$y \to \pm 1 \Rightarrow \frac{\partial C_i}{\partial y} = 0$$
 (24)

Como condição inicial, têm se uma interface "degrau" em y = 0 quando $\tau = 0$, conforme apresentado na equação (25) e ilustrado na Figura 3.2.

$$\begin{cases} C(y,\tau) = C(y \le 0, \ \tau = 0) = 0\\ C(y,\tau) = C(y \ge 0, \ \tau = 0) = 1 \end{cases}$$
(25)

O perfil em degrau utilizado no instante inicial é uma simplificação da condição inicial real, que pode ser diferente devido ao procedimento de troca de tanques. Este procedimento basicamente consiste em trocar o produto que está sendo enviado sem parar o oleoduto, aguardando que a válvula do tanque do produto a ser enviado abra totalmente antes de fechar a válvula do tanque que estava enviando o produto cuja batelada está chegando ao fim. Quando ocorrem manobras de tanque sem parar o oleoduto, estas duram tipicamente 2 minutos (1 minuto para abertura e fechamento de cada válvula). Como consequência, o comprimento da região de mistura não é nulo. Por exemplo, considerando-se a velocidade típica de oleodutos de 1m/s, o comprimento inicial da região de mistura é de cerca de 120 metros.



Figura 3.2 - Condição inicial - Interface degrau

3.3 Distribuição de Concentração para uma Interface com Velocidade Constante

Nesta seção apresenta-se a determinação do comprimento da região de mistura *S* para o caso simplificado de velocidade constante durante todo o transporte dos produtos, de acordo com o modelo presentado por Taylor (1953,

1954). Supõe-se que os fluidos transportados possuem viscosidades iguais ou comparáveis. Os fluidos são considerados miscíveis, e não apresentam grandes diferenças em suas densidades. O comprimento de mistura pode então ser obtido, considerando um coeficiente de dispersão K_E constante ao longo do tempo, espaço e concentração. A equação (3) pode ser rescrita como

$$\frac{\partial C_A}{\partial \tau} = K_L \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2}$$
(26)

Introduzindo uma variável de similaridade igual a

$$\eta = \frac{y}{\sqrt{\pi K_L \tau}} \qquad \text{logo} \quad \frac{d \eta}{d y} = \frac{1}{\sqrt{\pi K_L \tau}} \quad ; \quad \frac{d \eta}{d \tau} = -\frac{1}{2} \frac{\eta}{\tau} \tag{27}$$

pode-se rescrever a equação (26) como uma equação diferencial ordinária

$$\frac{d^2 C_A}{d \eta^2} = -\frac{\pi}{2} \eta \frac{d C_A}{d \eta}$$
(28)

Definindo

$$\xi = \frac{dC_A}{d\eta} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\partial\xi}{\xi} = -\frac{\pi}{2} \eta \, d\eta \tag{29}$$

Integrando uma vez, e utilizando a condição de contorno de gradiente nulo no infinito, tem-se

$$\frac{dC_A}{d\eta} = C_1 \exp\left[-\frac{\pi}{4}\eta^2\right] \quad ; \quad z = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\eta \tag{30}$$

Integrando novamente para determinar a concentração, obtém-se

$$C_A = C_2 + C_1 \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp[-z^2] dz = C_2 + C_1 \text{ erf}(z)$$
(31)

sendo a definição da função erro igual a

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-z^2} dz$$
 (32)

Aplicando-se as condições de contorno de que a concentração na posição da interface é igual a 0,5 e nula no infinito, pois só existe o produto B, tem-se

$$C_A = 0.5 \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{y}{2 \ \kappa_L^{1/2} \ \tau^{1/2}} \right) \right]$$
(33)

Considerando que o tempo final t_t corresponde ao tempo necessário para o deslocamento da interface através de toda a tubulação, tem-se

$$t_t = \frac{L}{\overline{U}} \qquad ; \quad \tau_t = 1 \tag{34}$$
Introduzindo a variável $C_{corte,A}$, correspondente à concentração admissível do produto *A* na mistura e definindo S_A como comprimento entre o local onde a $C_A = C_{corte,A}$ e o meio da região de mistura onde $C_A = 0,5$, tem-se $S_A = x_{corte,A} - x_m$. De forma análoga, $S_B = x_m - x_{corte,B}$ é o comprimento entre o meio da região de mistura onde $C_A = 0,5$ e o local onde a $C_A = C_{corte,B}$. Substituindo estas definições na equação 33, e lembrando que $K_L = K_E/(L \overline{U})$, tem-se

$$S_i = 2 t_t^{1/2} K_E^{1/2} \operatorname{erf}^{-1}[1 - 2 C_{corte,i}] \quad \text{para } i \in \{A, B\}$$
(35)

O comprimento total da região da interface pode ser obtido somando os comprimentos dos dois produtos.

$$S = S_A + S_B \tag{36}$$

Calculando S_i para diferentes concentrações $C_{corte,i}$, obtém-se a distribuição de concentração ao longo do comprimento para uma região de mistura formada por uma interface que se deslocou com velocidade constante, considerando um coeficiente de dispersão constante ao longo do tempo e espaço.

4 Coeficiente de Dispersão Axial

Modelos empíricos para o coeficiente de dispersão, apesar de específicos para determinadas faixas e sistemas, permitem um bom entendimento do fenômeno e dos principais parâmetros que governam o crescimento da região de mistura por dispersão axial. Usualmente, estes modelos são criados a partir de coeficientes empíricos aplicados aos parâmetros que governam o fenômeno através da regressão de dados experimentais. Tipicamente estes modelos apresentem o comprimento de mistura em função dos parâmetros expostos abaixo:

Comprimento do duto: Quanto maior a distância percorrida pela interface, maior será o comprimento da região de mistura. Dados experimentais explicitam que o crescimento da região de mistura é uma função não linear do comprimento, tipicamente expressa em uma potência com coeficiente levantados experimentalmente.

Diâmetro do duto: Experimentos para levantamento de dispersão axial geralmente são realizados com uma única área transversal, sendo o diâmetro uma grandeza menos comum nos modelos experimentais. Contudo, este comumente aparece nos modelos de forma indireta, através do número de Reynolds ou outras formas como volume do duto.

Número de Reynolds e regime de escoamento: Estes parâmetros impactam drasticamente na dispersão axial, ao caracterizar o escoamento, a turbulência envolvida e o perfil de velocidade. De maneira geral, especialmente em escoamentos com alto número de Reynolds, mais turbulência resulta em menos dispersão axial. O número de Reynolds aparece tipicamente nos modelos elevado a um coeficiente empírico, assim como os outros parâmetros supracitados. Em alguns modelos, aparece a velocidade do escoamento no lugar do número de Reynolds. De uma maneira geral, escoamentos laminares resultam em mais dispersão axial que turbulentos.

Outros parâmetros: Além dos 3 parâmetros discutidos acima, outros fatores são conhecidos por influenciar na dispersão axial, como as propriedades dos produtos, o gradiente de pressão, fator de atrito, etc. Alguns modelos levam em consideração parâmetros secundários para tentar prever melhor a contaminação na região da interface, como por exemplo o número de Schmidt (Krantz e Wasan, 1974). Os dados experimentais disponíveis na literatura revelam que o fator de atrito e portanto a perda de carga tem papel fundamental na previsão da mistura em interfaces. Austin e Palfrey (1964) apontaram a semelhança entre a descontinuidade no fator de atrito em função do número de Reynolds e a descontinuidade apresentada na curva do comprimento de mistura versus número de Reynolds, atribuindo ao fator de atrito uma possível explicação para esta. Austin e Palfrey (1964) sugeriram o uso de duas equações separadas para cada regime, devido à esta descontinuidade observada.

A seguir, alguns modelos selecionados para avaliar o coeficiente de dispersão são apresentados. No final deste capítulo, uma análise comparativa de desempenho dos modelos selecionados é realizada.

4.1 Modelo de Taylor (1953, 1954)

Taylor (1953, 1954) conduziu seu trabalho com análises teóricas separadas para escoamentos em regime laminar e turbulento e concebeu o parâmetro que chamamos de coeficiente de dispersão axial. De acordo com Taylor, o perfil de velocidade tem papel fundamental na dispersão de matéria na direção axial. No seu trabalho, o coeficiente de dispersão axial necessário para determinar o tamanho da região de dispersão axial foi obtido através da solução da equação bi-dimensional de convecção-difusão,

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + (u_x - \overline{U})\frac{\partial C}{\partial \xi} = D\left[\frac{\partial^2 C_A}{\partial \xi^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C_A}{\partial r}\right)\right]$$
(37)

onde D é o coeficiente de difusão molecular entre as espécies. Nesta equação, a coordenada axial $\xi = x - x_m$ se move com a interface com velocidade \overline{U} ., t é o tempo, e r é a coordenada radial. O componente axial de velocidade u_x é não uniforme na seção transversal e depende do regime de escoamento. \overline{U} é a velocidade média na seção transversal, A

$$\overline{U} = \frac{1}{A_d} \int_A u_x \, d \, A \tag{38}$$

4.1.1 Dispersão axial em escoamento laminar

Como perfil de velocidade para o regime laminar, Taylor se utilizou do perfil de velocidade parabólico de Hagen-Pousselii na seção transversal.

$$u_x = u_0 \left[1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2 \right] \tag{39}$$

onde *R* é o raio do duto e $u_0 = 2 \overline{U}$ é a velocidade máxima no centro do duto.

Neste regime, a dispersão longitudinal pode ser considerada como causada integralmente devido a diferença de velocidades entre as linhas de corrente. Com essa hipótese, Taylor resolveu a equação de convecção-difusão assumindo perfil de concentração uniforme na seção transversal. De acordo com Taylor, esta hipótese é razoável quando o comprimento da tubulação percorrido (L) é grande o suficiente, de acordo com

$$\frac{L}{u_0} \gg \frac{R^2}{3.8^2 D} \tag{40}$$

O coeficiente de dispersão axial resultante de seu modelo é dado por

$$K_E = \frac{R^2 u_0^2}{192D} = \frac{R^2 \overline{U}^2}{48D}$$
(41)

O coeficiente de dispersão axial adimensional pode ser escrito em função do número de Reynolds *Re* e Schmidt *Sc*, sendo igual a

$$\frac{K_E}{\bar{U}d} = \frac{Re\ Sc}{192} \tag{42}$$

4.1.2 Dispersão axial em escoamento turbulento

No caso turbulento, Taylor (1954) assumiu um perfil de velocidade adimensional baseado em dados de experimentos ajustados por uma função F(r/R), a qual é ilustrada na Figura 4.1. A velocidade adimensional foi normalizada com relação a velocidade máxima no centro do tudo u_o e com a velocidade de atrito $u_{\tau} = \sqrt{\tau_w/\rho}$, onde τ_w é a tensão cisalhante exercida pelo escoamento turbulento na parede do duto. A velocidade é definida como

$$\frac{u_o - u_x}{u_\tau} = F\left(\frac{r}{R}\right) \tag{43}$$

Taylor propôs estimar a velocidade de atrito, utilizando o fator de atrito de Fanning *f*, considerando que a tensão cisalhante na parede por ser estimada de acordo com $\tau_w = \frac{1}{2} f \rho \overline{U}^2$, logo

$$u_{\tau} = \overline{U} \sqrt{\frac{f}{2}} \tag{44}$$



Figura 4.1 – Valores de F(r/R) assumidos por Taylor para o perfil de velocidade turbulento

Considerando que a analogia de Reynolds é válida e que os fenômenos de transferência de quantidade de movimento e massa são análogos, Taylor obteve a seguinte expressão para o coeficiente de dispersão axial turbulento

$$\frac{K_E}{U\,d} = 3,57\,\sqrt{f}\tag{45}$$

Os resultados de Taylor para estimativas de dispersão, utilizando as equações 41 e 45 são capazes de prever as tendências gerais do fenômeno. Contudo, falham ao prever resultados experimentais apresentados na literatura, conforme apontado na Figura 4.2. Austin e Palfrey (1964) mostraram, através de análise quantitativa da expressão de Taylor para o coeficiente de dispersão turbulento, que suas previsões se encontram ordens de grandeza abaixo dos valores experimentais medidos para escoamento de baixo Reynolds (<5000). Comparações similares mostram melhores resultados para altos Reynolds (>100000).



Figura 4.2 – Desempenho da equação de Taylor para dispersão turbulenta (Adaptado de Patrachari, 2012)

Outros autores avaliaram experimentalmente as expressões de Taylor e sugeriram melhorias levando em consideração o número de Schmidt, uma vez que a premissa de Taylor de assumir a analogia de Reynolds para massa e quantidade de movimento só é válida para Schmidt igual a 1. Estas contribuições incluíram o coeficiente de dispersão molecular e sugeriram modelos mais eficazes para escoamentos turbulentos de baixo Reynolds.

Para escoamentos com número de Schmidt maior que 1, o que é o caso para líquidos, o efeito da difusividade molecular pode ser considerado desprezível em escoamentos turbulentos de alto Reynolds, conforme demonstrado por autores como Levenspiel (1958) e Flint e Eisenklam (1969; 1970). Diversos pesquisadores (Flint e Eisenklam 1969; Krantz e Wasan 1974; Rachid, Araujo et al. 2002) sugeriram que o uso do perfil empírico de velocidade e de um coeficiente de difusão independente da concentração podem ser as razões para as falhas em suas previsões.

4.2 Correlação de Levenspiel (1958)

Levenspiel apresenta em seu trabalho de 1958 uma análise dimensional do coeficiente de dispersão axial para escoamentos laminares e turbulentos, tendo em vista o trabalho de Taylor, (1954). Levenspiel apresenta uma comparação dos dados disponíveis na literatura da época com as correlações de Taylor. Estes dados experimentais são provenientes de diversos autores que utilizaram dutos de até 40" e fluidos como água, gasolina, querosene e petróleo. Os pontos

reunidos por Levenspiel para o coeficiente de dispersão axial contêm variações de um fator de 300 no diâmetro e de 1000 no número de Schmidt, e mesmo assim apresentam uma coerência que permite estabelecer uma correlação e validar a teoria de que o coeficiente de dispersão axial caracteriza o processo de mistura em escoamento em dutos.

A partir do conjunto de dados experimentais levantados, uma curva de tendência do coeficiente de dispersão axial adimensional foi ajustada por Levenspiel em função de Reynolds de acordo com

$$\frac{K_E}{\bar{\upsilon}d} = e^{\omega} \tag{46}$$

onde,

 $\omega = 0,00623824 \,\eta^4 - 0,3136756\eta^3 + 5,888583\eta^2 - 48,99093 \,\eta + 151,22935 \quad (47)$

е

$$\eta = \ln(Re) \tag{48}$$

Os dados experimentais são comparados por Levenspiel na Figura 4.3 com o coeficiente de dispersão turbulento, proposto por Taylor, equação (45), utilizando um valor de fator de atrito para tubo comercial. Nesta mesma figura, a curva de tendência dos dados experimentais também foi incluída. Observa-se claramente a forte dependência do coeficiente de dispersão axial adimensional com o número de Reynolds. Pode ser observado também na Figura 4.3 que Levenspiel considera a correlação de Taylor para o regime laminar (equação 41) até Re=2300, apresentada neste gráfico para os valores de Schmidt 0,1; 1 e 10. A curva ajustada coincide com a correlação de Taylor (1954) para escoamentos em regime turbulento de alto Reynolds.

Levenspiel apontou em suas conclusões à necessidade de se realizar mais experimentos na faixa turbulenta para diminuir a incerteza das correlações propostas e para determinar uma possível contribuição do número de Schmidt para a dispersão em escoamentos turbulentos de baixo Reynolds. Estas recomendações viriam a ser seguidas por trabalhos seguintes na área.



Figura 4.3 – Coeficiente de dispersão axiai em função do número de Reynolds (Levenspiel, 1958)

4.3 Correlação de Austin e Palfrey (1964)

O modelo empírico proposto por Austin e Palfrey em 1964 para estimar o comprimento da região de mistura é conhecido como um dos modelos mais robustos disponíveis na literatura. Estes autores basearam seu modelo na análise de um extenso banco de dados contemplando escalas variadas, dados experimentais e de campo, apresentando assim previsões para uma grande faixa de condições.

Austin e Palfrey embasaram seu modelo empírico na semelhança observada por eles entre as equações de comprimento da região de mistura e as equações de espessura da subcamada viscosa.

Austin e Palfrey identificaram duas curvas de dispersão distintas para números de Reynolds no regime turbulento, conforme apresentado na Figura 4.4 e na Figura 4.5. A primeira região, corresponde a números de Reynolds menores que um Reynolds crítico e apresenta uma forte dependência com o número de Reynolds tanto do comprimento adimensional da região de mistura (Figura 4.4) como do coeficiente de dispersão, Figura 4.5. Em ambas as figuras, pode-se observar uma inclinação maior das curvas dessas grandezas do que na segunda região, correspondente a Reynolds mais altos. Baseado nessa observação, os autores propuseram a existência de dois mecanismos distintos atuando no regime turbulento e sugeriram a dispersão viscosa como um deles.



Figura 4.4 – Comprimento adimensional da região de mistura por Número de Reynolds para dutos de 2" e 8". Adaptado de Austin e Palfrey (1964)



Figura 4.5 – Correlação entre coeficiente de dispersão e número de Reynolds para diferentes diâmetros. Austin e Palfrey (1964)

No modelo de Austin e Palfrey, o comprimento da região de mistura é dado por duas equações separadas por um número de Reynolds crítico, definido por

$$Re_c = 10\ 000\ e^{1,52\sqrt{d}} \tag{49}$$

$$Re \ge Re_c \quad S = 18\,420\,\sqrt{d\,L}\,Re^{-0.9}e^{1.21\sqrt{d}}$$
 (50)

$$Re < Re_c \qquad S = 11,75\sqrt{dL} Re^{-0,1}$$
 (51)

onde d e L devem ser definidos em metros.

Outra observação importante feita por Austin e Palfrey (1964) foi que o número de Schmidt do fluido tem influência pequena na dispersão axial a partir de Reynolds > 100,000.

O modelo de Austin e Palfrey exposto acima calcula o comprimento da região de mistura, considerando como condições de contorno as posições onde a concentração de corte de um produto no outro está em 1% e 99% e resolvendo a equação 26 para o caso específico de velocidade constante, conforme apresentado no Capítulo 3, no item 3.3.

O coeficiente de dispersão efetivo adimensional sugerido por Austin e Palfrey (1964) para o regime turbulento também depende do Reynolds crítico sendo definido como

$$\frac{\kappa_E}{\bar{\upsilon}d} = (7,84 \times 10^6) \ e^{2,42\sqrt{d}} \ Re^{-1,8} \qquad Re < Re_c$$
(52)
$$\frac{\kappa_E}{\bar{\upsilon}d} = (3,188) \ Re^{-0,2} \qquad Re \ge Re_c$$
(53)

4.4 Correlação de Krantz e Wasan (1974)

O trabalho de Krantz e Wasan (1974) também utiliza dados experimentais de outros autores e correlaciona seus dados baseado numa teoria mais acurada para a determinação do coeficiente de dispersão baseado nos perfis de velocidade média e da difusividade turbulenta. Estes autores sugeriram um modelo no qual o coeficiente de dispersão, além do número de Reynolds, depende também do número de Schimdt dos fluidos, conforme apresentado na Figura 4.6, onde aparecem 3 curvas, correspondentes a Schmidt 10, 100 e 1000.

Assumindo a seguinte dependência entre o coeficiente de dispersão e o número de Reynolds,

$$\frac{K_E}{\overline{u}d} = \alpha R e^\beta \tag{54}$$

Baptista et al. (2001) ajustaram os dados apresentados por Krantz e Wasan (1974) para o coeficiente de dispersão com o número de Reynolds, o qual deve ser

calculado utilizando a viscosidade média da mistura, equação (11). Os parâmetros α e β são apresentados na Tabela 4.1 para números de Schimdt iguais a 100 e 1000, para $2 \times 10^3 \le Re < 1 \times 10^6$.



Figura 4.6 – Coeficiente de dispersão axial em função do número de Reynolds (Krantz e Wasan, 1974)

Faixa de número de	Schmidt=100		Schmidt=1000	
Reynolds	α	β	α	β
$2\times 10^3 \le Re < 1\times 10^4$	$1,53 \times 10^{5}$	-1,335	$5,28 \times 10^{5}$	-1,431
$1\times 10^4 \leq Re < 2\times 10^4$	8,81 × 10 ³	-1,025	$6,76 imes 10^{4}$	-1,208
$2\times 10^4 \leq Re < 4\times 10^4$	$1,08 \times 10^{2}$	-0,6318	$1,57 \times 10^{3}$	-0,8275
$4\times 10^4 \leq Re < 1\times 10^5$	$5,97 \times 10^{0}$	-0,3107	$1,96 \times 10^{1}$	-0,4138
$1 \times 10^5 \le Re < 1 \times 10^6$	$8,03 \times 10^{-1}$	-0,1364	$8,03 \times 10^{-1}$	-0,1364

Tabela 4.1 - Coeficientes da equação para o cálculo do coeficiente de dispersão

No trabalho desenvolvido por Baptista et al. (2001), o modelo de Taylor (1953) para regime laminar (Re < 1000) foi utilizado. Visando uma transição suave para o coeficiente de dispersão entre os regimes de escoamento, Baptista et al. (2001) sugeriram utilizar os parâmetros α e β ajustados para uma região de transição do escoamento, $10^3 \le Re < 2 \times 10^3$.

Os parâmetros α e β obtidos no presente trabalho para uma transição suave entre o regime laminar e turbulento, são apresentados na Tabela 4.2. Para Schmidt = 1000, estes foram diferentes sensivelmente diferentes dos apresentados por Baptista et al.(2001).

Tabela 4.2 – Coeficientes da equação para o cálculo do coeficiente de dispersão na região de transição

Faixa de número de	Schmidt=	=100	Schmidt=1000	
Reynolds	α	β	α	β
$1 \times 10^3 \le Re < 2 \times 10^3$	$1,086 \times 10^{22}$	-6,440	$6,340 \times 10^{30}$	-9,025

4.5 Modelos "Scraper wash-off" de Udoetok e Nguyen (2009) e Patrachari (2012)

Este tipo de modelo empírico foi desenvolvido visando confirmar a dependência da dispersão axial com a espessura da subcamada viscosa. Seu desenvolvimento é baseado na premissa de que toda mistura na direção axial é causada apenas pelo efeito da fração do fluido mais próximo da parede se mover mais lentamente que da região central do duto.

Udoetok e Nguyen (2009) propuseram um modelo para estimar o volume de mistura baseado na modelagem da interface como um disco concêntrico, similar a um *pig* de separação.

Assumindo um perfil de velocidade no regime turbulento, de acordo com a lei de potência $1/n_u$ (Potter e Wiggert 2002)

$$\frac{u_x}{u_0} = \left(1 - \frac{r}{R}\right)^{1/n_u} \tag{55}$$

obtém-se um perfil praticamente uniforme na região central do oleoduto.

A velocidade média pode ser relacionada com a velocidade máxima através de

$$\overline{U} = \frac{2n_u^2}{(n_u+1)(2n_u+1)} u_0 \tag{56}$$

Conforme indicado por Udoetok e Nguyen (2009), o expoente da lei de potência deve ser avaliado de acordo com

$$n_u = \frac{1}{\sqrt{f}} \tag{57}$$

sendo que, Udoetok e Nguyen (2009) recomendam a correlação explícita de Haaland (1983) para determinar o fator de atrito a ser utilizado.

$$f = \left\{ 1,8 \log_{10} \left[\left(\frac{\varepsilon/d}{3,7} \right)^{1,11} + \frac{6,9}{Re} \right] \right\}^{-2}$$
(58)

De modo a estimar o volume de mistura, é assumido que a turbulência cria um *pig* imaginário do tipo disco, concêntrico ao duto na interface mais à frente, como ilustrado na Figura 4.7. O raio r' do *pig* imaginário do tipo disco depende das condições de fluxo e aumenta com o número de Reynolds.



Figura 4.7 – Perfil de velocidade turbulento (A) e mistura atrás de *pig* de disco imaginário (B) (Udoetok e Nguyen, 2009)

Como r' < R, a parcela lenta do produto à frente, próxima das paredes, fica para trás do *pig* disco imaginário em mistura turbulenta com o produto de trás. O volume de mistura pode então ser estimado como sendo o produto da área livre de escoamento (entre a extremidade o *pig* e a parede) e o comprimento do duto.

O raio do *pig* disco imaginário é encontrado considerando que a velocidade em sua extremidade é uma fração da velocidade média, onde F_u é uma constante a ser determinada experimentalmente.

$$u_x(r') = F_u \overline{U} \tag{59}$$

Combinando as equações 55, 56 e 59, pode se obter o raio do pig.

$$r' = R \left[1 - \left(F_u \; \frac{2n_u^2}{(n_u + 1)(2n_u + 1)} \right)^{n_u} \right]$$
(60)

A razão da área não empurrada pelo pig disco imaginário é dada por:

$$\frac{A'_{A}}{R} = \frac{\pi R^{2} - \pi r^{2}}{\pi R^{2}} = 1 - \left(\frac{r}{R}\right)^{2} = 1 - \left[1 - \left(\frac{2n_{u}^{2}}{(n_{u}+1)(2n_{u}+1)}\right)^{n_{u}} F_{u}^{n_{u}}\right]^{2}$$
(61)

Logo o volume de mistura é $\forall = A \ L$. Como já havíamos definido que o volume de mistura é igual a $\forall = SA$, o comprimento de mistura é pela equação abaixo:

$$S = \left(1 - \left[1 - \left(\frac{2n_u^2}{(n_u+1)(2n_u+1)}\right)^{n_u} F_u^{n_u}\right]^2\right)L$$
(62)

Os autores obtiveram o valor de F_u através de dados reais fornecidos pela companhia *Colonial Pipeline Co* como F_u = 0,585. Como rugosidade absoluta para o cálculo do fator de atrito, utilizaram ε = 0,000025m e a expressão de Haaland (1983).

A partir da equação 62, deduzida por Udoetok e Nguyen (2009), é possível

obter um coeficiente de dispersão adimensional realizando o procedimento inverso daquele realizado anteriormente para calcular o comprimento da região de mistura a partir do coeficiente de dispersão (item 3.3).

$$\frac{K_E}{\bar{v}d} = 0,023 \,\left(\frac{L}{d}\right) \left[1 - \left(1 - \left(\frac{0,585 \times 2 \times n_u^2}{(n_u + 1)(2n_u + 1)}\right)^{n_u}\right)^2\right]$$
(63)

Patrachari (2012) desenvolveu conceito semelhante e o chamou de "scraper *wash-off*" (raspador de lavagem em tradução livre), porém utilizou o conceito de espessura da subcamada viscosa δ_v (do fluido de menor viscosidade) para determinar a fração da área transversal do duto responsável pela mistura, $\forall = A'L = [\pi R^2 - \pi (R - \delta_v)^2] L$. Logo, o comprimento de mistura pode ser obtido a partir de

$$S = 2\left[1 - \left(1 - \frac{\delta_{\nu}}{R}\right)^2\right]L$$
(64)

onde o fator 2 que aparece na equação acima tem origem na premissa de contaminação simétrica entre os 2 produtos misturados. Apesar desta premissa ser utilizada por diversos modelos mais simples da literatura, muitos autores observaram a dependência da dispersão axial em relação às propriedades individuais de cada produto, gerando, portanto, assimetria no perfil de concentração ao longo do comprimento ou volume.

Dentre as diversas aproximações disponíveis na literatura para obter a espessura da subcamada viscosa, δ_v . Patrachari utilizou a seguinte expressão, sugerida por Schlichting and Gersten (2000)

$$\frac{\delta_{\nu}}{d} = 122 \frac{\ln(Re)}{Re \cdot G\{\ln(Re)\}}$$
(65)

sendo G função do número de Reynolds de acordo com a equação a seguir:

$$\frac{\Lambda}{G} + 2\ln\left(\frac{\Lambda}{G}\right) - \Delta = \Lambda \tag{66}$$

sendo $\Lambda = 2 \ln(Re)$ e $\Delta = -0,17$ para tubos lisos. As equações acima são válidas para escoamentos em regime turbulento com 2300 $\leq \text{Re} \leq 10^7$.

Patrachari (2012) comparou sua formulação com a de Udoetok e Nguyen (2009), que utiliza um coeficiente empírico, para estimar a espessura da região anular em torno do *pig* disco imaginário. No modelo de Udoetok e Nguyen (2009), o raio do *pig*, corresponde a posição radial onde a velocidade local é 58,5% da velocidade no centro do duto. Patrachari (2012) comentou que esta posição radial encontra-se na vizinhança da posição radial que determina a subcamada viscosa.

Os dois modelos de "scraper *wash-off*" apresentados nesta seção, de Udoetok e Nguyen (2009) e Patrachari (2012), determinam o comprimento de mistura como uma função linear do comprimento percorrido pela interface. Contudo, este comportamento não é observado nos dados disponíveis na literatura, gerando assim previsões erradas com desvios da ordem de 1000% (Patrachari, 2012), principalmente para longos comprimentos e Reynolds turbulento intermediários e baixos (Re < 15000).

Patrachari (2012) então sugeriu uma modificação no modelo, introduzindo uma dependência no número de Reynolds, para escoamento com número de Reynolds acima de um valor crítico, Re_{cr} . O número de Reynolds crítico foi definido baseado em uma mistura 50-50 dos dois fluidos envolvidos, sendo igual a $Re_{cr} =$ 10^{6} . A partir das comparações das previsões do modelo com os dados da literatura, introduziu um expoente empírico k ao comprimento percorrido pela interface. O comprimento de mistura pode então ser obtido com

$$S = 2\left[1 - \left(1 - \frac{\delta_v}{R}\right)^2\right] \cdot L^k \tag{67}$$

sendo k

$$k = 0.9 \left[\frac{\bar{u}}{u_0} \frac{\ln(Re_{leve})}{\ln(10^6)} \right], \quad Re_{leve} \le Re_{cr} = 10^6$$
(68)

onde 0,9 é um fator empírico e a razão entre velocidades pode ser calculada pela equação 56. Re_{leve} é o número de Reynolds calculado com as propriedades do líquido mais leve, menos viscoso,

$$Re_{leve} = \frac{\overline{\upsilon} \, d}{\upsilon_{leve}} \tag{69}$$

Patrachari (2012) observou que este modelo apresenta resultados razoáveis com Reynolds maiores que 20 000. Contudo, subestima o comprimento de mistura para escoamentos com Reynolds abaixo deste valor. Na Figura 4.8 é apresentada uma comparação entre o modelo para o expoente k e dados experimentais. Observa-se que apesar de um grande número de dados apresentar desvios inferiores a 5%, diversos subconjuntos, que correspondem a números de Reynolds mais baixos, apresenta desvia bem maior.

O modelo desenvolvido por Patrachari exposto nas equações 67 e 68 representa uma evolução clara quando comparado com os outros modelos do tipo *"Scraper wash-off"* como o de Udoetok e Nguyen (2009). Contudo, este modelo é ainda considerado não confiável, já que uma incerteza de 5% na previsão do expoente k pode resultar em uma incerteza de 50% ou até 100% na previsão do

comprimento de mistura (Patrachari, 2012). Este problema se intensifica para aplicações em que se pretende estimar o comprimento contaminado em dutos de grande comprimento, muito comuns na indústria de transporte de petróleo e derivados. Patrachari (2012) estima que a média absoluta do desvio deste modelo é da ordem de 30%.



Figura 4.8 – Comparação entre k experimental e previsto pela equação 68 (Patrachari, 2012)

4.6 Correlação Teórica de Patrachari (2012)

Patrachari (2012) sugeriu uma teoria para explicar os desvios das previsões de Taylor (1954) para escoamentos turbulentos de baixos Reynolds, os quais são claramente visíveis na Figura 4.2. Ele apontou que Taylor não levou em consideração os efeitos viscosos perto da região da parede, os quais para essa faixa de número de Reynolds passam a ser significativos. Austin e Palfrey (1964) já haviam sugerido a importância de considerar efeitos viscosos perto da região da parede, inclusive apontando que o modelo de Taylor (1954) só seria válido para Reynolds > 20 000 e fluidos com número de Schmidt igual a 1. Patrachari elaborou um modelo baseado nos de Taylor (1953, 1954) acrescentando o efeito da subcamada viscosa no coeficiente de dispersão axial.

Patrachari (2012) comenta que as observações de Austin e Palfrey (1964) podem ser justificadas através do efeito da camada subcamada viscosa. Em um escoamento laminar totalmente desenvolvido, a subcamada viscosa compreende toda a seção transversal do duto. Isso muda conforme o escoamento entra na faixa de transição e turbulência. A espessura da subcamada viscosa diminui como

função hiperbólica de Reynolds desde o diâmetro do duto tendendo assíntoticamente a zero quando Reynolds vai a infinito. Patrachari sugeriu que este fenômeno é muito similar às observações de Austin e Palfrey (1964) para dispersão axial e que portanto poderia ser um fator determinante para a estimativa da dispersão axial.

O modelo proposto então por Patrachari, (2012) para combinar as contribuições viscosas e turbulentas observadas por Taylor, (1954) foi inspirado na distribuição de tensões de cisalhamento observadas em uma seção transversal em um escoamento turbulento e também na perda de carga proposta por Darcy e estendida por Forcheimer e mais tarde por Ergun (1952) para escoamento turbulento. A tensão cisalhante de um escoamento turbulento pode ser dividida em duas parcelas: tensão cisalhante laminar ou de efeitos viscosos e; tensão cisalhante devido à turbulência. Conforme ilustrado na Figura 4.9, os efeitos viscosos constituem a totalidade da tensão cisalhante na parede e sua contribuição diminui rapidamente em direção ao centro do escoamento. Por outro lado, a contribuição dos efeitos turbulentos vai de zero na parede até seu máximo no centro do tubo. Assim, a tensão cisalhante de um escoamento depende das contribuições viscosas e também turbulentas. Isso é amplamente aceito na literatura e foi confirmado através de diversas investigações experimentais (Pope, 2000).



Figura 4.9 – Perfis de contribuição para a tensão cisalhante dos efeitos viscosos e turbulentos (adaptado de Pope, 2000)

Os efeitos viscosos terão mais contribuição para a dispersão axial em escoamentos turbulentos de baixo Reynolds quando comparados com escoamentos de alto Reynolds. Isso vai ao encontro das observações experimentais levantadas por autores como Levenspiel, (1958) e Austin e Palfrey, (1964). Ergun, (1952) propôs o conceito de estimar os coeficientes na equação de Darcy-Forchheimer considerando as contribuições dos efeitos viscosos e turbulentos no sistema.

Patrachari, (2012) introduziu as contribuições viscosas e turbulentas ao coeficiente de dispersão fazendo uma analogia com o trabalho de Ergun, (1952) para perda de carga. De maneira análoga, o coeficiente de dispersão axial efetivo pode ser determinado como:

$$K_E = (1 - a_\delta)K_V + a_\delta K_T \tag{70}$$

Na equação acima, a_{δ} é o parâmetro que representa a contribuição do coeficiente de dispersão turbulento (K_T) no coeficiente de dispersão axial efetivo (K_E). O valor de a_{δ} é determinado através da fração da área do escoamento onde os efeitos viscosos contribuem significativamente para a dispersão. O coeficiente de dispersão laminar de Taylor (equação 41) é usado para representar as contribuições viscosas, enquanto que o coeficiente de dispersão turbulento de Taylor (equação 45) é usado para a parcela turbulenta da dispersão.

$$K_V = \frac{R^2 u_0^2}{192D} = \frac{R^2 \overline{U}^2}{48D} \tag{71}$$

$$K_T = 3,57 \ d\overline{U}\sqrt{f} \tag{72}$$

A região viscosa de um escoamento turbulento ocupa um espaço anular que vai da parede do tubo até uma determinada espessura do escoamento. A espessura adimensional da subcamada viscosa em unidade de parede $(y_{\delta_v}^+)$ é igual a 5 (Pope 2000). A partir deste valor a espessura da camada limite pode ser calculada como

$$\delta_{\nu} = \frac{y_{\delta_{\nu}}^{+} v}{u_{\tau}}$$
(73)

sendo a fração da área a_{δ} igual a

$$a_{\delta} = \frac{A_{\delta}}{A_d} = \left[1 - \frac{\delta_{\nu}}{R}\right]^2 \tag{74}$$

No entanto, a área transversal determinada considerando $y_{\delta_v}^+ = 5$ não necessariamente cobre a região toda onde os efeitos viscosos são consideráveis. É comumente aceito que os esforços turbulentos e viscosos têm contribuição equivalente até a distância da parede igual a $y_{\delta_v}^+ = 12$, sendo que as contribuições viscosas estão presentes até valores de y^+ mais altos de 30 até 50 (Pope, 2000). Portanto, o valor de $y_{\delta_v}^+ = 30$, é o valor geralmente aceito para a espessura da camada, e foi o selecionado para o modelo (Pope 2000).

A equação de Taylor para K_V é baseada no perfil de velocidade laminar parabólico reinante ao longo de toda a secção transversal. Essa expressão

precisa ser modificada para ser utilizada para calcular a dispersão somente na região da sub camada viscosa da secção transversal. Dessa forma, assumindo que a velocidade máxima a ser utilizada na correlação, corresponde a velocidade reinante na borda da camada viscosa u_{δ} , quando $y_{\delta_v}^+ = 30$, o coeficiente de dispersão viscoso passa a ser

$$K_V = \frac{R^2 u_{\delta}^2}{192D} \tag{75}$$

Um valor aproximado para esta velocidade pode ser calculado usando a lei de potência $(1/n_u)$ de Prandtl para o perfil de velocidade (cuja definição em função do fator de atrito já foi apresentada na equação 57).

$$u_{\delta} = u_o \left(\frac{\delta_v}{R}\right)^{1/n_u} \tag{76}$$

A equação 75 descreve o coeficiente de dispersão para um escoamento de velocidade u_{δ} em um duto de diâmetro 2R. Essa equação superestima o valor da contribuição viscosa ao coeficiente de dispersão e precisa portanto ser corrigida para representar corretamente a dispersão na região anular. Isso pode ser feito corrigindo a velocidade da equação 75 usando uma razão do Reynolds do limite da subcamada viscosa com o Reynolds geral conforme apontado por Patrachari, (2012).

$$\frac{u_{\delta,corr}}{u_o} = \frac{u_\delta}{u_o} \frac{Re_\delta}{Re_d}$$
(77)

onde Re_{δ} é número de Reynolds baseado na espessura da subcamada viscosa e Re_{d} é o número de Reynolds normal baseado no diâmetro do duto.

$$\frac{u_{\delta,corr}}{u_o} = \frac{u_\delta}{u_o} \frac{u_\delta}{\overline{U}d}$$
(78)

Manipulando a equação 78 em conjunto com as equações 56 e 76 podemos obter a expressão mais conveniente para $u_{\delta,corr}$:

$$\frac{u_{\delta,corr}}{\bar{U}} = \frac{1}{2} \left(\frac{(n_u + 1)(2n_u + 1)}{2n_u^2} \right)^2 \left(\frac{\delta_v}{R} \right)^{1 + \frac{2}{n_u}}$$
(79)

Assim, a equação 75 pode ser reescrita substituindo a velocidade corrigida encontrada acima para a forma final do coeficiente de dispersão devido a efeitos viscosos.

$$K_V = \frac{R^2 u_{\delta,corr}^2}{192D} \tag{80}$$

A expressão de Taylor para o coeficiente de dispersão em escoamentos

turbulentos pode ser usada em sua forma original, conforme apresentado na equação 45 com o fator de atrito calculado usando a expressão de Swamee-Jain (1976),

$$f = 0.25 / \left(log_{10} \left(\frac{\varepsilon}{3.7 d} + \frac{5.74}{Re^{0.9}} \right)^2 \right)$$
(81)

O uso do diâmetro da tubulação para avaliar a dispersão turbulenta poderia ser apontado como motivo, apresentada na equação (81) para esta expressão superestimar as contribuições turbulentas para a dispersão. Contudo, essa diferença entre o diâmetro do duto e o diâmetro da parte turbulenta pode ser considerada desprezível considerando que a espessura da região viscosa δ_v é muito menor do que o diâmetro. A expressão final para o coeficiente de dispersão axial adimensional e dada abaixo:

$$\frac{K_E}{\overline{U}d} = \frac{(1-a_\delta)}{\overline{U}d} K_V + \frac{a_\delta}{\overline{U}d} K_T$$
(82)

A Figura 4.10 ilustra a contribuição das duas parcelas da equação acima em função do número Reynolds de uma mistura 50-50 por volume dos fluidos que formam a interface.

Analisando a Figura 4.10, observa-se que na região de baixo Reynolds $(2300 \le \text{Re} \le 10000)$, a parcela da dispersão viscosa constitui praticamente a totalidade do coeficiente de dispersão efetivo. Conforme Reynolds aumenta, a magnitude da contribuição do termo viscoso diminui gradualmente. Em altos Reynolds, o termo da dispersão turbulenta aumenta, até constituir a totalidade do coeficiente de dispersão axial, quando Reynolds está na ordem de 100.000.

Patrachari (2012) conduziu uma análise comparando as previsões de seu modelo de dispersão com os dados disponíveis na literatura, para o comprimento da região da mistura. Para determinar este comprimento, Patrachari utilizou o coeficiente de dispersão que propôs para resolver a equação 26 e determinou os comprimentos de região de mistura de acordo com as linhas de corte estabelecidas nos experimentos disponíveis na literatura.

Segundo Patrachari (2012), o novo modelo desenvolvido por ele, prevê a dispersão axial muito melhor do que o modelo original de Taylor (1954) em baixos Reynolds e seu desempenho pode ser comparada ao de Austin e Palfrey (equações 49, 50 e 51). Patrachari (2012) concluiu também ao longo de sua comparação com dados disponíveis na literatura que a diferenciação feita por Austin e Palfrey pelo diâmetro do duto estava incorreta. O modelo de Patrachari (2012) se mostrou robusto para prever a dispersão axial com poucos desvios quando comparado com

dados abrangendo uma variedade de número de Reynolds (da ordem de 3000 a 100,000) e diâmetros diferentes (0,375" a 40").



Figura 4.10 – Contribuições viscosas e turbulentas ao coeficiente de dispersão axial efetivo adimensional (adaptado de Patrachari, 2012)

4.7 Avaliação das Correlações para Diferentes Regimes de Escoamento

Como mostrado nas secções anteriores deste capítulo, existem diversas correlações para a determinação do coeficiente de dispersão axial. Na presente seção, uma análise preliminar do comportamento destas correlações é apresentada de forma a selecionar as correlações a serem utilizadas com o modelo desenvolvido neste trabalho. Incialmente investiga-se influência do número de Schmidt no coeficiente de dispersão, e a seguir apresenta-se uma análise comparativa entre as diferentes correlações.

Uma operação real de um oleoduto compreende vazões que vão de zero até as vazões operacionais normais, resultando em velocidades que vão de zero até valores da ordem de grandeza de 1 m/s. Oleodutos que transportam produtos derivados claros de petróleo têm interesse especial para este trabalho, já que são os dutos que mais são impactados pelo fenômeno da dispersão axial. Estes combustíveis têm especificações bem delimitadas e a mistura ao longo de dutos causa prejuízos e requer cuidados operacionais para evitar contaminações de tanques. Estes produtos apresentam valores médios com poucos desvios quanto à massa específica e viscosidade, que são as características físico-químicas que influenciarão na dispersão axial. Tipicamente sua massa específica está na faixa entre 700 e 900 kg/m³ e sua viscosidade dinâmica a 20 °C entre de 0,4 cP a 9 cP. Ao calcular estes valores, observamos que os números de Reynolds envolvidos em um mesmo escoamento (com diferentes vazões) passam desde o regime laminar, até o regime turbulento de alto Reynolds.

Diante do exposto no parágrafo anterior, investigou-se o desempenho dos coeficientes de dispersão axial para toda a faixa de número de Reynolds encontrado nas aplicações práticas. Os limites de cada regime de escoamento foram determinados considerando os estudos anteriores de Fowler e Brown (1943) que demonstraram que a transição para o regime turbulento no fenômeno da dispersão axial acontece próximo do número de Reynolds 2300 e de Baptista et al. (2001) que consideraram uma região de transição entre Reynolds 1000 a 2300. Dessa forma, abaixo de Reynolds 1000 foi considerado o escoamento laminar puro.

A maior parte dos trabalhos disponíveis na literatura visa estabelecer correlações para o coeficiente de dispersão axial em regimes turbulentos. Para o regime laminar, a literatura recomenda ainda o modelo tradicional de Taylor (1953). Para o regime de transição entre o escoamento laminar e turbulento, foi desenvolvida neste trabalho uma metodologia que permite uma transição suave entre os valores de K_E entre os regimes laminar e turbulento, considerando os valores do coeficiente de dispersão calculados para Reynolds 1000 (Taylor, 1953) e 2300 (para cada correlação). Considerando a seguinte relação entre o coeficiente de dispersão axial e o número de Reynolds

$$K_E = \alpha \, R e^\beta \tag{83}$$

Os coeficientes α e β podem ser determinados aplicando as correlações para regime laminar para Re=1000 e turbulento para Re=2300.

$$K_{\rm La,1000} = \alpha \ 1000^{\beta} \tag{84}$$

$$K_{\rm Tu,2300} = \alpha \ 2300^{\beta}$$
 (85)

resultando em

$$\beta = \frac{ln \binom{K_{\text{La},1000}}{K_{\text{Tu},2300}}}{ln \binom{1000}{2300}}$$
(86)

$$\alpha = \frac{K_{\text{La},1000}}{1000^{\beta}} \tag{87}$$

A Tabela 4.3 resume as correlações selecionadas para serem investigadas de forma a abranger todas as faixas de número de Reynolds.

Para as correlações que são função do fator de atrito, foi utilizada a

58

expressão explícita de Swamee-Jain (1976), apresentada na equação 81.

Tabela 4.3 – Correlações para o coeficiente de dispersão axial implementadas po	r
regime de escoamento	

Laminar	Transição	Turbulento		
$Re \le 1000$ $K_S = \frac{K_E}{\overline{U}d}$	<i>Re</i> > 1000 e <i>Re</i> < 2300	$Re \ge 2300$ $K_s = \frac{K_E}{\overline{U}d}$		
		Taylor, (1954) 3,5	$7\sqrt{f}$	
		Levenspiel, (1958) e^{ω}	; ω(Re)	
		Austin e Palfrey, (1964)		
Taylor (1953)		Re < Re _c	$Re \geq Re_c$	
$d \ \overline{U}$	αRe^{β}	$7,84 \times 10^6 e^{2,42\sqrt{d}} Re^{-1,8}$	$3,188 \ Re^{-0,2}$	
192D		Krantz e Wasan, (1974)	α Re ^β	
		Udoetok e Nguyen, (2009)		
		$0,023\left(\frac{L}{d}\right)\left(1-\left(1-\left(\frac{0,585\times 2{n_u}^2}{(n_u+1)(2n_u+1)}\right)^{n_u}\right)^2\right)$		
		Patrachari, (2012) $K_E = (1 - a_\delta)K_V + a_\delta K_T$		

4.7.1 Correlações selecionadas

De acordo com o apresentado nas seções anteriores, ficou claro, que nem todas as correlações para avaliar o coeficiente de dispersão axial dependem do número do Schmidt. Também ficou claro que este é um parâmetro que precisa ser levando em consideração para uma boa representação da dispersão axial.

Nesta seção, as correlações que envolvem o número de Schimdt e consequentemente, o coeficiente de difusão molecular de massa foram selecionadas.

Para o regime laminar, aparentemente, existe um consenso de que a expressão de Taylor (1953) para o coeficiente de dispersão axial (equação 41), a qual depende do coeficiente de difusão molecular (*D*) é adequada, e portanto foi a única expressão levantada neste trabalho.

Para o regime turbulento, a expressão de Patrachari (2012) depende do

coeficiente de difusão molecular, assim como a correlação de Krantz e Wasan (1974). Levenspiel (1958) traçou uma curva média para a região de baixo Reynolds, ficando assim independente do coeficiente de difusão molecular e portanto, do número de Schmidt. Austin e Palfrey (1964) estabeleceram suas correlações em função apenas do número de Reynolds e as separaram pelo diâmetro do duto, Udoetok e Nguyen, (2009) estabeleceram uma correlação simples apenas em função do comprimento, diâmetro e perfil de velocidade, estando ambas assim também independentes de Schmidt.

Tendo em vista os argumentos apresentados neste trabalho, 3 correlações foram selecionadas para serem testadas com os dados de campo: Patrachari (2012), Krantz e Wasan (1974) e Levenspiel, (1958).

- Patrachari (2012), desenvolveu uma correlação baseado nas expressões de Taylor (1954), dependendo também do fator de atrito e do número de Schmidt;
- Krantz e Wasan (1974) relacionaram suas correlações em curvas em função do número de Reynolds para diferentes números de Schmidt;
- Levenspiel (1958) apontou que o coeficiente de dispersão axial deveria depender do número de Schmidt, especialmente para baixos Reynolds. Contudo, não contava com dados experimentais o suficiente para especificar tal relação e portanto desenvolveu correlação empírica mais simples, em função apenas do número de Reynolds para baixos Reynolds.

Como já mencionado, para todos os casos analisados, a correlação de Taylor (1953) foi considerada para o regime laminar (Re < 1000). Para o regime de transição, interpolações foram realizadas entre a correlação de Taylor e a correlação de interesse.

Para determinar o número de Schimdt (Sc = v/D) é necessário conhecer o coeficiente de difusão de massa molecular D entre os dois produtos. A difusão molecular em líquidos apresenta coeficientes com valores notavelmente próximos de $10^{-9} m^2/s$, conforme apontado por Cussler, (2009). Isso é verdade para solventes comuns orgânicos, mercúrio e até ferro fundido. Cussler explica que essa faixa estreita de valores para a difusão molecular em líquidos é explicada pela pouca variação da viscosidade cinemática dos líquidos e pela pouca dependência do coeficiente de difusão com o tamanho do soluto. Tipicamente, coeficientes de difusão em líquidos são cerca de dez mil vezes menores do que os coeficientes de difusão para gases. Por exemplo, considere benzeno

difundindo em ciclo-hexano com um coeficiente de difusão de cerca de $2 \times 10^{-5} cm^2/s$. Se no tempo zero as substâncias entram em contato, depois de um segundo, devido ao fluxo de difusão, o comprimento da região onde uma espécie se difundiu na outra corresponde a 0,004 cm, comparado com 0,3 cm que ocorreria para gases. Após 1 minuto, a penetração de uma espécie na outra é de 0,03 cm, comparado com 4 cm para gases. Depois de 1 hora, é 0,3 cm comparado com 30 cm.

Diversos investigadores derivaram correlações para o coeficiente de difusão molecular para quando o soluto e solvente são de tamanhos similares. Estes demonstram impressionante similaridade a equação de Stokes-Einstein. Quase todas as correlações apresentam a mesma dependência com a temperatura e viscosidade. A correlação de Wilke-Chang (1955) permite uma rápida estimativa do coeficiente de difusão molecular.

$$D = 7.4 \times 10^{-8} (\emptyset M_B)^2 T / \mu \,\forall_{mol,A}^{0.6}$$
(88)

onde *D* é o coeficiente de difusão do soluto "A" em cm^2/s ; M_B é o peso molecular do solvente "B" em daltons; *T* é a temperatura absoluta em K; μ a viscosidade dinâmica em centipoise do solvente e $\forall_{mol,A}$ é o volume molar do soluto em cm^3/mol . O parâmetro Ø é 1 para a maior parte dos solventes orgânicos, 1,5 para álcoois e 2,6 para água.

Hayduk & Minhas (1982) desenvolveram uma correlação específica para misturas binárias de hidrocarbonetos. Esta foi desenvolvida utilizando dados capturados para soluções contendo parafinas normais de C_5 a C_{32} e segundo seus autores, apresenta erro médio com relação a dados experimentais de 3,4%. A correlação de Hayduk & Minhas (1982) estabelece que:

$$D = 13.3 \times 10^{-8} T^{1,47} \mu^{\left(\frac{10.2}{\forall_{mol,A}} - 0.79\right)} \forall_{mol,A}^{-0.71}$$
(89)

Ambas correlações apresentam valores para o coeficiente de difusão da mesma ordem de grandeza, para o coeficiente de difusão molecular, utilizando os dados típicos para derivados de petróleo claros. A correlação de Hayduk & Minhas (1982) foi escolhida para este estudo por ser mais específica, mais recente e por reivindicar menor erro médio quando comparada com dados experimentais, segundo seus autores. Como simplificação, foram adotados pesos moleculares médios para os combustíveis transportados, conforme Tabela 4.4.

O volume molar pode ser determinado através do peso molecular e da massa específica do produto (ou da mistura), conforme apresentado na equação 90.

$$\forall_{mol} = M_{mol} / \rho \tag{90}$$

onde

$$\rho = C_A \,\rho_A \, + C_B \rho_B \tag{12}$$

Para fins de simplificação, foram adotadas as massas e volumes moleculares médios em uma mistura 50-50 para todo o domínio, e em todas as análise realizadas.

Produto	Composição média	Peso molecular
Gasolina	$C_{7,2}H_{12,6}$	99 g/mol
Diesel	$C_{12}H_{26}$	170 g/mol
Etanol (Anidro e Hidratado)	$C_2H_6O_1$	46 g/mol

Tabela 4.4 – Pesos moleculares médios adotados

4.7.2 Comparação entre correlações para o coeficiente de dispersão axial

As figuras apresentadas nesta seção trazem gráficos que ilustram as correlações para o regime de escoamento turbulento em conjunto com a correlação de Taylor (1953) para o regime laminar e uma interpolação para a faixa de transição de acordo com o descrito na Tabela 4.3.

As correlações de Austin e Palfrey, (1964), Udoetok e Nguyen, (2009) e Taylor para regime turbulento independem do número de Schmidt. Uma comparação entre estas correlações é apresentada na Figura 4.11, para mostrar a divergência de seus resultados para o regime turbulento correspondente a região de baixo Reynolds, a qual é crítica quando se deseja analisar processos de partida e parada de escoamento. Por esta razão foram descartadas nas análises seguintes.

A Figura 4.12 e a Figura 4.13 apresentam a variação das 3 correlações selecionadas no item anterior em função do número de Reynolds. Nestas figuras, Krantz e Wasan (indicada apenas como "Krantz") e Patrachari foram calculadas para o número de Schmidt 100 e 1000, respectivamente. A correlação de Levenspiel (dependente apenas do número de Reynolds) é apresentada em conjunto nos dois gráficos. Observa-se para *Sc* =100, excelente concordância entre as correlações de Patrachari e Levenspiel, sendo que para altos Reynolds,

a correlação de Krantz e Wasan fornece um coeficiente de dispersão axial menor.

Já, para Sc = 1000, para praticamente toda a faixa de número de Reynolds turbulento, a correlação de Krantz e Wasan fornece um coeficiente de dispersão menor, sendo menos conservadora. A correlação de Levenspiel, como é independente de Schmidt, apresenta os mesmos resultados do gráfico anterior, apresentando valores inferiores para o coeficiente de dispersão axial.



Figura 4.11 – Correlações de Taylor, Austin & Palfrey (d=8") e Udoetok & Nguyen para o coeficiente de dispersão axial na região turbulenta



Figura 4.12 – Correlações de Levenspiel, Krantz e Wasan e Patrachari para o coeficiente de dispersão axial com Schmidt = 100



Figura 4.13 – Correlações de Krantz e Patrachari para o coeficiente de dispersão axial com Schmidt = 1000.

A Figura 4.14 apresenta as curvas fornecidas por Krantz e Wasan (1974) para o coeficiente de dispersão em função do número de Reynolds para os números de Schmidt 100 e 1000, conforme seu trabalho. Nota-se uma suave dependência de Schmidt entre estas curvas na região de escoamento turbulento de baixo Reynolds.



Figura 4.14 – Correlação de Krantz e Wasan para o coeficiente de dispersão axial com Schmidt = 100 e 1000.

A Figura 4.15 apresenta a influência do número de Schmidt na correlação de Patrachari, onde a variação do coeficiente de dispersão axial com o número de Reynolds é apresentada para os números de Schmidt 100, 1000 e 5000, a partir da correlação fornecida. Nesta figura, é possível observar como alto número de Schmidt indica baixa difusividade molecular e portanto, maior mistura em escoamentos de baixo Reynolds.



Figura 4.15 – Correlação de Patrachari para o coeficiente de dispersão axial com Schmidt = 100, 1000 e 5000.

5 Método Numérico

A equação para prever a distribuição de concentração do produto A (equação 21) apresentada no Capítulo 3 foi resolvida numericamente com o método de volumes finitos. Este método consiste em dividir o domínio computacional em volumes de controle (Patankar, 1980) e integrar a equação governante em τ (posição adimensional da interface) e no *y* distância adimensional à interface, em cada volume de controle, gerando um sistema algébrico para a determinação da variável de interesse.

A Figura 5.1 apresenta um esquema da malha aplicada ao problema com os pontos nodais, o volume de controle e suas fronteiras indicadas. O ponto nodal principal é indicado com o símbolo P, e possui vizinhos leste E e oeste W, respectivamente. As faces são indicadas com letras minúsculas.



Figura 5.1 - Esquema da malha aplicada ao problema

Foi elaborada uma malha variável no domínio de y, elaborada mais fina próxima ao centro da região de mistura, onde se inicia a dispersão. Para a distribuição da malha, especificou-se inicialmente as faces dos volumes de controle e em seguida os pontos nodais foram definidos no centro dos volumes.

Para a integração em τ , foi utilizado o método de segunda ordem de Crank-Nicolson e para a integração espacial foi utilizada a aproximação de segunda ordem de diferenças centrais (Patankar, 1980). Para lidar com a coeficiente de difusão variável, os seus respectivos valores foram avaliados nas faces dos volumes de controle, utilizando o conceito de resistência equivalente, resultando na seguinte equação discretizada

$$a_P C_P = a_E C_E + a_W C_W + b \tag{91}$$

$$a_{E} = \frac{1}{2} \frac{(2 K_{P} K_{E})}{K_{P} \Delta y_{E} + K_{E} \Delta y_{P}} \qquad a_{W} = \frac{1}{2} \frac{(2 K_{P} K_{W})}{K_{P} \Delta y_{W} + K_{W} \Delta y_{P}}$$
(92)

$$a_{E}^{o} = \frac{1}{2} \frac{(2 K_{P}^{0} K_{E}^{0})}{K_{P}^{0} \Delta y_{E} + K_{E}^{0} \Delta y_{P}} \qquad a_{W}^{o} = \frac{1}{2} \frac{(2 K_{P}^{0} K_{W}^{0})}{K_{P}^{0} \Delta y_{W} + K_{W}^{0} \Delta y_{P}}$$
(93)

$$a_P^o = \frac{\Delta y_P}{\Delta \tau} - a_E^o - a_W^o \tag{94}$$

$$b = a_P^o C_P^o + a_E^o C_E^o + a_W^o C_W^o$$
(95)

$$a_{P} = a_{E} + a_{W} + a_{E}^{o} + a_{W}^{o} + a_{p}^{o}$$
(96)

Nas equações acima, o subcrito *0* indica valores conhecidos do instante de tempo anterior. A ausência de subscritos corresponde ao tempo presente para o qual a solução está sendo obtida.

Uma vez que o sistema algébrico resultante é formado por uma matriz trldiagonal, este foi resolvido diretamente pelo algoritmo de Thomas ou TDMA (*Tridiagonal Matrix Algorithm*), Patankar, 1980). A plataforma escolhida para a implementação da metodologia foi o *software* comercial Matlab, versão R2015a.

O algoritmo numérico implementado foi verificado através de soluções manufaturadas (Roache, 1998), que permitiram comparar resultados calculados numericamente com os resultados esperados, demonstrando que a ordem de precisão desejada foi obtida.

Uma vez que o comprimento da região de mistura apresenta ordem de grandeza inferior a ordem de grandeza do comprimento da tubulação, visando otimizar a metodologia e aumentar a precisão, definiu-se um tamanho de domínio computacional bem menor do que o que seria necessário para analisar toda a tubulação.

Os valores escolhidos como limites para o domínio *y* correspondem a 1% do comprimento do duto para cada lado partindo do centro da interface. Este valor foi determinado após a realização de testes em simulações de casos reais, de tal forma que independência no valor do volume de mistura final fosse obtida. Nos testes realizados, determinou-se o comprimento do volume de mistura entre as concentrações $C_{A,corte} = C_{B,corte} = 2\%$. A tabela 5.1 apresenta os valores obtidos para o volume de mistura, para um caso típico, variando o tamanho do domínio computacional e número de pontos. Pode-se observar que o comprimento do domínio igual a 0,1% *L* é muito pequeno, influenciando nos resultados. Observa-se

ainda que a solução torna-se independente da malha, a partir de 1000 pontos nodais, para um domínio com comprimento igual a 1% L.

	Volume de mistura (m³)		
Comprimento do domínio	500 Pontos	1000 Pontos	2000 Pontos
1 % <i>L</i>	33,24	34,04	34,04
0,1 % <i>L</i>	34,09	33,98	33,92

Tabela 5.1 – Teste de malha para volume de mistura (m³)

O valor de 1000 para o número de pontos (N) para a malha se mostrou eficaz para a todos os casos e foi assumido como padrão. A Figura 5.2 apresenta a malha testada que se mostrou mais eficaz para a solução do problema. É apresentada nesta figura a distância ao centro da interface para cada ponto da malha.



Figura 5.2 - Distância adimensional ao centro para cada ponto da malha

A especificação da velocidade variável na entrada, em função do tempo, é fornecida ao programa em forma de tabela, a qual é lida no início da simulação. Se o valor da vazão na entrada for alterado, a tabela possuirá uma nova entrada de dados, i.e., o instante da alteração e o valor correspondente da vazão.

A velocidade (\overline{U}) para o τ atual da simulação e o passo da variável τ $(d\tau)$ são calculados a partir dos dados fornecidos na tabela de vazão no tempo. O passo de τ ($\Delta \tau$) é determinado em função da vazão e do tempo entre medições de vazão, subdividindo o intervalo de tempo entre medições em 10 intervalos ou 100 intervalos, quando a velocidade do escoamento for inferior a 0,5 m/s. Este critério para determinar o passo $d\tau$ foi definido após a realização de testes que mostraram que intervalos $d\tau$ inferiores a estes não alteravam o resultado. Verificou-se ainda se a condição de coeficientes positivos foi garantida (Patankar, 1980), de forma a obter soluções estáveis, com

$$\Delta \tau \le \frac{\Delta y_P}{a_E^o + a_W^o} \tag{97}$$

Com o objetivo de estabelecer a velocidade correspondente a τ , a tabela fornecida para vazão ao longo do tempo é percorrida para identificar o instante de tempo correspondente, o qual é obtido através de integração dos dados disponíveis. Foi implementada uma interpolação linear para estabelecer as velocidades em passos de τ intermediários às medições dos instrumentos.

A simulação se inicia em $\tau = 0$ e avança em passos ($d\tau$) até $\tau = 1$, que corresponde a chegada da interface ao final do duto.

Uma vez que o coeficiente de dispersão axial é função do número de Reynolds e Schmidt, estes são calculados para cada ponto nodal da malha (em y) com índice P, a cada passo de τ como

$$Re_{P} = \frac{\rho_{P} \,\overline{U} \,d}{\mu_{P}} \qquad \qquad Sc_{P} = \frac{\mu_{P}}{\rho_{P} \,D_{P}} \tag{98}$$

sendo a massa específica e viscosidade dinâmica da mistura obtidas em função da concentração e propriedades de cada produto,

$$\rho_P = C_P \,\rho_A + (1 - C_P) \,\rho_B \quad ; \qquad \mu_P = \left(C_P \,\mu_A^{1/3} + (1 - C_P) \,\mu_B^{1/3}\right)^3 \tag{99}$$

A partir do número de Reynolds e das propriedades dos produtos, o coeficiente de dispersão axial é determinado dependendo da correlação escolhida, conforme descrito em detalhes no Capítulo 4.

Para simular a operação do deslocamento de uma interface ao longo do comprimento completo do oleoduto (*L*), é necessário entrar com um histórico de vazão compreendendo do instante em que a interface começa a passar pelo densímetro de envio até o instante em que termina de passar pelo densímetro do recebimento.

Assim, o programa desenvolvido tem como dado de entrada a vazão ao longo do tempo, e esta é transformada em velocidade para ser utilizada no equacionamento proposto, conforme equação 13. Como mencionado, no Capítulo 3, a velocidade média do fluido ao longo da seção transversal é considerada

constante ao longo do espaço, o que foi fundamental para solucionar o problema com o equacionamento proposto. Considerando que a região de mistura se desenvolverá em um comprimento da ordem de centenas de metros, esta simplificação é aceitável para os resultados esperados.

Uma vez que a metodologia descrita no Capitulo 3 não considera difusão quando a vazão é nula, se houver uma parada, o passo da variável de $d\tau$ é nulo, apesar do tempo real avançar, até ocorrer uma alteração da vazão na entrada, quando uma nova solução será obtida para um avanço em τ de $d\tau$.

6 Validação

Este capítulo apresenta os resultados da metodologia, modelo e método matemático desenvolvidos comparados com dados da literatura e em seguida, dados reais de campo. As propriedades dos produtos são apontadas para a condição de referência 1 atm e 20°C. Os diâmetros apontados correspondem ao diâmetro nominal.

6.1 Validação do método numérico para escoamento com velocidade constante

Este capítulo apresenta dois testes de validação do modelo desenvolvido. Em ambos os casos, o produto A encontra-se escoando ao longo do duto, e a partir do instante inicial da análise, o produto B é inserido na tubulação. O primeiro teste consiste do caso clássico de escoamento de dois produtos com velocidade constante. Os resultados obtidos são comparados com a solução analítica do problema descrita na seção 3.3. No segundo teste, a formulação transiente é testada, através da ocorrência de parada e partida de escoamento. Neste caso, os resultados obtidos são comparados com os resultados numéricos de Baptista et al. (2001).

Nos dois casos, utilizou-se a mesma configuração de duto e produtos que os utilizados no trabalho de Baptista et al. (2001). Considerou-se uma tubulação com diâmetro igual a $d = 10^{\circ}$ (25,4 cm) e comprimento igual a L = 199,8 km.

O produto existente na tubulação (produto A) é gasolina e o produto injetado é diesel (produto B). A Tabela 6.1 apresenta as propriedades dos produtos na condição de referência 1 atm e 20°C. Considerou-se um coeficiente de difusão molecular da gasolina no diesel igual a $D = 9 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, o que corresponde a um número de Schmidt referente ao fluido base (produto A – gasolina) igual a Sc=1000.

Visando reproduzir os resultados apresentados por Baptista et al (2001) selecionou-se a correlação de Krantz e Wasan (1974), descrita na seção 4.4, por ter sido empregada em seu trabalho.

Para determinar o comprimento da região de mistura, utilizou-se os seguintes valores de corte de concentração, de forma a garantir qualidade mínima

aceitável de cada produto: $C_{corte,A} = 98\%$ e $C_{corte,B} = 1 - C_{corte,A} = 2\%$. Com estes valores de corte, a região de mistura é simétrica.

	Massa específica	Viscosidade cinemática
	ho (kg/m³)	v (cSt)
Produto A - Gasolina	734	0,9
Produto B - Diesel	833	7,6

Tabela 6.1 - Propriedades dos Produtos

6.2 Escoamento com Velocidade Constante

Para determinar o comprimento da região de mistura, foi imposta uma vazão volumétrica constante na entrada e igual a $Q = 245 \text{ m}^3/\text{h}$. Reynolds foi considerado constante ao longo do comprimento para uma mistura com concentração $C_A = C_B = 0.5$ com propriedades calculadas de acordo com as equações 9 e 10 para esta concentração. Isto foi feito com o objetivo de assumir as mesmas premissas da solução analítica. Com esta vazão e com estas propriedades, o número de Reynolds baseado na viscosidade da mistura deste escoamento é Re = $4 Q/(\pi d \upsilon) = 2.7 \times 10^5$.

Uma vez que a vazão deste exemplo é constante, o coeficiente de dispersão axial adimensional correspondente a correlação de Krantz e Wasan (1974) também é constante (Ks = 2,376).

O campo de concentração foi obtido com 1000 pontos nodais em um domínio com comprimento igual a 2% de *L* e passo de τ igual a 10⁻³.

A Figura 6.1 apresenta uma comparação da distribuição de concentração obtida numericamente com a solução da equação analítica derivada por Taylor (1954), (equação 35) ao longo da coordenada adimensional y. Observa-se o formato simétrico, em forma de "S" da concentração na região de mistura. Observa-se ainda a excelente concordância entre os dois resultados, validando a metodologia implementada.

Considerando-se diferentes valores para a concentração de corte dos produtos A e B, é possível obter qual o volume de mistura correspondente para cada caso. Este resultado é ilustrado na Figura 6.2. Valores de corte simétricos foram considerados em todos os casos, i.e., $C_{corte,A} = 1$ - $C_{corte,B}$. Os resultados obtidos apresentam concordância praticamente perfeita para o volume de mistura numérico quando comparado com os valores obtidos analiticamente.
Baptista et al. (2001) também reproduziram os dados analíticos, indicando perfeita concordância assim como este trabalho.



Figura 6.1 – Comparação da distribuição da concentração ao longo do comprimento adimensional obtida numericamente e a solução analítica



Figura 6.2 – Volume de mistura em função da concentração admissível para caso com velocidade constante. Numérico x Analítico

6.3 Escoamento com Partida e Parada

Este teste de validação tem por objetivo verificar o desempenho do modelo implementado na previsão da região de mistura quando ocorre parada e partida

de escoamento em oleodutos.

Baptista et al. (2001) conduziu 3 simulações diferentes em seu modelo, partindo de um regime permanente com vazão igual a 245 m³/h, variando o número de paradas e partidas ao longo do percurso da interface pelo comprimento do duto. A primeira simulação conta com uma parada, realizada aproximadamente no comprimento L/4. A segunda conta com duas paradas, nos comprimentos L/4e L/2. A terceira, corresponde ao caso com 3 paradas, em L/4, L/2 e 3L/4.

A forma como a velocidade (ou vazão) varia no tempo ao longo das partidas e paradas influencia no acréscimo de mistura provocado por ela. Cada vazão corresponde a um determinado número de Reynolds e portanto a um coeficiente de dispersão axial. Fatores como o procedimento de parada executado pelo operador e propriedades de equipamentos como curva da bomba, coeficiente de vazão e curva de válvulas de controle influenciam diretamente em como a vazão irá variar no tempo. No trabalho utilizado como comparação não são fornecidos dados detalhados de como a vazão varia no tempo para as simulações realizadas. Assim, para realizar as simulações aqui apresentadas, os procedimentos de paradas e partidas foram baseados em um levantamento realizado em um caso real de campo, em um duto com características semelhantes (10" e mesma vazão de regime permanente). Os dados detalhados do histórico de vazão para o caso de 3 paradas são apresentados na Figura 6.3.



Figura 6.3 – Vazão em função do tempo para caso com 3 paradas.

A Figura 6.4 apresenta a velocidade média da interface em função da posição adimensional do centro da interface $\tau = x_m/L$, para o caso com três paradas. Nesta figura é evidente os locais onde três paradas ocorreram ($\tau \approx 0.25$, $\tau \approx 0.55$ e $\tau \approx 0.9$). Observa-se que a velocidade correspondente a regime permanente é rapidamente recuperada após cada parada.



Figura 6.4 – Velocidade ao longo de τ para simulação de 3 paradas

No trabalho desenvolvido por Baptista et al. (2001), é evidenciado um acréscimo no volume de mistura (ou comprimento de mistura) final de aproximadamente 3% quando o duto é parado uma vez, considerando uma concentração máxima admissível de até 2% para cada produto no outro. O trabalho indica também que o aumento deste comprimento de mistura é de aproximadamente 10% quando o duto é parado 3 vezes.

O modelo desenvolvido neste trabalho apresentou resultados coerentes para as simulações que reproduzem o trabalho de Baptista et al, (2001), indicando acréscimo de cerca de 3% na simulação de uma parada, 7% na de duas paradas e 10 % na de três paradas, o que indica uma tendência aproximadamente linear de acréscimo no volume de mistura pelo número de paradas e independência quanto ao local da parada e partida, assim como pode ser observado no trabalho de Baptista et al, (2001).

A Figura 6.5 apresenta a variação do coeficiente de dispersão adimensional, $K_S = K_E/(d \overline{U})$, correspondente à posição y = 0 ao longo de τ . Observa-se claramente picos do coeficiente de dispersão correspondentes a cada parada. Na condição de escoamento de velocidade constante, o escoamento é turbulento, sendo o número de Reynolds corresponde a 10⁶. Quando ocorre uma parada, o regime passa de turbulento para laminar, e como ilustrado na seção 4.7, o coeficiente de dispersão axial cresce significativamente (Figura 4.13), causando um aumento significativo da mistura.

A Figura 6.6 apresenta o perfil de concentração do produto A (*C*) ao longo do duto (coordenada adimensional centrada na interface, $y = (x - x_m)/L$), na região próxima à interface. Neste gráfico compara-se o perfil de concentração obtido com as três paradas, com o perfil caso não houvesse nenhuma parada, e



o produto B fosse continuamente introduzido no duto com velocidade constante.

Figura 6.5 – Coeficiente de dispersão adimensional ao longo de τ para o caso de 3 paradas.



Figura 6.6 – Velocidade ao longo de τ para o caso de 3 paradas.

Observa-se na Figura 6.6, um aumento da mistura tanto a montante quanto a jusante do centro da interface, com uma pequena assimetria da curva de concentração resultante, resultado da diferença entre os coeficientes de dispersão axial ao longo do comprimento. Apesar da diferença entre os perfis ser relativamente pequena, o reflexo no volume final de mistura pode ser bem significativo. Para este exemplo, o volume final de mistura no caso sem paradas é igual a 34 m³, enquanto que após as três paradas, o volume final de mistura cresceu para 37,4 m³, o que implica em perdas do ponto de vista de eficiência do processo e, naturalmente, em perdas financeiras.

Visando avaliar o reflexo das paradas na mistura dos produtos A e B, apresenta-se na Figura 6.7, o comprimento adimensional de mistura Sy = S/Lpara uma concentração máxima de 2% de cada produto no outro em função da posição adimensional da interface τ . Nota-se um acréscimo significativo no comprimento de mistura na posições $\tau \approx 0.25$, $\tau \approx 0.55$ e $\tau \approx 0.9$, correspondentes a posição da interface nos momentos de paradas. Na mesma curva, a variação do comprimento adimensional da mistura para o caso sem parada é introduzida, ressaltando o fato de que apesar da curva de concentração variar pouco, o reflexo no tamanho da região de mistura é significativo.



Figura 6.7 – Comprimento adimensional de mistura ao longo de τ para simulação de 3 paradas.

Ainda analisando a Figura 6.7, observa-se um aumento vertical de Sy = S/Ldurante a parada. Isto ocorre, pois durante a parada o incremento de τ é nulo, i.e., $d\tau = 0$, pois a velocidade do escoamento é nula. Como já explicado, o aumento da mistura é uma consequência direta do aumento do coeficiente de dispersão, devido as baixas velocidades que ocorrem até atingir a parada do processo, assim como ao reiniciá-lo.

Os resultados obtidos com os dois testes apresentados validam a metodologia, permitindo a aplicação da mesma para analisar casos reais práticos de campo, o que é apresentado no próximo capítulo.

7 Comparação com Dados de Campo

Este capítulo apresenta comparação dos resultados obtidos com o modelo matemático e método numérico apresentados nas seções anteriores desta dissertação, com dados de campo obtidos através de históricos operacionais. Deseja-se prever a mistura interfacial provocada por operações transientes (com vazão variável) durante deslocamento de interfaces ao longo de polidutos.

Durante a passagem de uma batelada por um oleoduto real, a vazão operacional pode sofrer grandes e pequenas variações. Estas variações são extremamente comuns em polidutos longos, nos quais o problema da mistura é de maior interesse.

O oleoduto utilizado para captura dos dados de campo e comparação com os resultados do modelo preenche os pré-requisitos necessários para uma análise eficaz: operação de coluna fechada; instrumentos de vazão com período mínimo de 5 segundos entre aquisições; transporte de uma variedade de produtos claros e troca de tanques no envio com o oleoduto parado.

O poliduto em questão possui diâmetro igual a d = 8", com espessura de parede de 0,188" e rugosidade 0,0018", sendo o comprimento igual a L = 67,164 km. A Figura 7.1 apresenta o perfil de elevação do oleoduto.



Figura 7.1 – Perfil de elevação do oleoduto.

Antes de apresentar os resultados obtidos com o modelo desenvolvido neste trabalho, apresenta-se a metodologia para tratar os dados de campo de forma a ser possível comparar o comprimento da região de mistura e perfil de concentração.

7.1 Metodologia de Tratamento de Dados de Campo

Para comparar os resultados do modelo desenvolvido com dados de campo, é necessário tratar numericamente os dados de campo para o formato das variáveis calculadas.

Os sensores de massa específica e vazão, instalados em linha e localizados no recebimento de um oleoduto medem estas variáveis ao longo do tempo. Um sistema SCADA (*supervisory control and data acquisition*) captura e armazena estas informações conforme configurações programadas. Tipicamente este sistema é configurado para armazenar as informações de acordo com uma banda morta e tempos de aquisição mínimo e máximo configurados. Banda morta é a faixa de variação permitida a uma determinada variável ao longo do tempo que não gera novo registro de medição. Tipicamente, sensores de vazão são configurados com banda morta de 1 m³/h. Sensores de massa específica usualmente apresentam banda morta de 1 kg/m³ a 5 kg/m³. O tempo de registro máximo típico é de 1 hora e o mínimo é da ordem de 5 segundos.

Os valores registrados pelos instrumentos de campo para massa específica e vazão ao longo do tempo representam indiretamente a concentração (C) ao longo do comprimento (y), de acordo com as equações 2, 15 e 16. Como os tempos de aquisição de dados entre os instrumentos são independentes, é necessário cuidado ao interpolar os valores de vazão para obter as posições em y de cada medição de massa específica.

A velocidade da interface é assumida como igual a velocidade do recebimento do duto, ou seja, é assumida a premissa simplificadora de velocidade constante ao longo do espaço.

Os sensores de massa específicas estão sujeitos às variações causadas por pressão e temperatura ao longo do tempo. De modo a simplificar este empecilho para o tratamento dos dados e comparação com os resultados numéricos, estabeleceu-se a seguinte metodologia para identificar os instantes de início e final das regiões de mistura e as massas específicas dos produtos movimentados.

 O instante de tempo em que a região de mistura chega ao recebimento corresponde à primeira medição a partir da qual não há mais registros de massa específica igual à anterior ou em sentido diferente daquele estabelecido entre as massas específicas dos produtos.

- Analogamente, o instante correspondente ao final da passagem da região de mistura pelo sensor de massa específica é o último antes que o registro indique massa específica igual ou em sentido diferente daquele estabelecido pelas massas específicas dos produtos.
- A massa específica registrada para o instante em que a mistura começa a chegar no recebimento é estabelecida como a massa específica do produto "A", *ρ_A*. Analogamente, a massa específica do fim da mistura é considerada como a do produto "B", *ρ_B* (Figura 1.2).

A Figura 7.2 ilustra dados de massa específica no recebimento ao longo do tempo a serem filtrados pelo procedimento acima para separar apenas o período correspondente à chegada da interface. O período correspondente é o período com maior concentração de pontos em torno dos 60 minutos neste gráfico.



Figura 7.2 – Série de dados de campo de massa específica em função do tempo

Assim, estabelece-se uma tabela de *C* em função de *y*, calculada a partir dos dados de campo. Esta tabela é deslocada numericamente de modo que a concentração da posição y = 0 seja igual àquela calculada pelo modelo numérico de modo a compará-las uma sobre a outra.

Este procedimento elimina possíveis erros sistemáticos no instrumento de massa específica, assim como também as variações causadas por pressão e temperatura, já que se medirá a concentração de uma espécie na mistura sob as

mesmas condições (do momento do recebimento da interface).

Assim, as principais incertezas na modelagem do problema se concentram nas medidas do instrumento de vazão (que determina a velocidade ao longo de τ para o transporte da interface) e na viscosidade dos produtos, que influenciará no número de Reynolds e portanto no coeficiente de dispersão axial.

Os históricos de vazão de interesse para transportes de interfaces foram capturados neste trabalho de acordo com a seguinte metodologia: identifica-se o instante de chegada da região de mistura conforme descrito acima, em seguida integra-se numericamente a vazão no tempo em direção ao passado até que o volume acumulado seja igual ao volume total do oleoduto, para identificar o instante de entrada da interface. O instrumento utilizado para a entrada dos dados de vazão ao longo do tempo foi o do recebimento e foi estabelecida a premissa de vazão constante ao longo do domínio *y*. O perfil de concentração ao longo do comprimento adimensional é obtido de acordo com metodologia explicitada acima.

7.2 Dados de Campo para Escoamento de Velocidade Aproximadamente Constante

Uma operação de transporte de uma interface ao longo de um oleoduto com vazão aproximadamente constante durante todo o seu deslocamento igual a $Q \cong 152 m^3/h$, foi utilizada para validar o modelo e a metodologia de captura e comparação dos dados de campo. A Tabela 7.1 apresenta as propriedades dos produtos, sendo o coeficiente de difusão molecular igual a 2,7 x 10⁻⁹ m²/s.

	Massa específica	Viscosidade cinemática
	ho (kg/m³)	v (cSt)
Produto A - Gasolina	726	0,4
Produto B - Etanol Anidro	780	1,2

Tabela 7.1 – Propriedades dos Produtos.	Caso com	Velocidade	Constante
---	----------	------------	-----------

O regime de escoamento correspondente a este caso é turbulento de alto Reynolds, com $Re \cong 2.6 \times 10^5$ sendo $u \cong 1.2 m/s$. Conforme apontado anteriormente, para este alto Reynolds, o número de Schmidt, que neste caso é igual a 354, não influencia no coeficiente de dispersão axial.

A Figura 7.3 apresenta a massa específica capturada em campo no

recebimento do oleoduto em função do tempo a partir do instante em que se detectou a chegada da interface. Neste caso, a região de mistura passou pelo sensor de massa específica em vazão constante de 151,79 m³/h.



Figura 7.3 – Dados de campo para a massa específica em função do tempo

A correlação utilizada inicialmente para o coeficiente de dispersão axial neste caso foi a de Taylor (1954), que para este número de Reynolds indica um coeficiente de dispersão axial $K_S = 0,23$, assim como a correlação de Patrachari (2012).

A Figura 7.4 apresenta o perfil de concentração obtido com a presente simulação em comparação com os dados de campo já convertidos para as variáveis adimensionais do modelo, conforme item 7.1. O perfil corresponde a chegada da interface no recebimento. Observa-se excelente concordância entre os dados de campo e o resultado numérico para a interface na região de *y* positivo. Na região de *y* negativo, a concordância ainda é muito boa, mas observa-se pequenos desvios. Nota-se, no entanto, que para a região de *y* negativo, os dados de campo também apresentam maior espalhamento.



Figura 7.4 – Concentração ao longo do comprimento adimensional para escoamento de velocidade constante (K_s por correlação Taylor 1954)

A Figura 7.5 apresenta o crescimento do comprimento adimensional de mistura em função de τ . Foi considerada uma concentração máxima admissível de 2% entre cada um dos dois produtos para o resultado de $S_y = S/L$ nesta figura. Como a velocidade do escoamento é constante, esta curva se apresenta de forma contínua.

De modo a avaliar com mais detalhes a previsão do modelo desenvolvido (incluindo a premissa de coeficiente de dispersão axial variável ao longo do espaço) em comparação com os dados de campo, será comparado o seu desempenho a uma condição real de corte de interface.

O procedimento de corte de regiões de mistura típico de polidutos é baseado na observação por parte do operador da variação de massa específica ao longo do tempo. Assim, estabelece-se a variável *Lop*, que corresponde ao comprimento (m), compreendido operacional de mistura entre as concentrações correspondentes ao primeiro ponto dos dados de campo com C > 0 e o último com C < 1. Neste caso, as concentrações são 4,53% e 95,93%, correspondentes ao segundo ponto dos dado de campo da esquerda para a direita e da direita para a esquerda, respectivamente, na Figura 7.4. De posse dessas concentrações limites, são calculados os comprimentos operacionais previstos pelo modelo. A Tabela 7.2 apresenta estes comprimentos, onde é possível observar que o modelo prevê o comprimento com um erro menor que 5%.



Figura 7.5 – Comprimento adimensional de mistura em função de τ para escoamento de velocidade constante

Tabela 7.2 –	Comprimentos o	peracionais de	e mistura: rea	al e calculado	com
	correla	ação de Taylor	(1954)		

Série	<i>Lop</i> (m)
Dados de campo	265,4
Modelo com Vazão Aproximadamente Constante	277,1

A Figura 7.6 apresenta o resultado deste mesmo caso utilizando a correlação proposta por Krantz e Wasan (1974). Esta sugere um coeficiente de dispersão axial ($K_S = 0,15$) menor que o da correlação de Taylor (1954) ou Patrachari (2012) para o número de Reynolds deste escoamento (conforme pode ser observado na Figura 4.12), resultando assim em um comprimento de mistura menor. Um desvio significativo maior entre os dados de campo de concentração e os dados numéricos foi obtido com a correlação de Krantz e Wasan (1974) (Figura 7.6) quando comparada os dados obtidos com a correlação de Taylor (Figura 7.4). O comprimento operacional de mistura (*Lop*) calculado utilizando a correlação de Krantz e Wasan para este caso foi de 220,6 m, correspondente a um erro de 17%.



Figura 7.6 – Concentração ao longo do comprimento adimensional para escoamento de velocidade constante (K_s por correlação Krantz e Wasan 1974)

7.3 Operação com 1 Parada de Curta Duração

Nesta simulação, pretende-se validar as observações feitas no item 6.3 com dados reais de campo. As propriedades dos produtos movimentados nesta operação encontram indicados na Tabela 7.3. O coeficiente de difusão molecular é 1,2 x 10⁻⁹ m²/s, o qual corresponde a um número de Schmidt igual 1368. Neste caso selecionou-se a correlação Patrachari (2012).

Tabela 7.3 - Propriedades dos Produtos. Caso com 1 Parada Rápida

	Massa específica	Viscosidade cinemática
	ho (kg/m³)	v (cSt)
Produto A - Diesel	840	3,0
Produto B - Gasolina	726	0,4

Os dados de vazão ao longo do tempo capturados do recebimento do poliduto são apresentados na Figura 7.7. Neste caso, a vazão nominal do escoamento é aproximadamente igual a 150 m³/h. Uma parada relativamente rápida ocorre aproximadamente 11 horas após o início de bombeio do produto B, retornando ao mesmo nível de vazão do início do processo. Cada ponto corresponde a uma medição realizada, a qual é utilizada como dado de entrada para o modelo deste trabalho, em termos de velocidade. A Figura 7.8 apresenta a variação da velocidade do escoamento imposta ao longo do duto, em função da coordenada adimensional τ para este caso.



Figura 7.7 - Vazão de campo ao longo do tempo - 1 parada de curta duração



Figura 7.8 – Velocidade ao longo de τ – 1 parada de curta duração

O perfil de concentração na região de mistura quando esta chega no recebimento é comparado com dados de campo na Figura 7.9. Nesta figura também é incluído o perfil de concentração na região de mistura, na ausência de parada, i.e., com escoamento com velocidade constante, correspondendo a vazão nominal de 150 m³/h. Observa-se excelente concordância entre os resultados numéricos e os dados de campo.

A Figura 7.10 apresenta o comprimento adimensional de mistura (Sy = S/L), onde é possível observar um pequeno incremento no comprimento da mistura devido ao transiente de partida e parada, localizado em $\tau \approx 0,65$. Conforme esperado, de acordo com as observações do item 6.3, o procedimento de parada rápida realizado durante o deslocamento dessa interface provocou sutil diferença no comprimento de mistura.



Figura 7.9 – Concentração ao longo de *y* com 1 parada de curta duração e vazão constante – Correlação Patrachari (2012)



Figura 7.10 – Comprimento adimensional de mistura ao longo de τ com 1 parada de curta duração – Correlação Patrachari (2012)

De modo a avaliar com mais detalhes a previsão do modelo desenvolvido em comparação com o modelo para velocidade constante (incluindo também a premissa de coeficiente de dispersão axial variável ao longo do espaço), será comparado o desempenho deles sob uma condição real de operação. Neste caso, o comprimento adimensional de mistura (*Lop*) é definido entre as concentrações 1,93% e 98,07%, conforme ilustrado nos dados de campo da Figura 7.9. De posse dessas concentrações limites, são calculados os comprimentos operacionais previstos pelo modelo de velocidade variável e de velocidade constante. A Tabela 7.4 apresenta estes comprimentos, onde observa-se um erro de 5% para o caso de vazão constante em relação ao dado de campo. A inclusão da parada no modelo, reduz o erro para a metade. Observa-se que como a curva de concentração tem forma assíntota próxima às regiões de 0% e 100%, uma leve alteração em sua forma provoca grande diferença no comprimento operacional de mistura.

Série	<i>Lop</i> (m)	Erro (%)
Dados de campo	399,7	-
1 parada de curta duração	389,6	2,5
Vazão constante	379,0	5,2

Tabela 7.4 – Comprimentos operacionais de mistura para 1 parada de curta duração

É possível constatar com os dados da Tabela 7.4 que o modelo alimentado com a vazão real variável ao longo do transporte da interface tem desempenho melhor que alimentado com vazão constante, contudo, ambos apresentam erros relativamente baixos.

Com o intuito de avaliar o desempenho de diferentes correlações para o coeficiente de dispersão axial, são apresentados na Figura 7.11 os resultados das simulações realizadas considerando 1 parada rápida, alimentadas com os dados apresentados na Figura 7.7. Selecionou-se para este teste as correlações de Levenspiel (1958) e de Krantz e Wasan (1974) correspondente a número de Schmidt de 1000. Comparando-se a Figura 7.11 com a Figura 7.9, obtida com a correlação de Patrachari (2012), observa-se que esta última correlação apresenta desempenho sensivelmente superior ao desempenho obtidos com as outras duas correlações. O comprimento operacional previsto com a correlação de Levenspiel foi de 352,8 m e com a de Krantz e Wasan foi de 288,9 m, representando erros de 12% e 28%, respectivamente.

O desempenho consideravelmente inferior da correlação de Krantz e Wasan para este caso pode ser explicado devido ao coeficiente de dispersão axial sugerido para a região de alto Reynolds (ver Figura 4.13). Este escoamento apresenta $Re = 1,3 \times 10^5$ quase que em sua totalidade, variando bruscamente apenas durante a parada e partida.



Figura 7.11 Concentração ao longo de *y* com 1 parada rápida. Correlação de Levenspiel e de Krantz e Wasan

7.4 Operação com 1 Parada de Longa Duração

Neste caso, é investigado o efeito de uma parada longa na distribuição da concentração. A variação da vazão de alimentação em função do tempo é apresentada na Figura 7.12, sendo a vazão nominal novamente considerada igual a 150 m³/h. Pode-se observar que há uma parada por volta de 10 horas após o início do processo, a qual dura cerca de 3 horas e meia. A Figura 7.13 apresenta a velocidade de entrada correspondente em função de τ . Os dados dos produtos movimentados são expostos na Tabela 7.5. O coeficiente de difusão molecular é 1,2 x 10⁻⁹ m²/s, correspondente ao número de Schmidt de 1361.

A correlação utilizada neste caso foi a de Patrachari (2012), já que esta apresentou os melhores resultados nas comparações executadas previamente.

Como no caso anterior, os resultados obtidos com o modelo considerando 1 parada longa são comparados com os dados de campo e com a previsão do modelo considerando escoamento com vazão constante, igual ao valor nominal de 150 m³/h. A Figura 7.14 apresenta a comparação destes resultados para o perfil de concentração em função de *y* na região da mistura quando da chegada da região de mistura ao recebimento. Neste caso, observa-se que as previsões obtidas com velocidade constante ou com 1 parada continuam sendo muito próximas. Em *y* positivo, o modelo numérico prevê uma menor mistura, e em *y* negativo, a mistura prevista é maior.



Figura 7.12 - Vazão de campo ao longo do tempo - 1 parada longa



Figura 7.13 – Velocidade ao longo de τ – 1 parada longa

Tabela 7.5 – Propriedades	dos	Produtos.	Caso	com '	1 Parada	Longa
---------------------------	-----	-----------	------	-------	----------	-------

	Massa específica	Viscosidade cinemática
	ho (kg/m³)	v (cSt)
Produto A - Gasolina	729	0,4
Produto B- Diesel	841	3,0



Figura 7.14 - Concentração ao longo de y com 1 parada longa e vazão constante

A Figura 7.15 apresenta o crescimento do comprimento de mistura (Sy=S/L) entre concentrações máximas admissíveis de 2% ao longo de τ . Mais uma vez, observa-se claramente, o aumento do comprimento de mistura no instante da parada. O comprimento previsto para a região de mistura no recebimento é apresentado na Tabela 7.6, juntamente com o comprimento operacional de mistura real, *Lop*, considerando valores de concentração de corte iguais a 2,8% e 98.0%. Observa-se que, mesmo com uma parada de 3 horas e meia, o modelo desenvolvido foi capaz de prever o comprimento operacional de mistura com menos de 1% de erro.

Série	Lop (m)	Erro (%)
Dados de campo	371,1	-
1 parada longa	373,2	0,57
Vazão constante	358,8	3,3

Tabela 7.6 - Comprimentos operacionais de mistura para 1 parada longa



Figura 7.15 – Comprimento adimensional de mistura ao longo de τ para simulação com 1 parada longa

7.5 Operação com 2 Paradas de Longa Duração

Neste caso, pretende-se avaliar o desempenho do modelo em outra operação envolvendo uma parada duradora e uma de curta duração, visando identificar influência do tempo de parada no comprimento de mistura. A correlação utilizada neste caso também foi a de Patrachari (2012).

As propriedades dos produtos movimentados são expostos na Tabela 7.7, sendo o coeficiente de difusão molecular igual a 2,74 x 10⁻⁹ m²/s, correspondendo a um número de Schmidt de 351.

	Massa específica	Viscosidade cinemática		
	ho (kg/m³)	v (cSt)		
Produto A - Etanol Anidro	788	1,2		
Produto B - Gasolina	727	0,4		

Tabela 7.7- Propriedades dos Produtos - Caso com 2 Parada Longas

A Figura 7.16 apresenta a vazão ao longo do tempo desta operação. Podese observar que há uma parada próxima a hora 4 que dura 30 minutos e outra parada por volta da hora 10 que dura cerca de 3 horas. A velocidade de entrada correspondente em função de τ , encontra-se ilustrada na Figura 7.17.



Figura 7.16 – Vazão de campo ao longo do tempo – 2 paradas longas



Figura 7.17 – Velocidade ao longo de τ – 2 paradas longas

O perfil de concentração na região de mistura em função de y, quando esta chega no final do duto, é ilustrada na Figura 7.18. Observa-se que o modelo numérico não conseguiu prever o formato mais suave do perfil de concentração medido experimentalmente. No entanto, uma análise da Figura 7.19, que apresenta o crescimento calculado do comprimento de mistura entre concentrações máximas admissíveis de 2% ao longo de τ , mostra que estas paradas influenciaram pouco o perfil de *Sy* com τ . O incremento localizado, correspondente aos períodos de paradas é praticamente indistinguível.

A Tabela 7.8 apresenta para este caso com duas paradas longas, os comprimentos operacionais de mistura real e calculados pela correlação de Patrachari, (2012). As concentrações limite que definem o comprimento operacional de mistura *Lop* neste caso são de 0,4% e 96,4%. O erro nesta previsão é de apenas 1,9%, mesmo com a perda do formato da curva de

concentração em função do comprimento. Isto se deve à medida realizada na concentração 0,4%. Contudo, se avaliarmos o comprimento operacional de mistura entre os dados de campo correspondentes às concentrações 4,0% e 96,4, este erro aumenta para 15,5%, conforme pode ser observado na Tabela 7.8. Este resultado ressalta a importância da determinação dos valores de corte para estimar o comprimento da região de mistura.



Figura 7.18 – Concentração ao longo de y com 2 paradas longa



Figura 7.19 – Comprimento adimensional de mistura ao longo de τ com 2 paradas longas

	C _{corte} : 0,4% e 96,4%.		C _{corte} : 4%	e 96,4%.
Série	<i>Lop</i> (m)	Erro (%)	Erro (%) <i>Lop</i> (m)	
Dados de campo	374,5	-	346,6	-
2 paradas longas	367,4	1,9	292,3	15,6

Tabela 7.8 – Comprimentos operacionais de mistura para 2 paradas longas.

Voltando a analisar a Figura 7.18, observa-se que o perfil de concentração ao longo do comprimento adimensional (*y*) perdeu sua forma característica em "s" e assumiu uma distribuição praticamente linear. Este caso apresenta um tempo de parada longo da mesma forma que o caso anterior, para o qual o modelo foi capaz de reproduzir os dados de campo. Este resultado sugere a atuação de outro fenômeno na mistura entre os produtos ao longo desta operação que não a dispersão axial regida pela equação 21.

O modelo matemático apresentado no Capítulo 3 pressupõe velocidade constante ao longo do duto e difusão nula quando o fluido está parado. O efeito gravitacional no campo de velocidade e de difusão de massa não é contemplado pelo modelo. Dessa forma, o modelo não calcula a contaminação devido ao efeito da gravidade sob trechos inclinados. De forma a confirmar a influência do termo gravitacional na distribuição da concentração, é interessante determinar a posição na interface ao longo da topografia no momento da parada.

O local de parada pode ser estimado através da integração numérica do instrumento de vazão no tempo (variável x_m , equação 14) a partir do momento em que a interface sai do envio até o momento da parada. O momento em que a interface sai do envio pode ser obtido com exatidão através do instrumento de massa específica do mesmo.

Apresenta-se na Figura 7.20, os locais das interfaces, sob a distribuição topográfica do oleoduto, nos casos de paradas longas (3 horas e meia), correspondentes aos dois casos de paradas longa analisados. Em um caso, a previsão do modelo foi muito boa, e no segundo não foi.

Pode-se observar nesta figura, que a parada do primeiro caso (seção 7.4) ocorre num trecho plano do oleoduto, enquanto que a parada duradora do segundo caso (apresentado nesta seção) ocorre num trecho inclinado. Quando a parada ocorre e a interface encontra-se em um trecho inclinado da topografia (caso 2), o produto A, à frente da interface (região mais alta), possui massa

específica maior (788 kg/m³) enquanto que o produto B apresenta massa específica igual a 727 kg/m³. Estes resultados sugerem a influência do efeito da gravidade sobre o trecho inclinado, promovendo uma mistura que resulta no perfil de concentração apresentado na Figura 7.18.



Figura 7.20 – Perfil de elevação e locais de parada longas do centro da interface – paradas longas: Caso 1 e Caso 2.

7.6 Operação com Vazão Variável sem Paradas

As simulações deste caso foram conduzidas de modo a avaliar o desempenho do modelo quando submetido a uma operação real com variação de vazão, porém sem paradas e partidas. Os dados dos produtos movimentados são expostos na.Tabela 7.9, sendo o coeficiente de difusão molecular igual a 1,2 x 10⁻⁹ m²/s, correspondendo a número de Schmidt 1361.

Та	bela	7.9 –	Propried	ades do	s Produ	utos. V	′azão ∖	/ariável
----	------	-------	----------	---------	---------	---------	---------	----------

	Massa específica	Viscosidade cinemática	
	ho (kg/m³)	v (cSt)	
Produto A - Gasolina	725	0,4	
Produto B - Diesel	845	3,0	

A Figura 7.21 apresenta a vazão ao longo do tempo para o transporte desta

interface, enquanto a Figura 7.22 apresenta a velocidade de entrada para a simulação em função de τ . Ocorre uma redução gradual da vazão de entrega, a qual depois de 15 horas permanece aproximadamente constante e igual a 60 m³/h, crescendo para 135 m³/h após aproximadamente 18 horas do início do processo, e permanecendo neste patamar.



Figura 7.22 – Velocidade ao longo de τ – vazão variável.

A Figura 7.23 apresenta o perfil de concentração na região de mistura em função de *y*, correspondente a chegada da região de mistura ao recebimento. Os dados numéricos obtidos com o presente modelo são comparados com os dados de campo, juntamente com o resultado da previsão obtida considerando escoamento com vazão constante igual a 135 m³/h. É possível observar a diferença entre o resultado do modelo alimentado com vazão constante igual à máxima desta operação e com vazão variável de acordo com os dados de campo. Observa-se que ao longo de praticamente toda a região da interface, o modelo de

vazão variável apresenta melhor concordância com o perfil dos dados de campo, do que o modelo com vazão constante.



Figura 7.23 – Concentração ao longo de y com vazão variável

A Figura 7.24 apresenta o crescimento calculado do comprimento de mistura (*Sy=S/L*) entre concentrações máximas admissíveis de 2% ao longo de τ . É possível observar a variação no gradiente desta curva próximo a $\tau = 0,7$ onde há uma alteração significativa de velocidade.



Figura 7.24 – Comprimento adimensional de mistura ao longo de τ com vazão variável

O comprimento adimensional de mistura indicado pelos dados de campo é comparado na Tabela 7.10 com os comprimentos calculados pelo modelo. As concentrações limites que definem o comprimento operacional de mistura neste caso são 2,0% e 98,2%. O erro da previsão de comprimento operacional do modelo alimentado com vazão variável é de apenas 1%, enquanto que o modelo alimentado com vazão constante apresenta 9% de erro.

Tabela 7.10 – Comprimentos operacionais de mistura: real e calculados com correlação de Patrachari - caso 7.6

Série	<i>Lop</i> (m)	Erro (%)
Dados de campo	395,9	-
Vazão Variável	392,1	0,96
Vazão Constante	361,0	8,82

8 Conclusões e Sugestões

O presente trabalho apresenta resultados que permitem avaliar o desempenho do modelo matemático de Taylor (1954), modificado por Baptista, (2001) em conjunto com o método numérico desenvolvido neste trabalho e diversas correlações disponíveis na literatura para calcular a dispersão axial de líquidos em polidutos submetidos a operações reais.

Uma análise criteriosa do desempenho e aplicabilidade de diversas correlações para o coeficiente de dispersão axial, disponíveis na literatura, desenvolvidas entre 1953 e 2012 é realizada. A origem e dependências das correlações para o coeficiente de dispersão axial são discutidas, além de sua relação com o coeficiente de difusão molecular, perfil de velocidade, número de Reynolds, diâmetro e comprimento do oleoduto. Estas correlações são comparadas entre si. Para regime laminar a correlação de Taylor parece ser adequada. Para altos números de Reynolds, as diversas correlações tendem a convergir, sendo que a correlação desenvolvida no trabalho mais recente de Patrachari (2012), a qual é dependente do número de Schmidt, se mostrou a mais promissora. No caso de parada e partida de escoamento, o escoamento passa por todos os regimes, desde de turbulento até laminar. Consequentemente, o coeficiente de dispersão na região de transição também se mostra necessário. Baptista et al (2001) sugeriram uma interpolação entre dados os dois regimes. No presente trabalho, um novo ajuste para a transição foi realizado.

O método numérico foi implementado na plataforma comercial *Matlab*. Uma validação com solução analítica para escoamento com velocidade constante foi reproduzida, assim como um caso hipotético com múltiplas paradas disponível na literatura (Baptista, 2001).

De forma a comparar os dados numéricos com os dados de campo, foi necessário desenvolver uma metodologia de tratamento de dados de campo. A partir dos dados de instrumentos de vazão e massa específica, construiu-se uma curva de concentração ao longo do comprimento de uma região de mistura interfacial que chega ao recebimento do poliduto real.

Diferentes operações reais com vazão variável, com partidas e paradas ao longo do tempo, foram estudadas para prever a região de mistura no poliduto

selecionado para estudo. Os resultados permitiram observar que o modelo utilizado em conjunto com a correlação de Patrachari (2012) apresenta excelentes resultados (com erros da ordem de 5%) para prever a dispersão axial em polidutos submetidos a operações com vazão variável, na presença de paradas e partidas.

A interpretação de dados de campo que caracterizam a mistura causada por operações com paradas duradoras sugere a influência de outro fenômeno de dispersão, que não o estudado nesta pesquisa, devido à deformação da curva de concentração ao longo do comprimento. Uma análise dos locais de parada permite observar que os 2 casos comparados pararam em locais diferentes, sendo um em uma região inclinada do perfil o outro em uma região mais plana, sugerindo a influência do efeito gravitacional sobre os produtos movimentados.

A partir das análises realizadas neste trabalho, pode-se concluir que o modelo transiente é eficaz para a previsão de escoamento típico em operações reais de campo, apresentando desempenho superior as aproximações clássicas de considerar o processo com velocidade constante.

Como pesquisa futura, sugere-se incluir o presente procedimento de cálculo da concentração e determinação do comprimento da região de mistura em algum simulador comercial ou não, que determina o campo de velocidade e pressão. Para manter a mudança de variáveis proposta, será necessário considerar uma velocidade constante no espaço, na região da interface.

Outra sugestão consiste em desenvolver uma metodologia incluindo diretamente o termo convectivo da equação de concentração, com a coordenada axial centrada na posição da interface.

A partir de um código que resolva de forma acoplada, o campo de velocidade e concentração, recomenda-se estudar o efeito gravitacional sobre a dispersão axial em polidutos parados com a interface em locais inclinados.

Propõe-se ainda utilizar um método de captura da interface, utilizando por exemplo o modelo VOF (volume of fluid), na presença de um campo de velocidade bi-dimensional. Outra sugestão, também incorporando um campo de velocidade bi-dimensional, com solução acoplada entre escoamento e concentração, consiste em estudar o problema como se fosse um único fluido com diferentes espécies que se difundem umas nas outras.

Referências bibliográficas

ARIS, R. (1956). "On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube." Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Mathematical and Physical Sciences 235(1200): 67-77.

AUSTIN, J. E.; PALFREY, J. R., (1964), "Mixing of miscible but dissimilar liquids in a serial flow in a pipeline," Proc. Institution of Mechanical Engineers, Vol. 178, Part1, No.15, pp. 377–395.

BAPTISTA R. M., RACHID F. B. F., ARAUJO J. H. C., (2000), "Mixing volume determination in batch transfers through sonic detectors", Proc. of the 8th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, em Cd-Rom.

BAPTISTA R. M., RACHID F. B. F., ARAUJO J. H. C., (2001), "Mixing volume evaluation under pumping shut-down conditions", 33rd Pipeline Simulation Interest Group Conference, Salt Lake City, Utah, pg 1-13.

BIRGE, E. A. (1947), "Contamination control in products pipelines." Oil and Gas Journal 46: 176.

CHATWIN, P. C. (1973). "Calculation illustrating effects of the viscous sub-layer on longitudinal dispersion." Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics 26(4): 427-439.

CHATWIN, P. C. (1973). "Calculation illustrating effects of the viscous sub-layer on longitudinal dispersion." Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics 26(4): 427-439.

CHIKWENDU, S. C.; G. U. OJIAKOR (1985). "Slow-zone model for longitudinal dispersion in two-dimensional shear flows." Journal of Fluid Mechanics 152: 15-38.

CUSSLER, E. L., Diffusion – Mass Transfer in Fluid Systems, Cambridge University Press, 2009.

EKAMBARA, K.; J. B. JOSHI (2003). "Axial mixing in pipe fows: turbulent and transition regions." Chemical Engineering Science 58: 2715-2724.

FLINT, L. F.; P. EISENKLAM (1969). "Longitudinal gas dispersion in transitional and turbulent flow through a straight tube." Canadian Journal of Chemical Engineering 47(2): 101-106.

FLINT, L. F.; P. EISENKLAM (1970). "Dispersion of matter in transitional flow through straight tubes." Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Mathematical and Physical Sciences 315: 519-533.

FOWLER, F. C.; G. G. BROWN (1943). "Contamination by successive flow in pipe lines." Transactions of the American Institute of Chemical Engineers 39: 491-516.

GAMBILL W. R., (1959), "How to estimate mixture viscosities", Chemical Engineering, vol 66, pp 151-152.

GOMES, A. A., RACHID, F. B. F., ARAUJO, J. H. C., (2002), "Modeling of Contamination in Pipeline Batch Transfers", Proceedings of the ENCIT 2002, Caxambu - MG, Brazil - Paper CIT02-0582

HAYDUK, W.; MINHAS, B. S. (1982). "Correlations for prediction of molecular diffusivities in liquids." The Canadian Journal of Chemical Engineering, Vol. 60: 295-299.

KRANTZ, W. B.; D. T. WASAN (1974). "Axial dispersion in the turbulent flow of power-law fluids in straight tubes." Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals 13(1): 56- 62.

LEVENSPIEL, O. (1958). "Longitudinal mixing of fluids flowing in circular pipes." Industrial and Engineering chemistry 50(3): 343-346.

MARON, V. I. (1978). "Longitudinal diffusion in a flow through a tube." International Journal of Multiphase Flow 4: 339-355.

PATANKAR S. V..Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, McGraw Hill, 1980

PATRACHARI, A.R., JOHANNES, A.H. (2012). "A conceptual framework to model interfacial contamination in multiproduct petroleum pipelines" International Journal of Heat and Mass Transfer 55 4613–4620

PATRACHARI, A.R., Deterministic models to explain the phenomenon of interfacial mixing in refined products pipelines. 2012. 161 Tese de Doutorado – Oklahoma State University. Stillwater, Oklahoma.

PERRY, R. H.; D. W. GREEN. Perry's Chemical Engineers' Handbook, McGraw-Hill, 1997. POPE, S. B. (2000). Turbulent Flows, University Press, Cambridge.

RACHID, F. B. F.; J. H. C. D. ARAUJO; R. M. BAPTISTA (2002). "Predicting mixing volumes in serial transport in pipelines." Journal of Fluids Engineering 124: 528-534.

ROACHE, P. J.; Verification and Validation in Computational Science and Engineering, Hermosa Publishers, 1998

SJENITZER, F. (1958). "How much do products mix in a pipeline?" Pipeline Engineer 30: 31-34.

SMITH, R. (1987). "Diffusion in shear flows made easy - the Taylor limit." Journal of Fluid Mechanics 175: 201-214.

SMITH, S. S.; R. K. SULZE (1948). "Interfacial mixing characteristics of products in products pipeline - Part 1." The Petroleum Engineer 19(13): 94-104.

SMITH, S. S.; R. K. SULZE (1948). "Interfacial mixing characteristics of products in products pipeline - Part 2." The Petroleum Engineer 20: 330-337.

SWAMEE, P. K.; A. K. JAIN (1976). "Explicit equations for pipe-flow problems." Journal of Hydraulics Division 102(5): 657-664.

TAYLOR, G. I. (1922). "Diffusion by continuous movements." Proceedings of the London Mathematical Society 20: 196-212.

TAYLOR, G. I. (1953). "Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube." Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Mathematical and Physical Sciences 219(1137): 186-203.

TAYLOR, G. I. (1954). "The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe." Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Mathematical and Physical Sciences 223(1155):446-468.

TICHACEK, L. J.; BARKELEW, C. H.; BARON, T., (1957), "Axial Mixing in Pipes," American Institute of Chemical Engineering Journal, Vol.3, No. 4, pp.439–442.

UDOETOK, E. S.; A. N. NGUYEN (2009). "A disc pig model for estimating the mixing volumes between product batches in multi-product pipelines." Journal of Pipeline Engineering 8: 195-201.

WILKE, C. R.; CHANG, P. (1955). "Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions." A.I.Ch.E. Journal June 1955 264-270.