

# Relatório de Modelagem de Knock-Out Drum (KOD)

Modelo de Separação H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>

28 de novembro de 2025

## 1 Introdução

Este relatório descreve o modelo computacional desenvolvido em Python, utilizando a biblioteca CoolProp e Pandas, para simular o desempenho e dimensionamento preliminar de um **Knock-Out Drum (KOD)** (Vaso Separador de Gotículas). O KOD é projetado para remover água líquida residual de fluxos de H<sub>2</sub> e O<sub>2</sub> após o processo de eletrólise e resfriamento a 4°C.

## 2 Dados de Entrada e Parâmetros Fixos

O modelo aceita dados variáveis por meio da função e utiliza constantes globais para as condições do processo e critérios de dimensionamento.

### 2.1 Dados de Entrada da Função

São os parâmetros que variam para cada fluxo (H<sub>2</sub> ou O<sub>2</sub>) e que são passados diretamente para a função `modelar_knock_out_drum`:

- **Nome do Fluido (gas\_fluido)**: H<sub>2</sub> ou O<sub>2</sub>. Utilizado pelo CoolProp.
- **Vazão Molar de Entrada (vazao\_molar\_in)**: Vazão total do gás (mol/s).
- **Perda de Pressão (delta\_p\_bar)**: Perda de carga assumida no KOD (bar). Valor padrão: 0.05 bar.
- **Diâmetro do Vaso (diametro\_vaso\_m)**: Diâmetro interno do KOD (m). Valor padrão: 1.0 m.

### 2.2 Parâmetros de Processo e Constantes Fixas

- **Temperatura de Entrada ( $T_{in}$ )**: 4.0°C (277.15 K). Fixada pelas etapas de resfriamento (Dry Cooler e Chiller).
- **Pressão de Entrada ( $P_{in}$ )**: 40.0 bar ( $4.0 \times 10^6$  Pa).
- **Constante Universal dos Gases ( $R_{UNIV}$ )**: 8.31446 J/(mol · K).
- **Densidade da Água Líquida ( $\rho_L$ )**: 1000.0 kg/m<sup>3</sup> (aproximação para 4°C).
- **Fator de Souders-Brown ( $K$ )**: 0.08 m/s. Critério empírico para separação eficiente.

### 3 Cálculos e Modelagem Interna

O modelo se baseia no equilíbrio termodinâmico de fases (VLE) e princípios de separação por gravidade/arraste.

#### 3.1 Equilíbrio de Fases e Composição de Saída

O KOD é modelado como um separador instantâneo (*flash drum*) que atinge o equilíbrio VLE a  $T_{\text{in}}$  e  $P_{\text{out}}$ . A água líquida condensada é removida do gás.

1. **Pressão de Saída ( $P_{\text{out}}$ ):**

$$P_{\text{out}} = P_{\text{in}} - \Delta P$$

2. **Pressão de Saturação da Água ( $P_{\text{sat,H}_2\text{O}}$ ):** Obtida via CoolProp na temperatura  $T_{\text{in}}$ .

3. **Fração Molar de Vapor d'Água na Saída ( $y_{\text{H}_2\text{O}}$ ):** Assume-se que o gás de saída está saturado.

$$y_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{P_{\text{sat,H}_2\text{O}}(T_{\text{in}})}{P_{\text{out}}}$$

4. **Massa Molar da Mistura de Gás ( $M_{\text{mix},G}$ ):** Calcula-se a massa molar média da mistura gás-vapor.

$$M_{\text{mix},G} = y_{\text{gás}} \cdot M_{\text{gás}} + y_{\text{H}_2\text{O}} \cdot M_{\text{H}_2\text{O}}$$

#### 3.2 Cálculo de Densidade e Vazão Volumétrica

Para modelar o gás em alta pressão (40 bar), utiliza-se o fator de compressibilidade ( $Z$ ), obtido via CoolProp.

1. **Fator de Compressibilidade ( $Z$ ):** Obtido para o gás puro ( $\text{H}_2$  ou  $\text{O}_2$ ) nas condições  $T_{\text{in}}$  e  $P_{\text{out}}$ .

2. **Densidade da Mistura de Gás ( $\rho_G$ ):** Baseado na Equação de Estado de Gás Real:

$$\rho_G = \frac{P_{\text{out}} \cdot M_{\text{mix},G}}{Z \cdot R_{\text{UNIV}} \cdot T_{\text{in}}}$$

3. **Vazão Volumétrica ( $\dot{V}_G$ ):**

$$\dot{V}_G = \frac{F_G \cdot M_{\text{mix},G}}{\rho_G}$$

#### 3.3 Dimensionamento (Souders-Brown)

O critério de Souders-Brown é usado para verificar se o diâmetro do vaso é suficiente para separar as gotículas de líquido arrastadas.

1. **Velocidade Máxima Permissível ( $V_{\text{max}}$ ):**

$$V_{\text{max}} = K \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_G}}$$

2. **Velocidade Superficial Real ( $V_{\text{real}}$ ):**

$$V_{\text{real}} = \frac{\dot{V}_G}{A_{\text{vaso}}} = \frac{4 \cdot \dot{V}_G}{\pi \cdot D_{\text{vaso}}^2}$$

O status de separação é **OK** se  $V_{\text{real}} < V_{\text{max}}$ .

### 3.4 Cálculo de Consumo Energético

O KOD em si é passivo. O único consumo elétrico significativo é o trabalho extra necessário para compensar a perda de pressão ( $\Delta P$ ) imposta ao compressor a jusante.

$$\text{Potência Adicional}(\dot{W}) = \dot{V}_G \cdot \Delta P$$

Onde  $\Delta P$  está em Pascal e  $\dot{V}_G$  em  $m^3/s$ , resultando em  $\dot{W}$  em Watts.

## 4 Saídas do Modelo

O modelo retorna um dicionário com os seguintes resultados, organizados em tabelas transpostas via Pandas para fácil comparação entre os fluxos de H<sub>2</sub> e O<sub>2</sub>:

1. **Informações de Entrada:** Repete os parâmetros de entrada para contexto.
2. **Resultados de Saída e Energia:** Inclui  $P_{\text{out}}$ ,  $T_{\text{out}}$ ,  $y_{\text{H}_2\text{O}}$ ,  $\dot{V}_G$ ,  $\rho_G$  e a potência elétrica adicional ( $\dot{W}$ ).
3. **Dimensionamento do KOD:** Inclui  $V_{\text{max}}$ ,  $V_{\text{real}}$ , Área Mínima Requerida e o **STATUS SEPARAÇÃO**.