

Relatório de Modelagem de Knock-Out Drum (KOD)

Modelo de Separação H_2/O_2

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_2 e O_2 após o processo de eletrólise e resfriamento a $4^\circ C$.

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_2 ou O_2) e que são passados diretamente para a função `modelar_knock_out_drum`:

- **Nome do Fluido** (`gas_fluido`): H_2 ou O_2 . 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}): $4.0^\circ C$ (277.15 K). Fixada pelas etapas de resfriamento (Dry Cooler e Chiller).
- **Pressão de Entrada** (P_{in}): 40.0 bar (4.0×10^6 Pa).
- **Constante Universal dos Gases** (R_{UNIV}): 8.31446 J/(mol · K).
- **Densidade da Água Líquida** (ρ_L): 1000.0 kg/m³ (aproximação para $4^\circ C$).
- **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_{in} e P_{out} . A água líquida condensada é removida do gás.

1. **Pressão de Saída (P_{out}):**

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

2. **Pressão de Saturação da Água (P_{sat,H_2O}):** Obtida via CoolProp na temperatura T_{in} .

3. **Fração Molar de Vapor d'Água na Saída (y_{H_2O}):** Assume-se que o gás de saída está saturado.

$$y_{H_2O} = \frac{P_{sat,H_2O}(T_{in})}{P_{out}}$$

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

$$M_{mix,G} = y_{gás} \cdot M_{gás} + y_{H_2O} \cdot M_{H_2O}$$

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 (H_2 ou O_2) nas condições T_{in} e P_{out} .
2. **Densidade da Mistura de Gás (ρ_G):** Baseado na Equação de Estado de Gás Real:

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

3. **Vazão Volumétrica (\dot{V}_G):**

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

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_{max}):**

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

2. Velocidade Superficial Real (V_{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 (ΔP) imposta ao compressor a jusante.

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

Onde ΔP 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_2 e O_2 :

1. **Informações de Entrada:** Repete os parâmetros de entrada para contexto.
2. **Resultados de Saída e Energia:** Inclui P_{out} , T_{out} , y_{H_2O} , \dot{V}_G , ρ_G e a potência elétrica adicional (\dot{W}).
3. **Dimensionamento do KOD:** Inclui V_{max} , V_{real} , Área Mínima Requerida e o **STATUS SEPARAÇÃO**.