



UFBA

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
ESCOLA POLITÉCNICA
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA INDUSTRIAL - PEI

MESTRADO EM ENGENHARIA INDUSTRIAL

RODRIGO LIMA MEIRA

Modelagem e simulação de escoamento
compressível na presença de incertezas



SALVADOR
2016



MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO COMPRESSÍVEL NA
PRESENÇA DE INCERTEZAS

Rodrigo Lima Meira

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Programa de Pós-graduação em Engenharia
Industrial, da Universidade Federal da
Bahia, como parte dos requisitos necessários
à obtenção do título de Mestre em
Engenharia Industrial.

Orientadores: Ricardo de Araújo Kalid

Glória Meyberg Nunes Costa

Salvador

Abril de 2016

S2320 Meira, Rodrigo Lima

Modelagem e simulação de escoamento compressível na presença de incertezas/Rodrigo Lima Meira. – Salvador: UFBA, 2016.

XXV, 164 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Ricardo de Araújo Kalid

Glória Meyberg Nunes Costa

Dissertação (mestrado) – UFBA/Programa de Engenharia Industrial, 2016.

Referências: p. 99 – 106.

1. escoamento compressível. 2. compressores centrífugos.
3. escoamento em dutos. 4. incerteza. I. Kalid, Ricardo de Araújo *et al.*. II. Universidade Federal da Bahia, Programa de Engenharia Industrial. III. Título.

CDD: 511

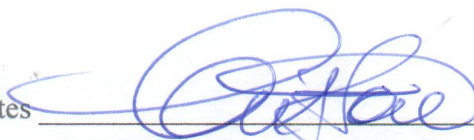
**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO COMPRESSÍVEL
NA PRÉSENÇA DE INCERTEZAS**

RODRIGO LIMA MEIRA

Dissertação submetida ao corpo docente do programa de pós-graduação em Engenharia Industrial da Universidade Federal da Bahia como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de mestre em Engenharia Industrial.

Examinado por:

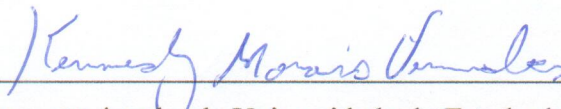
Cristiano Hora de Oliveira Fontes



Doutorado em Engenharia Química pela Universidade Estadual de Campinas, Brasil

Universidade Federal da Bahia – UFBA – Escola Politécnica.

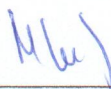
Kennedy Morais Fernandes



Doutorado em Modelagem Computacional pela Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Brasil

Professor da Universidade Federal do Sul da Bahia.

Marcelo Embiruçu de Souza



Doutorado em Engenharia Química pela Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil

Universidade Federal da Bahia – UFBA – Escola Politécnica.

Salvador/BA - Brasil

Abril/2016

*Dedico este trabalho aos meus
pais e meu irmão.*

Agradecimentos

A Deus, por me iluminar em muitos momentos na minha vida, e por nunca permitir que eu deixe de acreditar.

A meus pais, Nirlene e Júnior, por me ensinarem tudo que é necessário para seguir o meu caminho com consciência e sem medo de errar.

Ao meu irmão, pela convivência, pelos momentos de distração, vitais para a elaboração deste trabalho.

Aos meus familiares brumadenses, pela força, por acreditar em mim e pelo carinho que sempre recebi.

Aos meus colegas e amigos do PROTEC, que tem me ajudado durante todo este caminho, agradeço imensamente a vocês por tudo que aprendi.

A Prof. Gloria por todo o aprendizado que me permite voar ao sucesso, e ao Prof. Kalid por me segurar no chão quando convir.

Aos amigos e colegas do mestrado e da graduação que têm me dado força e apoio.

“Antes de ler o livro que o guru lhe deu, você tem que escrever o seu.”

Raul Seixas

Resumo da Dissertação apresentada à UFBA como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

Os modelos fenomenológicos que descrevem o escoamento de fluidos compressíveis são complexos, devido à variação da densidade deve estar correlacionada com a variação de pressão. Isto faz com que sejam adotadas simplificações, como fator de compressibilidade médio, limitando a aplicação desses modelos. Assim, o objetivo deste trabalho é implementar modelos mais rigorosos de escoamento compressível tanto para compressores centrífugos quanto para o transporte de fluidos em longas distâncias, em específico com CO₂ que vem sendo empregado para recuperação de óleo na captura e estoque de carbono. Além disto, através do método de Monte Carlo a incerteza das simulações foram avaliadas, com o propósito de tomar decisões adequadas nos cenários estudados. Os resultados mostraram que a utilização de equação de estado para gás real e do escoamento compressível são relevantes nas curvas do compressor, contrário ao que literatura especializada frequentemente sugere, portanto esses sistemas não ficam bem representados por escoamento incompressível e gás ideal. As curvas de operação do compressor também foram definidas com avaliação da incerteza das curvas de surge e stonewall, obtendo uma região de operação, além de mais eficiente, que atenda a segurança operacional. Para a linha de pesquisa do transporte de CO₂, o diâmetro da linha foi dimensionamento, além do cálculo dos perfis de temperatura e pressão. Os resultados mostraram, também, que as simplificações comuns da literatura, como desprezo da energia cinética e considerar um fator de compressibilidade médio, nem sempre respondem adequadamente na obtenção dos perfis de pressão e temperatura. Também foi apresentada a avaliação da incerteza destes perfis, e definida a probabilidade do sistema não atingir as restrições de projeto, com o objetivo auxiliar em tomadas de decisões em projetos de transporte de fluidos. Desta forma influência de um modelo mais rigoroso foi estudada em diferentes casos de escoamento compressível, junto à avaliação de incerteza na tomada de decisão, e busca de processos mais eficientes.

Palavras-chave. escoamento compressível, compressores centrífugos, tubulação, incerteza.

Abstract of Dissertation presented to PEI/UFBA as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

The phenomenological models governing flow of compressible fluids is overly complex, as the density variation must be correlated with the pressure variation. Therefore many simplifications are adopted as average compressibility factor. The objective of this work is, according a rigid model of the compressible flow, to build the characteristic curves of centrifugal compressors and to design and to simulate a duct of transport of CO₂, which can be applied to recover oil in carbon capture and storage. Moreover, to support the analysis, it is important realize the evaluation of uncertain of proprieties by Monte Carlo method with the purpose of help in decision-making. It was showed that the simulation of compressible flow is significant on compressors curves, instead of applications in references that usually uses incompressible flow and ideal gas. With the Monte Carlo method, it was possible evaluate the uncertain of surge and stonewall curves, proposing a better methodology for estimate the operational region of compressor. This work also demonstrates the application of compressible flow in duct of transport of CO₂, designing the duct and simulating values of pressure and temperature inside duct. In some cases the rigid model presents different behaviors compared the simplified model, as the pressure in liquid flow, and as temperature in gas flow. Also the evaluation of the uncertainty of temperature and pressure was presented and set the probability that the system does not meet the restrictions, which aims to assist in decision-making of a fluid transport project. Thus it was possible to demonstrate the influence of a rigorous model in different cases of compressible flow, and the importance of uncertainty evaluation in decision making, and the search for more efficient processes.

Keywords. compressive flowing, centripetal compressors, pipeline, uncertain.

Sumário

Lista de Figuras	xv
Lista de Tabelas	xxiii
Lista de Quadros	xxv
1 Introdução e Estado da arte	1
1.1 Caracterização dos compressores	1
1.2 Projeto de transporte de CO ₂	6
1.3 Objetivos Geral e Específicos	8
1.4 Divisão da dissertação	9
2 Propriedades Termodinâmicas e Escoamento Compressível	11
2.1 Propriedades termodinâmicas	11
2.2 Escoamento de fluidos compressíveis	14
2.3 Propriedades dos fluidos	16
3 Avaliação da incerteza	19
3.1 Conceitos básicos	19
3.1.1 Avaliação da incerteza do Tipo A	21
3.1.2 Avaliação da incerteza do Tipo B	22
3.2 Propagação da incerteza	22
3.2.1 Método clássico	23
3.2.2 Método de Kragten	25
3.2.3 Região de abrangência	26
3.3 Propagação da <i>PDF</i> - Método de Monte Carlo	28
3.4 Conclusões parciais	29

4	Caracterização de Compressores Centrifugos	31
4.1	Modelo para o compressor	31
4.1.1	Perdas por incidência	35
4.1.2	Perdas por fricção	36
4.1.3	Aplicação do escoamento compressível	38
4.2	Cálculo das curvas do compressor	40
4.2.1	Curvas de razão de compressão	40
4.2.2	Curva de <i>surge</i>	41
4.2.3	Curva de <i>stonewall</i>	42
4.3	Materiais e Métodos	44
4.4	Resultados e discussões	46
4.4.1	Estudo de Caso 1: Compressor de ar	46
4.4.2	Avaliação da incerteza das curvas de operação do compressor de ar	51
4.4.3	Estudo de Caso 2 : Gás natural	57
4.4.4	Estudo de Caso 3: Gás de síntese	62
4.4.5	Propriedades do sistema de compressão do gás de síntese	66
4.5	Conclusões parciais	68
5	Simulação de linhas de CO₂	71
5.1	Aplicação do escoamento compressível	71
5.2	Especificações da linha de CO ₂	75
5.3	Materiais e Métodos	78
5.4	Resultados	79
5.4.1	Escoamento em estado líquido	80
5.4.2	Avaliação da incerteza do escoamento de CO ₂ líquido	83
5.4.3	Escoamento em estado gasoso	86
5.4.4	Avaliação de incerteza do escoamento de CO ₂ gasoso	88
5.5	Conclusões parciais	91
6	Conclusão e Recomendações	93
7	Trabalhos futuros	97

Referências	99
Apêndices	106
A Publicações	107
B Processos termodinâmicos	109
C Escolha da equação de estado para o gás natural	113
D Derivada total da entalpia	115
D.1 Gás	115
D.2 Líquido	116
E Gráficos estatísticos da simulação de Monte Carlo para os compressores centrífugos	119
E.1 Compressão de ar	119
E.1.1 Teste de normalidade para os pontos de <i>surge</i>	119
E.1.2 Teste de normalidade para os pontos de <i>stonewall</i>	121
E.1.3 Regiões de abrangência dos pontos de <i>surge</i>	122
E.1.4 Regiões de abrangência dos pontos de <i>stonewall</i>	126
E.1.5 Histogramas dos pontos de <i>surge</i>	127
E.1.6 Histogramas dos pontos de <i>stonewall</i>	129
E.2 Compressão de gás natural	130
E.2.1 Histogramas dos pontos de <i>surge</i>	130
E.3 Compressão de gás de síntese	131
E.3.1 Avaliação da incerteza das curvas do compressor	131
E.3.2 Teste de normalidade para os pontos de <i>surge</i>	131
E.3.3 Teste de normalidade para os pontos de <i>stonewall</i>	133
E.3.4 Regiões de abrangência dos pontos de <i>surge</i>	134
E.3.5 Regiões de abrangência dos pontos de <i>stonewall</i>	136
E.3.6 Histogramas dos pontos de <i>surge</i>	137
E.3.7 Histogramas dos pontos de <i>stonewall</i>	138
Anexos	140

A	Equações de estado cúbicas	141
A.1	Soave-Redlich-Kwong	141
A.2	Peng-Robinson	142
A.3	Propriedades termodinâmicas obtidas através de equação de estado .	143
B	Equações de estado Benedict-Webb-Rubin	147
B.1	Propriedades termodinâmicas obtidas através de equação de estado .	147
C	Propriedade críticas e de Capacidade calorífica	151
D	Cálculo de viscosidade e coeficiente de condutividade térmica	153
D.1	Método de Lucas	153
D.1.1	Viscosidade a altas pressões	154
D.1.2	Regra de mistura	156
D.2	Viscosidade pelo método de Chung	157
D.2.1	Influência da pressão	157
D.3	Condutividade térmica pelo método de Chung	158
D.3.1	Influência da pressão	159
D.4	Cálculos da viscosidade e condutividade térmica para líquidos puros .	160
E	Parâmetros do compressor	161
F	Certificado de calibração para tacômetro	163

Lista de Figuras

1.1	Curvas características de compressores centrífugos.	2
2.1	Cálculo da variação de uma propriedade via propriedade residual . . .	13
3.1	Representação e uma <i>PDF</i> e <i>CDF</i> Normal padronizada.	20
3.2	Região de abrangência para um sistema de duas variáveis.	27
3.3	Diagrama da simulação de Monte Carlo.	28
4.1	Ilustração do funcionamento de uma compressor centrífugo.	32
4.2	Componetes da velocidade na entrada do impelidor e do difusor . . .	33
4.3	Ilustração do impelidor.	33
4.4	Diagrama entalpia versus entropia do processo de compressão.	41
4.5	Diagrama para o cálculo da curvas de razão de compressão.	42
4.6	Diagrama para o cálculo da curva de <i>surge</i>	43
4.7	Diagrama para o cálculo da curva de <i>stonewall</i>	44
4.8	Curvas caraterísticas do compressor de ar na região de operação. . . .	47
4.9	Diagrama para o cálculo das curvas do compressor para pontos pró- ximos ao <i>stonewall</i>	48
4.10	Curvas características do compressor de ar.	49
4.11	Curva de surge da compressão do ar.	49
4.12	Perfil da densidade do ar ao longo da compressão.	50
4.13	Curvas características do compressor de ar para escoamento compres- sível para o gás ideal e gás de SRK.	51
4.14	Simulação de Monte Carlo das curvas de <i>surge</i> e <i>stonewall</i> para com- pressão de ar.	52
4.15	Histograma do ponto de <i>surge</i> para uma rotação de 50 000 rpm . . .	53
4.16	Histograma do ponto de <i>stonewall</i> para uma rotação de 50 000 rpm. .	53

4.17	Teste de normalidade do ponto de <i>surge</i> para uma rotação de 50 000 rpm.	54
4.18	Região de abrangência do ponto de <i>surge</i> para uma rotação de 50 000 rpm para uma probabilidade de 95 %.	55
4.19	Região de abrangência do ponto de <i>surge</i> para uma rotação de 50 000 rpm para uma probabilidade de 95 %.	56
4.20	Região de abrangência das curvas características do compressor.	56
4.21	Região de operação da compressão de ar.	57
4.22	Curvas características do compressor de gás natural.	58
4.23	Avaliação da incerteza através da simulação de Monte Carlo, da curva de compressão do gás natural.	59
4.24	Histograma do ponto de <i>surge</i> para a rotação de 30 000 rpm na compressão do gás natural.	60
4.25	Curva de operação de <i>surge</i> na compressão do gás natural considerando uma probabilidade de abrangência de 99 %.	61
4.26	Curvas da região de operação do compressor de gás natural.	62
4.27	Curvas características do compressor para gás de síntese.	63
4.28	Pontos de Monte Carlo para as curvas de <i>surge</i> e <i>stonewall</i> do gás de síntese	64
4.29	Região de abrangência com a probabilidade de 99 % do ponto de <i>surge</i> para 70 000 rpm	64
4.30	Região de abrangência das curvas características para compressão do gás de síntese	65
4.31	Curvas de operação do compressor com base em suas incertezas para uma probabilidade de abrangência de 99 %.	66
4.32	Perfil de temperatura do difusor e do impelidor na compressão do gás de síntese.	67
4.33	Perda de carga no compressor de gás de síntese considerando escoamento incompressível e gás ideal, a direita para uma rotação de 30 000 rpm e a outra de 70 000 rpm.	67
4.34	Perda de carga no compressor de gás de síntese, a direita para uma rotação de 30 000 rpm e a outra de 70 000 rpm.	68

4.35	Eficiência máxima do compressor de gás de síntese em função da rotação.	69
5.1	Divisão do duto em vários volumes de controle	72
5.2	Diagrama de um duto enterrado, cuja sua distância à superfície vale Z_A	73
5.3	Avaliação do passo de integração para o escoamento de CO_2 líquido. . .	80
5.4	Avaliação do passo de integração para o escoamento de CO_2 gasoso. . .	80
5.5	Perfil de pressão com base nos diâmetros calculados.	81
5.6	Perfil de pressão para o duto de CO_2 líquido especificado.	82
5.7	Perfil de temperatura para o duto de CO_2 líquido especificado.	82
5.8	Região de abrangência da temperatura do fluido ao longo da linha para uma probabilidade de 95 %.	84
5.9	Região de abrangência da pressão do fluido ao longo da linha para uma probabilidade de 95 %.	84
5.10	<i>PDF</i> e <i>CDF</i> da pressão ao final do duto para o escoamento de CO_2 líquido.	85
5.11	Perfil de pressão para o duto de CO_2 gasoso especificado.	87
5.12	Perfil de temperatura para o duto de CO_2 gasoso especificado.	87
5.13	Região de abrangência da temperatura do gás ao longo da linha para uma probabilidade de 95 %.	89
5.14	Região de abrangência da pressão do gás ao longo da linha para uma probabilidade de 95 %.	89
5.15	Variação da região de abrangência da temperatura do gás em relação à média ao longo da linha.	90
5.16	<i>PDF</i> e <i>CDF</i> discretas da pressão final do gás.	90
B.1	Ilustração da transição de um fluido no estado 1 para o estado 2 por processo isobárico	109
B.2	Ilustração da transição de um fluido no estado 1 para o estado 2 por processo isotérmico	110
B.3	Ilustração da transição de um fluido no estado 1 para o estado 2 por processo adiabático reversível	111

B.4	Ilustração da transição de um fluido no estado 1 para o estado 2 por processo de mudança de fase	111
D.1	Processo de variação de entalpia para o estado líquido.	116
E.1	<i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 20 000 rpm.	119
E.2	<i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 25 000 rpm.	120
E.3	<i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 30 000 rpm.	120
E.4	<i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 35 000 rpm.	120
E.5	<i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 40 000 rpm.	120
E.6	<i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 45 000 rpm.	121
E.7	<i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 50 000 rpm.	121
E.8	<i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 40 000 rpm.	121
E.9	<i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 45 000 rpm.	122
E.10	<i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 50 000 rpm.	122
E.11	Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 20 000 rpm.	122
E.12	Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 25 000 rpm.	123
E.13	Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 30 000 rpm.	123
E.14	Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 35 000 rpm.	124

E.15 Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 40 000 rpm.	124
E.16 Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 45 000 rpm.	125
E.17 Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 50 000 rpm.	125
E.18 Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 40 000 rpm.	126
E.19 Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 45 000 rpm.	126
E.20 Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 50 000 rpm.	127
E.21 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 20 000 rpm.	127
E.22 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 25 000 rpm.	127
E.23 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 30 000 rpm.	128
E.24 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 35 000 rpm.	128
E.25 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 40 000 rpm.	128
E.26 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 45 000 rpm.	128
E.27 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 50 000 rpm.	129
E.28 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 40 000 rpm.	129
E.29 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 45 000 rpm.	129
E.30 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 50 000 rpm.	129

E.31 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 20 000 rpm.	130
E.32 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 25 000 rpm.	130
E.33 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 30 000 rpm.	130
E.34 Região de abrangência das curvas características do compressor de gás natural.	131
E.35 <i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 30 000 rpm.	131
E.36 <i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 40 000 rpm.	132
E.37 <i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 50 000 rpm.	132
E.38 <i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 60 000 rpm.	132
E.39 <i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 70 000 rpm.	133
E.40 <i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 60 000 rpm.	133
E.41 <i>CDF</i> da normal padronizada e <i>CDF</i> dos dados normalizados para a rotação de 70 000 rpm.	133
E.42 Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 30 000 rpm.	134
E.43 Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 40 000 rpm.	134
E.44 Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 50 000 rpm.	135
E.45 Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 60 000 rpm.	135
E.46 Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 70 000 rpm.	136

E.47 Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 60 000 rpm.	136
E.48 Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 70 000 rpm.	137
E.49 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 30 000 rpm.	137
E.50 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 40 000 rpm.	137
E.51 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 50 000 rpm.	138
E.52 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 60 000 rpm.	138
E.53 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 70 000 rpm.	138
E.54 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 60 000 rpm.	138
E.55 Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 70 000 rpm.	139

Lista de Tabelas

4.1	Composição dos gases estudados em percentagem	46
4.2	Tabela dos parâmetros das <i>PDF</i> das variáveis de entrada do compressor.	52
4.3	Tabela do teste de normalidade dos pontos de <i>surge</i> e <i>stonewall</i>	54
4.4	Tabela com os dados estastícos da simulação de Monte Carlo	61
4.5	Tabela das medições das condições de sucção da planta industrial	62
4.6	Tabela do teste de normalidade dos pontos de <i>surge</i> e <i>stonewall</i>	65
5.1	Especificação do material das tubulações	77
5.2	Dados para a simulação do duto de CO ₂ líquido.	80
5.3	Tabela dos dados de entrada e os parâmetros da <i>PDF</i> normal da simulação de CO ₂ líquido	83
5.4	Tabela dos dados da simulação de Monte Carlo para o escoamento em estado líquido	85
5.5	Tabela dos dados de entrada e os parâmetros da <i>PDF</i> normal da simulação de CO ₂ líquido	88
5.6	Varição do intervalo de abrangência da temperatura com o compri- mento	90
5.7	Tabela dos dados da simulação de Monte Carlo para o escoamento em estado gasoso	91
C.1	Desvio relativo e desvio-padrão relativo obtidos pelas equações de estado para massa específica	114
C.2	Desvio relativo e desvio-padrão relativo obtidos pelas equações de estado para velocidade do som	114
A.1	Quadro da propriedades dependentes das equações de estado	144
B.1	Parâmetros da BWR	148

C.1	Propriedades dos fluidos.	151
C.2	Parâmetros da capacidade calorífica a pressão constante para gás ideal para a Eq. C.1.	152
C.3	Parâmetros para o cálculo da pressão de vapor pela Eq. C.2	152
D.1	Parâmetros do método de Lucas	156
D.2	Parâmetros para o cálculo de E_i	158
D.3	Parâmetros para o cálculo de B_i	159
E.1	Tabela com as dimensões do compressor.	161
F.1	Tabela do relatório de calibração do tacômetro	163

Lista de Quadros

2.1	Gás utilizados nos estudos de caso.	17
B.1	Quadro da propriedades dependentes das equações de estado	149

Capítulo 1

Introdução e Estado da arte

O escoamento compressível tem uma vasta área de aplicação como por exemplo no dimensionamento de compressores centrífugos e no transporte de gases em geral. Neste capítulo será apresentada uma revisão da literatura configurada sob a seguinte forma: caracterização de compressores centrífugos e projeto de transporte de CO_2 .

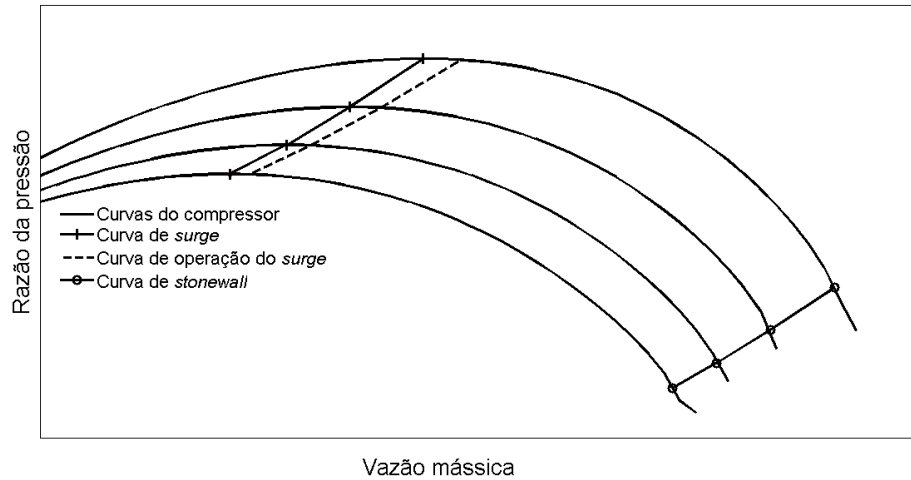
1.1 Caracterização dos compressores

Compressores centrífugos são equipamentos comuns nas indústrias químicas, termoelétricas e em empresas do ramo de transporte de gases (GRAVDAHL et al., 2004). Todavia, sua operação, é de alto risco e com elevado consumo de energia e requer muitos cuidados operacionais e um bom conhecimento de suas condições ótimas de operação. Estas condições expressam através de suas curvas características as condições de segurança da operação.

O mapa do compressor ou curvas características é a forma mais comum de representá-lo. Na Figura 1.1 estão explícitas as curvas de um compressor centrífugo. Além de serem apresentadas como uma função que relaciona a vazão mássica (abscissa) e rotação (níveis) com razão de compressão, as curvas dos compressores são comumente encontradas também em termos de trabalho de compressão ou pressão de descarga (RODRIGUES, 1991). Essas curvas são influenciadas pela geometria do compressor (WANG et al., 2013), pelas condições de temperatura e pressão de entrada do gás e de sua composição (NIU et al., 2011). Dentre as curvas do compressor existem duas curvas que limitam fenomenologicamente a operação desse equipamento, a curva de *surge* e a curva de *stonewall*.

O *surge* é um fenômeno em que tanto o fluxo no compressor quanto o seu aumento

Figura 1.1: Curvas características de compressores centrífugos.



de pressão oscilam, causando instabilidade ao processo de compressão, (GRAV-DAHL et al., 2004). Este fenômeno acontece normalmente a baixas vazões e são também dependentes da rotação do compressor como pode ser observado na Figura 1.1. Desta forma, de modo a evitar falhas mecânicas, por garantia de segurança, um controle anti-*surge* se torna necessário (ALT; HERMANN, 2013; Javadi Moghadam; MADANI, 2011). Além de limitar a região de estabilidade, a curva de *surge* é definida nos pontos de máxima eficiência do compressor, o que fortalece ainda mais a necessidade de estudá-la, como pode ser visto na Figura 1.1.

A curva de *stonewall*, delimita a região na qual a velocidade do gás é igual ou maior que a velocidade do som no gás, ou seja o número de *Mach* maior ou igual à 1, (RODRIGUES, 1991). Ao contrário da curva de *surge*, essa curva se encontra em condições de altas vazões. Em vazões superiores às vazões correspondentes a esta curva, parte da energia recebida pelo gás é transformada em ondas sonoras, o que causa vibrações na estrutura do compressor.

Portanto, a determinação dessas curvas é de vital importância para manter o sistema de compressão operando em segurança. Os métodos de determinação dessas curvas, podem ser classificados como:

- Experimental;
- Modelos empíricos;
- Modelos fenomenológicos.

O método experimental é a forma mais exata para caracterizar um compressor.

Nesses casos normalmente são monitoradas as condições de temperatura e pressão na sua alimentação e na sua descarga, bem como a vazão do gás (GALINDO et al., 2006). Para determinar a curva de *surge* são analisados os sinais de amplitude e frequência da pressão de descarga. Os critérios de avaliação do *surge* podem ser diversificados: através da análise de Fourier (GALINDO et al., 2006), análises de ruídos e vibração (ARETAKIS et al., 2004), e desvio quadrático da média das medições de ascilação no *surge* (ZHU; MA; CHEN, 2009). Conduto esses métodos obrigam o compressor a operar com perturbações (LIU; ZHENG, 2013), o que pode levar o sistema de compressão a falha mecânica. A maioria dos dados fornecidos pela literatura tende também a trabalhar em condições de baixas rotações do compressor devido à dificuldade dos equipamentos atuais fornecerem dados adequados, e também devido às análises do ponto de *surge* possuir um risco elevado (LIU; ZHENG, 2013). Outro fato relevante diz respeito às condições de teste pois, normalmente o fluido de teste é o ar que pode estar em condições completamente distintas do gás de interesse.

Uma abordagem que visa prever as curvas do compressor é através de modelos matemáticos sejam eles empíricos ou fenomenológicos. Dentre os modelos mais comuns em compressores está aquele que utiliza relações proporcionais dos números adimensionais, como número de Reynolds e número de Mach e outros específicos para o sistema de compressão (BOYCE, ; LI; LI, 2012; RODRIGUES, 1991). Esse método embora seja simples, necessita que no mínimo uma curva do compressor seja conhecida experimentalmente e também não consegue prever bem as não linearidades do sistema. Além disso como se trata de números adimensionais, as características específicas dos gases não ficam evidenciadas.

Modelos empíricos mais complexos como redes neurais (JIANG; KHAN; DOUGAL, 2006) ou modelos autorregressivos (CHU et al., 2012), e aproximações polinomiais (OLDřICH, 2004) são sugeridos. Embora esses modelos consigam atingir uma exatidão excepcional se bem tratados, com bons medidores e repetibilidade, os mesmos necessitam de dados experimentais ou outra fonte de dados para o treinamento e validação. A generalização desses modelos exige um esforço experimental considerável, configurando uma desvantagem. Além disso, estes modelos são sistemas "caixa preta" ou seja não é possível, através deles, inferir mudanças no fenômeno

caso alguma variável não previamente computada seja alterada.

No ponto de vista fenomenológico, Gravdahl et al. (2000) desenvolveram um modelo capaz de descrever as curvas de compressores centrífugos e axiais. O modelo utilizado baseia-se em calcular em detalhe as perdas de carga que o gás sofre ao passar pelo compressor o que altera sua eficiência e conseqüentemente as curvas do compressor. Niu et al. (2011) mostraram que este mesmo modelo simula adequadamente quando aplicado a vários estágios. Dessa forma torna-se fácil generalizar o cálculo para qualquer gás ou situação de compressão. No entanto, ainda há várias aproximações presentes na literatura, uma delas é considerar o escoamento como sendo incompressível nas passagens do compressor. Essa simplificação pode não representar bem o comportamento de um gás, pois a dependência das propriedades do gás com a pressão é considerável como realmente se caracterizam vários processos. Na tentativa de melhorar as predições do modelo simplificado outras perdas de carga são inseridas e correções semi-empíricas tem sido aplicadas (GRAVDAHL et al., 2004; KUS; NEKSA, 2013).

Uma simplificação comumente encontrada na literatura é o uso do modelo de gás ideal para descrever as propriedades do fluido comprimido. Para condições de temperatura e de pressão próximas às atmosféricas, e também para mistura de gases onde a interação molecular é baixa, o modelo ideal representa razoavelmente o sistema. Porém, a maior parte dos compressores opera em condições próximas das críticas, nas quais o modelo de gás ideal não é representativo. O aumento da pressão no interior do compressor também torna a não-idealidade relevante. Este fato evidencia uma necessidade do uso de uma equação de estado para descrever o comportamento do gás real. No entanto, a convergência numérica, decorrente da complexidade das equações do modelo, pode se tornar um empecilho para simular o compressor (KUS; NEKSA, 2013). Também há um questionamento adicional com relação à escolha da equação de estado apropriada. Sandberg e Staff (2005) mostraram que a escolha da equação de estado é significativa na capacidade de predição do modelo de um compressor, ao analisar os cálculos de energia entre a sucção e a descarga. Embora tenham realizado comparação com dados tabelados eles concluíram que, para uma mistura de hidrocarbonetos, as equações de Benedict-Webb-Rubin-Starling (BWRSE) (STARLING; POWERS, 1970) ou Lee-Kesler (LKP) (LEE; KESLER, 1975) são superiores às de

Redlich-Kwong (RK) (REDLICH; KWONG, 1949) e Peng-Robinson (PR) (PENG; ROBINSON, 1976).

Outro modelo fenomenológico empregado é o CFD (*Computational Fluid Dynamics* - Fluidodinâmica computacional). Utiliza as equações de transporte de fluidos no formato diferencial com a finalidade de prever o movimento do gás no interior do compressor e estimar suas curvas, (LI et al., 2013; KUS; NEKSA, 2013). Entretanto mesmo com essa abordagem algumas simplificações são usualmente realizadas como por exemplo: incompressibilidade (KUS; NEKSA, 2013) e modelo de gás ideal (LI et al., 2013). Esse método também requer um algoritmo numérico robusto e com boa precisão para resolver as equações diferenciais parciais intrínsecas mesmo com a aproximação de escoamento unidimensional.

Uma vez que as simplificações citadas – fator de compressibilidade constante, perda de carga constantes ou comportamento de gás ideal - não sejam consideradas, e ao invés disso, em seu lugar seja assumido a variação do fator de compressibilidade, perda de carga variável e gás real no interior do compressor, espera-se melhorar a exatidão da caracterização do compressor. Além disso ainda é necessário definir com maior exatidão possível a região de operação do compressor imposta pelas curvas de *surge* e *stonewall*. RODRIGUES (1991) apresenta diferentes métodos para definir o limite de operação, entre eles podemos citar o mais conservador que toma como base a maior vazão da curva de *surge* ou a menor para o *stonewall*. Este procedimento torna o limite independente da rotação. Essa estratégia é segura, porém bastante conservadora. É importante observar que os pontos de maior eficiência estão próximos da curva de *surge*. Assim, é frequentemente apresentada um fator de correção com base na curva de *surge*, como por exemplo 10 % (GHANBARIANNA-EENI; GHAZANFARIHASHEMI, 2012; OLDŘICH, 2004), para determinar o limite de controle anti-*surge*. Embora essa estratégia seja mais eficiente que a anterior, não há fundamentação teórica para o fator utilizado, e o valor de 10 % pode ser tanto conservador quanto insuficiente. Este valor depende do sistema e da incerteza das condições operacionais.

A avaliação da incerteza tem sido cada vez mais importante nos processos na tomada de decisão (COSTA et al., 2014; REQUIÃO et al., 2012), contudo não foram encontrados artigos na literatura que realizem essa avaliação na caracterização e de-

sempenho de compressores. Através do conhecimento da variabilidade do processo, com o auxílio do modelo das curvas do compressor, é possível estimar um limite de operação para uma determinada probabilidade de abrangência. A incerteza também é um importante componente na área de controle e automação, de modo a melhorar as ações dos controladores do compressor tanto anti-surge quanto o controle de carga.

Neste trabalho será optado usar a abordagem fenomenológica descrita por (GRAV-DAHL et al., 2000), na construção das curvas do compressor centrífugos. Esta escolha se baseou na descrição pormenorizada do modelo de perdas de carga além das simplificações que ainda estão em uso como a idealidade do gás. Além disso, para auxiliar na delimitação das condições operacionais, uma análise da incerteza das curvas de operação do compressor será realizada.

1.2 Projeto de transporte de CO₂

Nos últimos anos, as questões ambientais ganharam força tanto pela cobrança da sociedade quanto pelas lideranças governamentais de diversos países (MASSOL; TCHUNG-MING; BANAL-ESTAÑOL, 2015). Dentre as principais exigências está a amenização do efeito estufa, responsável pelo aquecimento da superfície do planeta. Dentre as principais causas deste efeito, se encontra a emissão de gás carbônico (CO₂) oriundo da queima de combustíveis fósseis. Caso este problema não seja sanado pode acarretar diversas mudanças climáticas e redução da biodiversidade do planeta.

Deste modo há uma grande mobilização em prol de procurar soluções que reduzem a emissão de CO₂. A solução a longo prazo mais reconhecida é a busca de novas fontes de energia, que substituam a queima dos combustíveis fósseis. Em contra partida, para reduzir esta emissão a curto prazo, a solução viável é a captura e sequestro de carbono (*Carbon Capture and Storage - CCS*), que consiste em captar o gás carbônico emitido pela indústria e termo-elétricas, e destiná-los a outras atividades de maior valor agregado. Uma destas atividades é a exploração de poços de petróleo e gás natural, na qual o CO₂ é injetado para ocupar os espaços da rocha e por consequência aumentar a produção (PIRES et al., 2011). Desta forma, ao invés

de ser liberado para atmosfera o CO_2 é aprisionado em rochas sedimentares.

Com base nessas diretrizes vários trabalhos são encontrados na literatura propondo tubulações de transporte de CO_2 viáveis economicamente (MASSOL; TCHUNG-MING; BANAL-ESTAÑOL, 2015). A forma mais convencional e mais barata para transportar o CO_2 a partir de sua geração até os locais onde serão estocados é através de longas tubulações. Knoope, Ramírez e Faaij (2013) apresentam um levantamento dos trabalhos envolvendo projetos e análises econômicas de linhas de transporte de CO_2 . Segundo estes autores, a maioria dos trabalhos envolvendo o transporte para fins de CCS, consideram que o CO_2 deve estar sob a forma líquida ou supercrítica, embora possa ser realizada no estado gasoso também. Knoope, Ramírez e Faaij (2013) ainda discutem sobre os modelos dos custos da instalação das linha de CCS. Segundo os autores, os modelos mais comuns são: os custos tabelados para gás natural aplicados ao CO_2 , e custos com base na massa de aço necessária para a tubulação. Nestes dois modelos o diâmetro é a variável principal para a estimação dos custos do projeto.

McCoy e Rubin (2008) e Broek et al. (2010) dimensionaram uma linha de CO_2 líquido fixando a pressão ao final do percurso. Assim, utilizando modelos de perda de carga calcularam o diâmetro necessário. No entanto, o modelo utilizado sofreu várias simplificações de forma tornar o cálculo mais rápido. Dentre as simplificações utilizadas estão fator de compressibilidade médio e desprezo da influência da variação da energia cinética no balanço de energia. Wang et al. (2014) determinaram um dimensionamento com menor custo variando o diâmetro e a distância da linha. No entanto, os cálculos de diâmetro foram realizados com base em modelos empíricos. Para tornar esses modelos mais fidedignos à realidade, sugere-se agregar os conceitos de escoamento de fluidos compressíveis (fator de compressibilidade variável).

O escoamento de fluidos tem sido estudado em várias aplicações: o transporte de gás natural (LIU et al., 2015), projeto de linhas de transporte de CO_2 (CHACZYKOWSKI; OSIADACZ, 2012) e misturas de gás natural e hidrogênio (ELAUD; HADJ-TAÏEB, 2008). As simulações, tanto em regime estacionário quanto em regime dinâmico, têm auxiliado não só na área de projeto como também, na detecção de vazamentos (LIU et al., 2015), na elaboração de controladores de linhas de transporte (JAYAPALAN; AGNIHOTRI; DESHPANDE, 2014). Nimtz et al. (2010) com

o auxílio de simuladores comerciais estudaram várias situações de transporte e escoamento de CO₂, como por exemplo mudança de estado e presença de impurezas.

Knoope, Ramírez e Faaij (2013) também comentam sobre a importância de equipamentos de aumento da pressão como compressores (gás) ou bombas (líquido), tanto no âmbito operacional, quanto no âmbito econômico. Witkowski et al. (2013) avaliaram diferentes estratégias da operação de compressores ao longo da linha de gás, e concluíram que operar com altas razões de compressão pode diminuir os custos de instalação em até 50 %. Outros fatores como custos de separação do CO₂ e custos de estocagem devem ser considerados para uma análise completa do ciclo do CCS (CHANDEL; PRATSON; WILLIAMS, 2010; GAO et al., 2011).

Além de trabalhos relacionados com otimização de custos de um projeto de CCS (WANG et al., 2014), são também encontrados na literatura análises de sensibilidade com base na incerteza dos custos (GAO et al., 2011; KOELBL et al., 2014). No entanto ainda não foi realizado nenhum trabalho que considere a incerteza dos parâmetros de projeto de uma linha de CO₂, como por exemplo diâmetro e trabalho de compressão.

Com base no que foi investigado, este trabalho se propõe utilizar a abordagem de escoamento compressível para projetar uma linha de CO₂ através de um modelo mais rigoroso. Além de simulações no estado líquido, a linha de CO₂ também será modelada no estado gasoso, visto que há uma lacuna em estudo nessa área (KNOOPE; RAMÍREZ; FAAIJ, 2013). Por fim, a incerteza do perfis de temperatura e pressão serão avaliados, para estabelecer um dimensionamento do compressor mais robusto.

1.3 Objetivos Geral e Específicos

Contribuir para a modelagem e simulação de sistemas compressíveis aplicadas em duas situações: modelagem de compressores centrífugos; e projeto de linhas de transporte de CO₂ é o objetivo geral dessa pesquisa.

Com relação aos compressores centrífugos os objetivos específicos são:

- Avançar na construção das suas curvas características via abordagem fenome-

nológica descrita por Gravdahl et al. (2000). Haja vista que simplificações como escoamento incompressível e gás ideal não abrangem sistemas de compressão mais complexos nem as propriedades de todos os gases.

- Outra oportunidade de pesquisa é obter uma maior consistência estatística para a definição da região de operação avaliando a incerteza e, dessa forma obter uma estimativa melhor do que o fator de segurança de 10 % abordado na literatura.

Com relação ao transporte de CO₂ os objetivos específicos são:

- Aplicar os modelos de escoamento compressível para a simulação e dimensionamento de tubulações de transporte de CO₂, que vem sendo muito difundido na literatura pela sua importância na diminuição dos impactos ambientais (METZ, 2005).
- Comparar o modelo utilizado por McCoy e Rubin (2008) ao modelo compressível no dimensionamento de dutos para CO₂, tanto no estado líquido, quanto no estado gasoso.
- Avaliar a incerteza da pressão e temperatura do duto de modo a auxiliar na tomada de decisão no projeto e operação dos dutos de transporte de CO₂.

1.4 Divisão da dissertação

Além deste capítulo, esta dissertação foi dividida em mais cinco capítulos e mais Apêndices e Anexos, como descrito a seguir:

- Capítulo 2 - Propriedades Termodinâmicas e Escoamento Compressível: Aqui é detalhado o cálculo das principais propriedades dos fluidos que são utilizadas neste trabalho. Também são apresentadas as equações básicas para escoamento compressível.
- Capítulo 3 - Avaliação da Incerteza: Este capítulo aborda os métodos de avaliação da incerteza descritos pelo Guia de Avaliação da Incerteza e Medidas

- GUM e seus suplementos, e apresenta também uma recomendação para os estudos de caso deste trabalho.
- Capítulo 4 - Caracterização de Compressores Centrífugos: Aqui é apresentada a metodologia para aplicação de escoamento compressível na modelagem de compressores centrífugos, bem como os principais resultados deste trabalho.
- Capítulo 5 - Simulação em linhas de CO₂: Neste capítulo é abordada a aplicação do escoamento compressível em tubulações de transporte de CO₂. São também apresentados os resultados destas simulações bem como comparação com o método aplicado na literatura.
- Capítulo 6 - Conclusões e Recomendações: Neste capítulo traz as conclusões mais relevantes deste trabalho bem como as principais recomendações nos tópicos abordados.
- Capítulo 7 - Trabalhos Futuros: Por fim, são apresentados os tópicos em aberto neste trabalho e estudos que qualifiquem melhor os resultados encontrados.

Capítulo 2

Propriedades Termodinâmicas e Escoamento Compressível

Na área da engenharia o estudo do estado da matéria, bem como suas propriedades, são necessárias em todas as etapas dos processos industriais. Nesse capítulo são detalhados os cálculos das principais propriedades e balanços de energia a fim de descrever os processos intrínsecos do escoamento de gases em compressores e tubulações. Também são avaliados os principais fatores que impactam no escoamento de fluidos, bem como mostradas as principais simplificações e considerações na modelagem de sistemas compressíveis.

2.1 Propriedades termodinâmicas

A proposta deste trabalho é incorporar gases ou misturas mais complexas, cujo volume das moléculas e forças intermoleculares não são desprezíveis, e também condições de temperatura e pressão mais próximas do ponto crítico. Nestes casos é necessário definir uma equação de estado que melhor represente o sistema (VALDERRAMA, 2003). O estudo com gases reais é bem definido e utilizado para a descrição do de fases (GRABOSKI; DAUBERT, 1978), escoamento de fluidos (MCCOY; RUBIN, 2008), contudo requer maior esforço computacional para resolver essas equações.

A evolução computacional tornou capaz a resolução destes problemas complexos com praticidade. Porém, ainda há trabalhos, relacionados com equipamentos industriais, por exemplo a modelagem de compressores, como foram vistos na Seção 1.2 no Capítulo 1, que optam por usar o gás ideal.

A partir dos valores de T, P e V , auxiliado por uma equação de estado é possível obter as propriedades termodinâmicas de um gás real. No presente trabalho foi optado utilizar as equações explícitas em P .

Uma propriedade importante no estudo de fluidos compressíveis é a velocidade do som propagado em um gás. Esta propriedade limita a vazão do fluido em escoamento. Outra aplicação é que esta propriedade define a curva de *stonewall* para compressores centrífugos. A definição da velocidade do som é a variação da pressão em relação a variação densidade isentropicamente, como apresentado na Eq. 2.1

$$c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_S \quad (2.1)$$

Para equações de estado explícitas em P , a velocidade do som pode ser calculada pela Eq. 2.2 (LEAL, 2012).

$$c^2 = V^2 \left[- \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T + \frac{T}{C_V} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V^2 \right] \quad (2.2)$$

onde C_V é a capacidade calorífica a volume constante para um gás real.

Existem também as variações de entalpia e entropia da matéria. A entalpia mede a quantidade de energia transferida ou recebida por um fluido em escoamento. Enquanto a entropia quantifica a desordem de um sistema. Para o cálculos destas propriedades utilizou-se o conceito de propriedade residual, que é diferença entre a propriedade de um gás real e a mesma propriedade para um gás ideal com mesma pressão e temperatura, expressa pela Eq. 2.3 e representada na Figura 2.1.

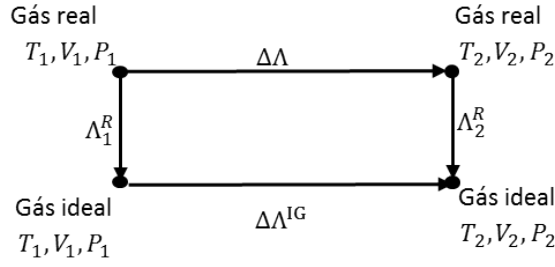
$$\Delta \Lambda = \Lambda_2 - \Lambda_1 = \Lambda_2^R + \Delta \Lambda^{GI} - \Lambda_1^R \quad (2.3)$$

onde, Λ é uma propriedade qualquer de um gás real, Λ^{IG} é a mesma propriedade para o estado de um gás ideal e Λ_i^R é a propriedade residual de um gás na temperatura T_i e na pressão P_i .

Os cálculo da entalpia residual e entropia residual estão descritos nas Eq. 2.4 e 2.5 respectivamente, considerando uma equação de estado explícita em P .

$$h^R = PV - RT - RT^2 \int_0^\infty \left(\frac{\partial Z}{\partial T} \right)_V \frac{dV}{V} \quad (2.4)$$

Figura 2.1: Cálculo da variação de uma propriedade via propriedade residual



$$s^R = R \cdot \ln(Z) + R \int_0^\infty \left[(Z - 1) - T \left(\frac{\partial Z}{\partial T} \right)_V \right] \frac{dV}{V} \quad (2.5)$$

onde Z é o fator de compressibilidade, sendo as variações para a entalpia e entropia de um gás ideal calculadas pelas Eq. 2.6 e Eq. 2.7.

$$\Delta h^{GI} = \int_{T_1}^{T_2} C_P^{IG} dT \quad (2.6)$$

$$\Delta s^{GI} = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_P^{IG}}{T} dT + R \cdot \ln \left(\frac{P_2}{P_1} \right) \quad (2.7)$$

onde C_P^{IG} é a capacidade calorífica a pressão constante para um gás ideal, e estão dispostas no Anexo C.

Desta forma os cálculos da variação de entalpia e de entropia são descritos por Eq. 2.8 e 2.9.

$$\Delta h = h_2^R - h_1^R + \int C_P dT \quad (2.8)$$

$$\Delta s = s_2^R - s_1^R + \int \frac{C_P}{T} dT + R \ln \frac{P_2}{P_1} \quad (2.9)$$

A variação de entalpia também pode ser calculada sem utilizar o conceito de entalpia residual pela Eq. 2.10. Esta equação é comumente utilizada para processos em que o desvio do comportamento do gás ideal é muito grande. Um exemplo disto é processos de compressão ou expansão isotérmicas em líquidos.

$$\Delta h = \int C_V dT + \int \left(T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right) dV + \Delta(PV) \quad (2.10)$$

No Anexo A está apresentado como estas correlações são expressas dependendo

da equação de estado utilizada. Há outras propriedades geradas por relações termodinâmicas, no entanto, só as explicitadas são relevantes para a realização deste trabalho.

2.2 escoamento de fluidos compressíveis

O escoamento de fluidos compressíveis é comumente utilizado para a simulação de transporte de gases e fluidos supercríticos em tubulações ou equipamentos industriais (SANTANA; COSTA, 1992; LI et al., 2013). Para descrever este escoamento, é necessário apresentar as equações dos balanços de massa, momento e de energia (Fox, R.W.; McDonald, A.T.; Pritchard, 2001). Neste trabalho as propriedades do fluido são descritas pelo balanço de energia térmica por unidade de massa no seu formato diferencial, conforme a Eq. 2.11, considerando:

- Regime estacionário;
- Desprezo da energia potencial gravitacional;
- Não há variação da área transversal ao longo do escoamento

$$d(h + u^2/2) = dh + u \cdot du = dq + dw_{eixo} \quad (2.11)$$

onde dh é a variação de entalpia por unidade de massa, u é a velocidade do fluido e $u \cdot du$ representa a variação da energia cinética. dq é o calor trocado pelo fluido para as vizinhanças e dw_{eixo} é o trabalho fornecido (negativo) ou recebido (positivo) pelo fluido em um eixo de rotação.

Além disso, para o escoamento compressível é necessário uma outra equação que correlacione a densidade do fluido, ou volume molar à variação de pressão, que pode ser dada por uma equação de estado.

Em escoamento de fluidos há sempre perdas de energia monitoradas através de perdas de pressão, ou perda de carga, ao longo do percurso, infligido por percalços nos quais o fluido se depara. Para um fluido escoando com estas perdas de energia, a diferencial da entalpia pode ser calculada também pela Eq. 2.12 (Fox, R.W.;

McDonald, A.T.; Pritchard, 2001).

$$dh = dq + dl_w + VdP \quad (2.12)$$

assim substituindo Eq. 2.12 na Eq. 2.11 chega-se ao balanço de energia em componentes mecânicos, Eq. 2.13.

$$u \cdot du + dl_w + VdP = dw_{eixo} \quad (2.13)$$

Onde dl_w pode ser composta pela perda de carga por fricção, $d\Phi_{friccao}$, dada pela Eq. 2.14, e outras perdas $d\Phi_{outras}$, como por exemplo perdas por vazamento, ou por passagem em válvulas.

$$d\Phi_{friccao} = kf \frac{u^2}{2D_{eq}} dL \quad (2.14)$$

por fim a equação do balanço de energia levando-se em conta perdas mecânicas é expressa pela Eq. 2.15.

$$u \cdot du + kf \frac{m^2 V^2}{2D_{eq} A^2} dL + d\Phi_{outras} + VdP = dw_{eixo} \quad (2.15)$$

Contudo integrar a Eq. 2.15 é complicada visto que o volume V e o comprimento L são correlacionados, então a integral da segunda parcela não seria possível. Para isso uma adequação deve ser realizada e finalmente chega-se na Eq. 2.16 para tornar todas as parcelas independentes na integração.

$$\frac{u \cdot du}{V^2} + \kappa f \frac{m^2}{2D_{eq} A^2} dL + \frac{d\Phi_{outras}}{V^2} + \frac{dP}{V} = \frac{dw_{eixo}}{V^2} \quad (2.16)$$

onde o termo dP/V deve ser resolvida com a diferenciação total, conforme a Eq. 2.17.

$$\frac{dP}{V} = \frac{1}{V} \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \cdot dV + \frac{1}{V} \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \cdot dT \quad (2.17)$$

enfatizando que as propriedades do gás e suas correlações entre a pressão, volume e temperatura são expressas por uma equação de estado.

Dessa forma tem-se as equações para descrever o escoamento compressível unidimensional generalizado representadas pelas Eq. 2.11 e Eq. 2.16 (SANTANA; COSTA, 1992). Nos próximos capítulos são apresentadas aplicações destas equações para o escoamento em um compressor centrífugo e em uma linha de transporte de fluidos.

2.3 Propriedades dos fluidos

Uma vez que foram descritas as principais propriedades dos fluidos compressíveis e como estas propriedades se relacionam com as variações de energia e durante o escoamento, resta definir as equações de estado e outras propriedades complementares.

Neste trabalho os gases estudados estão exibidas no Quadro 2.1. Valderrama (2003) recomenda que para gases apolares, contemplado no 2.1, as equações de estado cúbicas de Soave-Redlich-Kwong (SRK) (SOAVE, 1972) e a equação de Peng-Robinson (PR) (PENG; ROBINSON, 1976), representadas nas Eq. 2.18 e 2.19 e a equação de Benedict-Webb-Rubin (BWR) representada pela Eq. 2.20 (BENEDICT; WEBB; RUBIN, 1940), podem ser adotadas.

Nas simulações de compressão de ar e gás de síntese, será optado o uso da equação SRK, por ser mais simples e também possuir uma correção para o gás hidrogênio que possui uma alta concentração em gás de síntese (GRABOSKI; DAUBERT, 1978). Vale lembrar que o gás hidrogênio possui um ponto crítico muito baixo, o que distância bastante as suas propriedades das descritas por uma equação de estado sem correção. Já para a compressão de gás natural será optada o uso da equação BWR, uma equação multi-paramétrica que apresenta excelentes resultados ao serem comparados com dados experimentais. Um estudo comparando estas três equações de estado para gás natural está disposto no Apêndice C. E para o transporte de CO₂ optou-se pela equação de PR, que tem sido amplamente utilizada em trabalhos de CCS (MCCOY; RUBIN, 2008).

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a(T)}{V(V + b)} \quad (2.18)$$

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a(T)}{V(V + b) - b(V - b)} \quad (2.19)$$

$$P = \frac{RT}{V} + \frac{B_o RT - A_o - \frac{C_o}{T^2}}{V^2} + \frac{bRT - a}{V^3} + \frac{a\alpha}{V^6} + \frac{c}{V^3 T^2} \left(1 + \frac{\gamma}{V^2}\right) \exp\left(-\frac{\gamma}{V^2}\right) \quad (2.20)$$

onde os parâmetros a e b de cada equação de estado e todos os parâmetros da BWR estão definidos em detalhe nos Anexos A e B respectivamente.

Quadro 2.1: Gás utilizados nos estudos de caso.

Gás	Componentes	Aplicação
Ar	N ₂ e O ₂	Compressão
Gás de síntese	H ₂ , CO, CO ₂ , CH ₄ , N ₂	Compressão
Gás natural	CH ₄ , C ₂ H ₆ , C ₃ H ₈ , nC ₄ H ₁₀ , iC ₄ H ₁₀ , nC ₅ H ₁₂ , CO ₂ e N ₂	Compressão
Gás carbônico	CO ₂	Transporte

Outras propriedades necessárias na descrição do escoamento de fluidos foram calculadas de acordo com as relações presentes no Poling, Prausnitz e O'Connell (2001) e em Green e Perry (2007). Uma destas propriedades é a viscosidade, utilizada no cálculo do fator de atrito da Eq. 2.14. Esta propriedade foi calculada baseada no método de Lucas disposto em Poling, Prausnitz e O'Connell (2001) para o estado gasoso e para o estado líquido, com correção da temperatura e pressão. Além destas propriedades citadas, a condutividade térmica deve ser calculada no escoamento com troca de calor no interior de tubulações de gás carbônico. Para o cálculo desta propriedade foi utilizado o método de Chung para o estado gasoso, também encontrado em Poling, Prausnitz e O'Connell (2001) e em uma correlação para o estado líquido disposto em Green e Perry (2007). Estas abordagens podem ser apreciadas em detalhes no Anexo D.

Capítulo 3

Avaliação da incerteza

Este capítulo contém os conceitos básicos sobre a avaliação da incerteza e os seus principais métodos, como propagação da incerteza ou propagação da *PDF* (*probability density function*). Ao final da discussão será avaliada a abordagem que melhor atenderá às necessidades desta pesquisa.

3.1 Conceitos básicos

A incerteza possui uma grande importância na tomada de decisão no ambiente científico, industrial e comercial. A mesma pode definir os limites de operação e de segurança em um equipamento, agregar valor a um produto ou procedimento, e até mesmo validar uma hipótese ou teoria em experimentos. O estudo da incerteza também é de grande importância na modelagem e simulação de processos, pois isto pode ajudar na escolha de válvulas, cálculos de custos e no dimensionamento de equipamentos.

A incerteza é a estimação da variabilidade de uma propriedade ou condição do processo, como densidade, temperatura e pressão. De forma complementar, a variabilidade destes parâmetros podem ser melhor expressadas através de uma *PDF* ou função de densidade de probabilidade. Esta função informa: o formato da variabilidade de uma dada variável, e a sua integral definida informa a probabilidade de uma medida aleatória estar no intervalo de integração, como apresentado Eq. 3.1.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1 \quad (3.1)$$

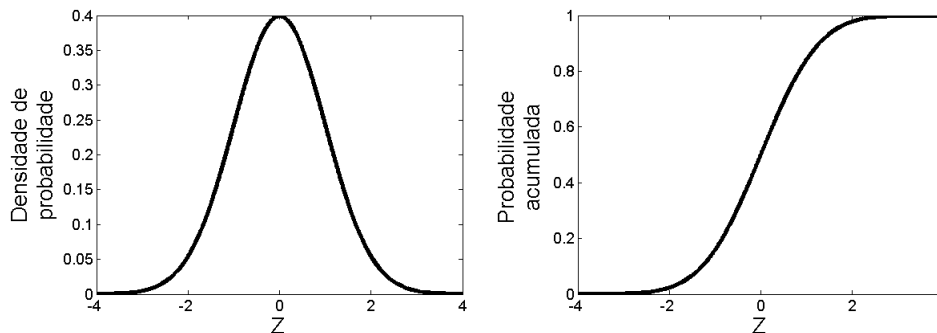
onde $f(x)$ é a *PDF* da variável x .

Existe também a *CDF* (*cumulative distribution function*) ou função de probabilidade acumulada, expressa pela Eq. 3.2, que é a integral *PDF* de $-\infty$ até um dado valor de x .

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(x)dx \leq 1 \quad (3.2)$$

Dentre as *PDF*'s, a mais comum e estudada é a Normal, sendo uma das suas características mais marcantes ser centrada em um valor médio, que coincide com a mediana e com a moda da *PDF*. A Figura 3.1 apresenta a *PDF*, a esquerda, e *CDF* a direita de uma distribuição Normal padronizada, ou seja com média 0 e desvio 1. A partir destas funções é possível obter os limites de abrangência de uma dada variável para uma probabilidade, representada pela área de uma *PDF*. Uma diferente aplicação destas funções é obter a probabilidade de um evento acontecer, por exemplo dada a *CDF* qual a probabilidade da variável estudada ser maior ou menor que um valor estipulado.

Figura 3.1: Representação e uma *PDF* e *CDF* Normal padronizada.



No entanto conhecer as propriedades de uma população geralmente não é exequível nos problemas de interesse industriais, sendo necessário realizar amostragem, ou medições e avaliar suas incertezas. A incerteza de dados experimentais, podem ter duas fontes, a incerteza do Tipo A, relativa à variabilidade natural do experimento e a incerteza do Tipo B, relativa aos erros ou desvios causados pelo instrumento ou procedimento de medição. Caso não seja possível medir experimentalmente uma variável, geralmente há um modelo matemático que correlacione as variáveis que seriam medidas experimentalmente com as variáveis de interesse; neste caso a incerteza deve ser propagada da incerteza dos dados medidos para as variáveis inferidas.

Para isso o Guia de Avaliação da incerteza (GUM) e seus suplementos GUM-S1 e GUM-S2, (BIPM et al., 2008a; BIPM et al., 2008b; BIPM et al., 2011) sugerem meios de avaliar a incerteza.

3.1.1 Avaliação da incerteza do Tipo A

A avaliação da incerteza do Tipo A representa a repetibilidade ou variabilidade natural de uma propriedade ou condição, como temperatura, densidade ou pressão. Esta variabilidade, no regime estacionário, descreve valores aleatórios nas quais a propriedade ou condição pode ou não assumir em um determinado ponto do processo. Quando se assume conhecimento total sobre esta variabilidade, chega-se a uma função de densidade de probabilidade (*Probability Density Function - PDF*).

Para medições e valores discretos o GUM (Guia da expressão de incertezas e medidas) (BIPM et al., 2008a), determina que o valor esperado da medição de uma amostra deve ser dado pela média aritmética, como observado na Eq. 3.3 e a variância da amostra pode ser representada pelo quadrado do desvio-padrão da amostra, apresentado pela Eq. 3.4. É importante ressaltar que essa abordagem só é válida se as experimentações são independentes ou seja uma medição não está correlacionada com outra.

$$\bar{x} = E[x_i] = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{n} \quad (3.3)$$

$$s_x^2 = E[(x_i - \bar{x})^2] = \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \bar{x})^2}{n - 1} \quad (3.4)$$

onde \bar{x} é a média de uma medição, n é o número de medições experimentais, x_i é uma medição, s_x é o desvio-padrão das medições.

No entanto variância da amostra não representa a variância do valor esperado, a média aritmética, que será utilizada para os cálculos de propagação de incerteza detalhado no próximo item. Dessa forma o GUM recomenda que a incerteza do Tipo A seja dada pela variância da média, como representada na Eq. 3.5.

$$s_{\bar{x}}^2 = \frac{s_x^2}{n} \quad (3.5)$$

3.1.2 Avaliação da incerteza do Tipo B

A incerteza do Tipo B representa os desvios proporcionados pelos procedimentos ou durante a medição de uma determinada variável. Em casos industriais ou em obras de engenharia as principais medições são realizadas por instrumentos, cujas fontes de incerteza são comumente tratadas como a correção sistemática e a resolução, como apresentado na Eq. 3.6.

$$u_B^2 = u_C^2 + u_{R_I}^2 \quad (3.6)$$

onde u_B é a incerteza do Tipo B, u_C é a incerteza da correção e u_{R_I} é a incerteza da resolução.

A correção sistemática representa um desvio da medição conhecida, a qual possui uma média, que pode ser ou não zero, e uma incerteza associada. Esta informação é encontrada no certificado de calibração do instrumento ou do procedimento de medição. Já a incerteza associada à resolução do instrumento é oriunda da capacidade de leitura do mesmo, instrumentos de alta precisão possuem a incerteza de resolução menor do que instrumentos de baixa precisão. A resolução além da incerteza também possui um média fixa em zero.

Além da correção sistemática e da resolução, outras fontes de erro de medição podem ser incorporadas a incerteza do Tipo B como as derivas da temperatura e do tempo. No entanto a incorporação destes fatores envolve uma calibração muito bem realizada, o que aumenta progressivamente o custo da mesma.

3.2 Propagação da incerteza

Uma vez avaliadas as componentes da incerteza do Tipo A e B, estas podem ser propagadas de acordo com a função de mediação (BIPM et al., 2008a), dada pela Eq. 3.7, a qual incorpora as medições do instrumento, \bar{x} e as componentes relativas ao desvio das medições, a correção sistemática C e a resolução R_I .

$$M_x = \bar{x} + C + R_I \quad (3.7)$$

onde a *PDF*'s da correção sistemática possui uma média a depender da calibração e uma incerteza, e a resolução possui média zero e incerteza:

$$C = C(C, u_C^2)$$

$$R_I = R_I(0, u_R^2)$$

Dessa forma a incerteza da variável medida, u_M é dada pela expressão da Eq. 3.8

$$u_M^2 = s_x^2 + u_C^2 + u_R^2 \quad (3.8)$$

Todavia nem sempre em processos industriais há instrumentos capazes de medir as variáveis de interesse ou a medição por instrumentos pode levar um determinado tempo incompatível com a necessidade dos engenheiros e operadores. Devido à estes fatores, formulações matemáticas, que relacionam uma dada variável de interesse com as variáveis inferidas por instrumentos, são necessárias para obter a estimativa da variável estudada em tempo hábil. Para avaliar a incerteza da variável de interesse, as incertezas das variáveis inferidas devem ser conhecidas e propagadas. O GUM sugere o método clássico de propagação da incerteza, no entanto há também o método de Kragten que é frequentemente utilizado quando a função de medição é de difícil acesso, como em simuladores comerciais “caixa preta”.

3.2.1 Método clássico

Dada uma função de medição MISO (*Multi input single output* - Múltiplas entradas e uma única saída) como representada pela Eq. 3.9.

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_n) \quad (3.9)$$

onde Y é a variável medida ou de saída e os valores de X_1, X_2, \dots, X_n são as variáveis de entrada que podem ser inferidas experimentalmente, cuja média foi estimada pela Eq. 3.3 e de incerteza conhecida e estimada pela Eq. 3.8.

BIPM et al. (2008a) mostram que efetuando um expansão em série de Taylor em torno dos valores médios das variáveis de entrada, e aplicando o operador variância,

as incertezas podem ser propagadas na variável de saída através da Eq. 3.10.

$$u_Y^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial f}{\partial X_i} \right)_{\bar{X}_1, \bar{X}_2, \dots, \bar{X}_n} u_{X_i}^2 \quad (3.10)$$

onde u_Y é a incerteza da variável calculada Y , u_{X_i} é a incerteza da variável i e $\left(\frac{\partial f}{\partial X_i} \right)$ é a derivada da variável de saída Y por X_i .

Já o Suplemento 2 do GUM - (GUM-S2) apresenta a generalização da lei de propagação da incerteza para sistemas MIMO (*Multi input multi output* - Múltiplas entradas e múltiplas saídas) para o caso implícito. Nesta generaliza através do mesmo conceito da expansão pela serie de Taylor é possível chegar a matriz da covariância das variáveis de saída.

Dado um sistema de equações MIMO, esta matriz é apresentada na Eq. 3.11.

$$\begin{bmatrix} h_1(Y_1, \dots, Y_{ny}, X_1, \dots, X_{nx}) \\ \vdots \\ h_{ny}(Y_1, \dots, Y_{ny}, X_1, \dots, X_{nx}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

onde h_1, h_2, \dots, h_n são funções explícitas das variáveis de saída Y_1, Y_2, \dots, Y_n e das variáveis de entrada X_1, X_2, \dots, X_n .

A expressão para a matriz da covariância das variáveis de interesse ou de saída pode ser dada pela Eq. 3.12.

$$U_{YY} = S \cdot U_{XX} \cdot S^T \quad (3.12)$$

sendo a matriz S calculada pela Eq. 3.13, U_{YY} é a matriz de covariância das variáveis de saída e U_{XX} é a matriz de covariância das variáveis de entrada.

$$S = J_Y^{-1} J_X \quad (3.13)$$

onde J_Y e J_X são as matrizes jacobianas dos sistemas de equações com relação as variáveis de saída e entrada respectivamente, dadas pelas equações fornecidas pelas

Eq. 3.14 e Eq. 3.15.

$$J_Y = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial Y_1} & \cdots & \frac{dh_1}{dY_{ny}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial h_{ny}}{\partial Y_1} & \cdots & \frac{\partial h_{ny}}{\partial Y_{ny}} \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

$$J_X = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial X_1} & \cdots & \frac{\partial h_1}{\partial X_{nx}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial h_{ny}}{\partial X_1} & \cdots & \frac{\partial h_{ny}}{\partial X_{nx}} \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

Para sistemas MIMO com atribuições explícitas a matriz jacobiana J_Y retorna a uma matriz diagonal, por isto que a formulação da Eq. 3.12 é considerada como generalizada.

Esse método de avaliação da incerteza é amplamente aplicado em trabalhos científicos e de engenharia (CLAUDINO et al., 2015), e funciona bem para sistemas lineares ou próximos à linearidade. A maior dificuldade deste método é a necessidade de conhecer os modelos matemáticos, além de precisar calcular as derivadas das funções que compõe o sistema de medição. A depender dos sistemas o tempo necessário para obter todas as derivadas possíveis pode ser dispendioso.

3.2.2 Método de Kragten

Este método foi proposto inicialmente por Kragten (1995) e estendido para sistemas MIMO por Garcia, Requião e Kalid (2013). Este método tenta simplificar o método clássico de modo a facilitar o cálculo da incerteza, principalmente quando não se conhece as funções que relacionam as variáveis de entrada com as de saída. Este método se baseia em calcular as derivadas das funções numericamente conforme a Eq. 3.16, aproximando assim a matriz jacobiana da Eq. 3.15 para a Eq. 3.17.

$$\frac{dY}{dX} = \frac{Y(X + u_X) - Y(X)}{u_X} \quad (3.16)$$

$$J_X = \begin{bmatrix} \frac{Y_1(\bar{X}_1 + u_{\bar{X}_1}) - Y_1(\bar{X}_1)}{u_{\bar{X}_1}} & \dots & \frac{Y_1(\bar{X}_{nx} + u_{\bar{X}_{nx}}) - Y_1(\bar{X}_{nx})}{u_{\bar{X}_{nx}}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{Y_{ny}(\bar{X}_1 + u_{\bar{X}_1}) - Y_{ny}(\bar{X}_1)}{u_{\bar{X}_1}} & \dots & \frac{Y_{ny}(\bar{X}_{nx} + u_{\bar{X}_{nx}}) - Y_{ny}(\bar{X}_{nx})}{u_{\bar{X}_{nx}}} \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

onde $u_{\bar{X}_i}$ é a incerteza da média da variável X_i , Y_i é a variável i de saída.

Desta forma, similar ao método clássico a matriz de covariância das variáveis de saída podem ser calculadas pela Eq. 3.18.

$$U_{YY} = J_X \cdot U_{XX} \cdot J_X^T \quad (3.18)$$

A principal vantagem desse método é a fácil implementação, já que não há necessidade das derivadas, e também é oportuno quando a função de medição se encontra em simuladores “caixa preta”, na qual não há conhecimento total sobre modelo adotado pelos *softwares*. A desvantagem é que a diferenciação numérica pode apresentar resultados que não representam bem as variáveis medidas.

3.2.3 Região de abrangência

Uma vez que as incertezas foram propagadas pelo método clássico descrito pelo GUM, ou pelo método de Kragten, o passo final é obter a região de abrangência das variáveis de saída. O GUM determina aproximar a *PDF* das variáveis de saída para uma *t-student*, sendo os parâmetros destas *PDF* a média, a variância e o grau de liberdade. O grau de liberdade das variáveis de saída é calculado pela Eq. 3.19.

$$\nu_{eff} = \frac{u_Y^4}{\sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial Y}{\partial X_i} \right)^4 \frac{u_{X_i}^4}{\nu_{X_i}}} \quad (3.19)$$

onde u_Y é a incerteza da variável de saída Y , u_{X_i} é a incerteza da variável X_i , e ν_{X_i} é o grau de liberdade da variável X_i .

Finalmente para sistemas MISO o resultado final é a incerteza expandida, dada pela Eq. 3.20 que descreve o intervalo, como mostrado na Eq. 3.21 na qual a medição está presente em uma dada probabilidade de abrangência p .

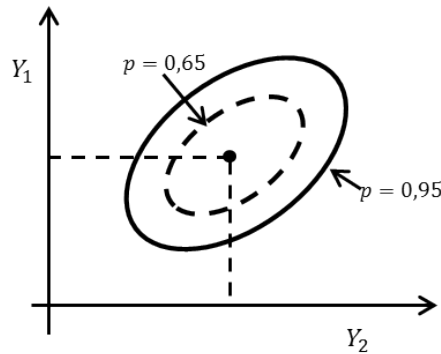
$$U_y = k(\nu_{eff}, p) \cdot u_Y \quad (3.20)$$

$$Y \in [\bar{Y} - U_y, \bar{Y} + U_y] \quad (3.21)$$

onde a probabilidade p é comumente definida no meio científico como 0,95.

Em sistemas MIMO, a uma dada probabilidade p , não há intervalos e sim regiões multidimensionais nas quais as variáveis podem pertencer. No caso de duas variáveis de saída a região de abrangência é próxima de uma elipse, como apresentado na Figura 3.2.

Figura 3.2: Região de abrangência para um sistema de duas variáveis.



Apesar destes métodos e abordagem serem difundidos no meio científico há algumas hipóteses que podem levar a resultados incoerentes com a realidade. Uma delas é que, em qualquer um dos métodos apresentados, há uma aproximação das funções de medição para um modelo linear, resultante da expansão da série de Taylor. Isso remete que para sistema altamente não lineares não é esperado uma boa representação das *PDF*'s das variáveis de saída. Martins, Requiao e Kalid (2011) mostram que truncamentos na série de Taylor na segunda e terceira ordem na avaliação da incerteza proporcionam uma aproximação mais realista, no entanto o número de derivadas aumenta consideravelmente.

Uma hipótese que compromete a abordagem pelo GUM ou método Kragten para avaliação da incerteza é que mesmo que a incerteza do Tipo A ou Tipo B sigam *PDF*'s atípicas, no final todos os resultados são aproximados para uma *t-student*. A *t-student* além de ser simétrica também possui um região de abrangência bivariável elíptica o que foge bastante da realidade a depender das *PDF*'s das variáveis de entrada e das funções do sistema de medição. Visando estas limitações, o GUM lançou o seu primeiro suplemento o GUM-S1, que trata de propagação de *PDF*'s.

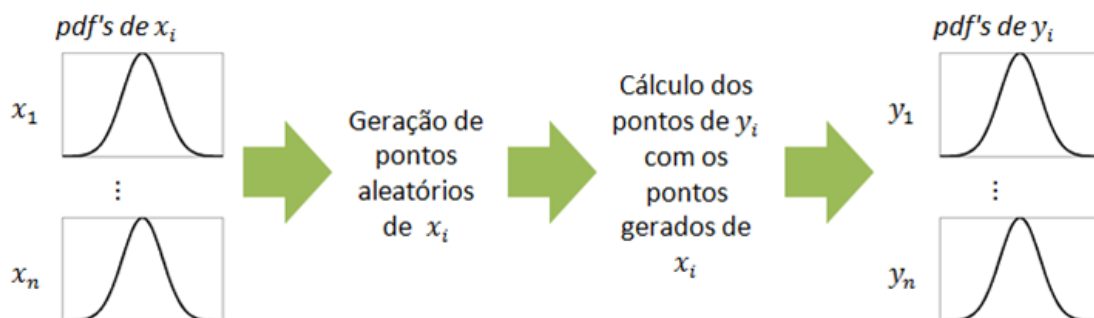
3.3 Propagação da *PDF* - Método de Monte Carlo

Os métodos de propagação da incerteza não conseguem atender bem a sistemas fortemente não-lineares ou cujas *PDF*'s das variáveis de entrada não são gaussianas, dessa forma a depender do sistema é aconselhado o uso da propagação das *PDF*'s (MARTINS; KALID, 2010). Uma vantagem da propagação da *PDF*'s é que ao final do cálculo, se obtém a *PDF*'s das variáveis de saída para o caso SISO, ou a *PDF* conjunta para caso MIMO, podendo assim, sem supor nenhuma *PDF* adicional, calcular a região de abrangência a partir da mesma.

No caso MIMO este estudo ainda é mais significativo, pois mesmo que as variáveis de saída sejam próximas a *PDF*'s conhecidas, como a da distribuição normal, a não-linearidade do sistema pode distorcer a região de abrangência. No entanto a propagação da *PDF* de maneira analítica é demasiadamente complicada para sistemas MISO, e a depender do sistema MIMO pode não haver solução. Dessa forma métodos numéricos tornam-se necessários, o Suplemento 1 do GUM, GUM-S1, (BIPM et al., 2008b) sugerem neste o caso o método de Monte Carlo.

O método de Monte Carlo se baseia em gerar valores aleatórios ou pseudo-aleatórios das variáveis de entrada com base em suas respectivas *PDF*'s e calcular as variáveis de saída várias vezes, como está apresentado na Figura 3.3. A exatidão deste método depende do número de pontos aleatórios gerados. Quanto maior o seu valor, mais representativo são as *PDF*'s das variáveis de saída.

Figura 3.3: Diagrama da simulação de Monte Carlo.



É aconselhável pelo GUM-S1 realizar a simulação com pelo menos 100 mil pontos para ter uma melhor acurácia da *PDF* das variáveis de saída, no entanto, a depender do formato da mesma, o número de pontos pode ser maior ou menor, como será

mostrado nas curvas dos compressores. Por exemplo se puder ser provado que a *PDF* de saída é Normal ou outra *PDF* conhecida, uma quantidade menor de pontos pode ser utilizada sem perder o rendimento da análise.

A vantagem desse método é a fácil implementação, visto que não há derivadas para calcular. Como também é um método é capaz de incorporar toda a não-linearidade das funções de medição nas *PDF*'s das variáveis de saída. A desvantagem é que o número de pontos e avaliações das funções de medição é muito grande o que pode aumentar o tempo de simulação e custo computacional, principalmente se houver métodos iterativos no cálculo das variáveis de saída. Assim, um única simulação de Monte Carlo pode levar de horas a dias, o que é inviável para estudos com um prazo curto de finalização.

3.4 Conclusões parciais

O objetivo desta etapa do trabalho é avaliar a incerteza na modelagem e simulação de sistemas compressíveis, a fim de se obter as regiões de abrangência que descrevem o processo e auxiliar na tomada de decisão, como nas curvas de operação de um compressor ou na confiança dada ao processo de operação. Desta forma, como este trabalho envolve em suas simulações, além de métodos numéricos para resolução de sistemas não-lineares, modelos matemáticos complexos, torna-se inviável a utilização do método clássico de avaliação da incerteza, mesmo considerando propagação da incerteza com altas ordens. O método de Kragten é um método simples e de rápida simulação, no entanto espera-se que, devido a não linearidade, a incerteza seja mal estimada aos modelos deste trabalho; nestes casos pode ser utilizado o método de propagação de *PDF*'s, o método de Monte Carlo.

O método de Monte Carlo considera os mais diversos tipos de *PDF*'s das variáveis de entrada como também, incorporar a influência dos modelos nas *PDF*'s de saída. Embora o custo computacional seja alto, outros trabalhos como Requião et al. (2012), Costa et al. (2014) citam este método como o mais adequado para caso de simulações complexas.

Capítulo 4

Caracterização de Compressores

Centrífugos

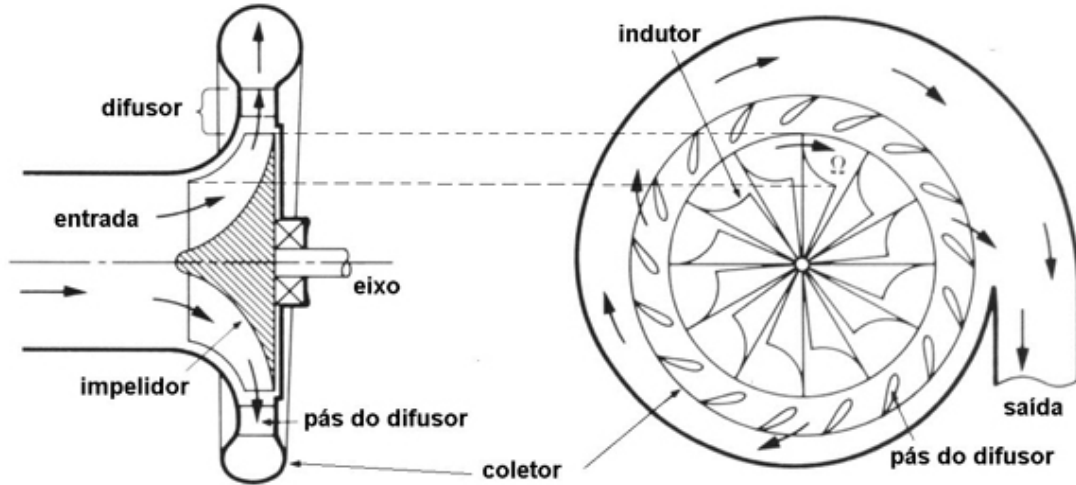
No Capítulo 2 foram abordadas as equações que descrevem o escoamento de fluidos compressíveis e das propriedades dos fluidos. Neste capítulo é abordado o acoplamento destas equações à modelagem fenomenológica das curvas do compressor discutida por Gravdahl et al. (2000) e Chu et al. (2012). As curvas características do compressor, as curvas de *surge* e de *stonewall* são calculadas, bem como as incertezas associadas a elas através do método de Monte Carlo, conforme apresentado e recomendado no Capítulo 3. Combinando estes fatores, escoamento de fluido compressível e a avaliação da incerteza, espera-se propor uma região de operação seguras, com base na incerteza das curvas, e mais próximas dos limites operacionais, e por consequência alcançar uma operação mais eficiente do compressor.

4.1 Modelo para o compressor

Compressores centrífugos são equipamentos de operação contínua. O processo pelo qual o compressor realiza a tarefa a qual é projetado, baseia-se na transformação da energia mecânica em energia cinética, via o torque de um eixo de rotação, e esta em energia potencial (aumento da pressão) na saída do compressor como mostrado na Figura 4.1. O gás entra pelo impelidor, que possui pás acopladas ao eixo. Ao passar por estas pás, elas deslocam o gás que por sua vez adquire energia cinética. Logo após, o gás passa pelo difusor e finalmente pelo indutor, onde a variação da área de escoamento transforma a energia cinética em aumento de pressão. As velocidades do gás no interior do compressor são muitas altas e existem inúmeros percalços ao

longo do escoamento. Como consequência há a transformação de parte da energia transferida, por exemplo em energia térmica ou sonora.

Figura 4.1: Ilustração do funcionamento de uma compressor centrífugo.



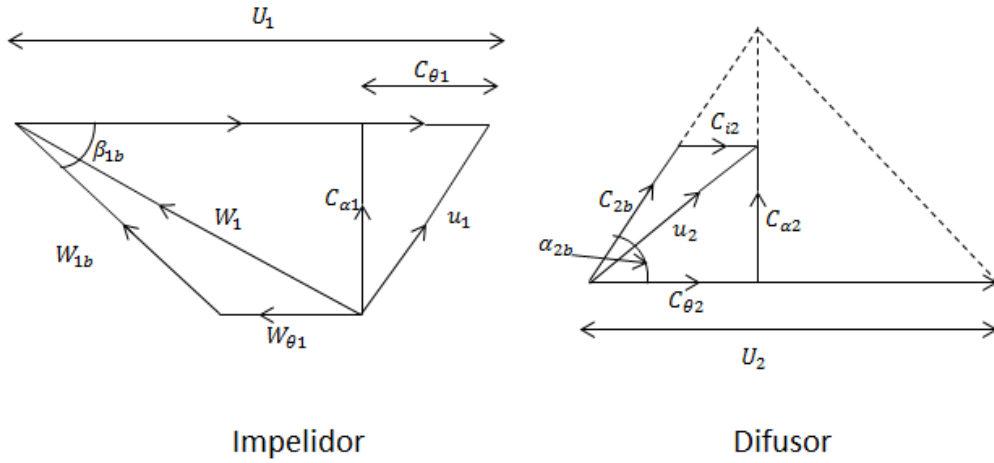
Fonte: <http://canalpiloto.com.br/>

A Figura 4.2 apresenta o perfil de velocidade do fluido na entrada do impelidor e do difusor, respectivamente. A velocidade total do gás u_i pode ser decomposta em duas componentes ortogonais, C_{α_i} e C_{θ_i} , que correspondem a velocidade devido ao escoamento e a velocidade de rotação adquirida no impelidor, respectivamente. A velocidade na entrada, u_1 ainda pode ser decomposta na velocidade W_{1b} e U_1 , que correspondem a velocidade do fluido tangencial às pás do impelidor e a velocidade centrípeta das pás da entrada do impelidor, respectivamente. De forma semelhante a velocidade u_2 também pode ser decompostas em duas outras C_{2b} velocidade uma tangencial ao ângulo de saída das pás, α_{2b} , e a velocidade centrípeta das pás na saída do impelidor, U_2 .

Com base na geometria da Figura 4.2, a energia recebida pelo gás pode ser expressa pelo torque do compressor, representado pela Eq 4.1, pela abordagem de Euler. Esta equação descreve como a energia cinética recebida pelo gás, também chamada de trabalho de compressão está relacionada à velocidade de rotação do fluido no compressor C_{θ_1} e C_{θ_2} em diferentes diâmetros representado pela Figura 4.3.

$$W_{eixo} = \omega \tau = \omega m \cdot (r_2 C_{\theta_2} - r_1 C_{\theta_1}) \quad (4.1)$$

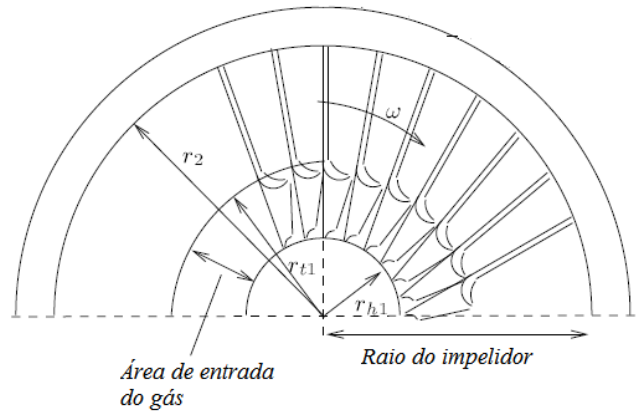
Figura 4.2: Componentes da velocidade na entrada do impelidor e do difusor



onde ω é a velocidade angular do eixo de rotação, m é a vazão mássica, $C_{\theta 1}$ e $C_{\theta 2}$ são as componentes da velocidade do gás paralela à ω na entrada e saída do impelidor, respectivamente, como apresentado na Figura 4.2. r_2 é o raio da saída do impelidor com centro no eixo de rotação e r_1 é o raio médio na entrada do impelidor descrito por Eq. 4.2 (GRAVD AHL, 1998).

$$r_1 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r_{t1}^2 + r_{h1}^2}{2}} \quad (4.2)$$

Figura 4.3: Ilustração do impelidor.



Fonte: Adaptado de Gravdahl (1998)

Com a Eq. 4.1, o trabalho por unidade de massa fornecido ao gás é expresso pela Eq. 4.3.

$$w_{eixo} = U_2 C_{\theta 2} - U_1 C_{\theta 1} \quad (4.3)$$

onde U_i é a velocidade de rotação periférica das pás do impelidor paralelas à ω no raio r_i e pode ser descrita por: ωr_i .

Gravdahl et al. (2000) cita algumas simplificações para resolver a Eq. 4.3:

- A componente de rotação da velocidade do gás na entrada do impelidor é zero ou seja, $C_{\theta 1} = 0$;

- Pode-se definir uma variável σ como $C_{\theta 2}/U_2$, que pode ser calculada pela Eq. 4.4 (GRONG, 2009);

$$\sigma = 1 - \frac{2}{N_b} \frac{\sin(\beta_{2b})}{1 - \frac{C_{\alpha 2}}{U_2} \cot(\beta_{2b})} \quad (4.4)$$

onde N_b é o número de lâminas no impelidor, β_{2b} é o ângulo da lâmina na saída do impelidor.

- O ângulo das pás na saída do impelido β_{2b} é de 90° .

Dessa forma o trabalho fornecido pelo compressor pode ser descrito pela Eq. 4.5.

$$w_{eixo} = \sigma \cdot U_2^2 \quad (4.5)$$

O trabalho calculado pela Eq. 4.5 é toda a energia que o compressor fornece ao gás. Contudo, nem toda energia recebida pelo gás é transformada em aumento de pressão devido a presença de perdas de carga. Por consequência, para que seja possível a obtenção das curvas do compressor essas perdas devem ser dimensionadas.

A presença de perdas no compressor também remete à existência de uma eficiência, que seria dada pela razão da energia realmente aproveitada para compressão e a energia total que o compressor fornece ao gás, como está descrito na Eq. 4.6.

$$\eta = \frac{w_{eixo} - \Phi_{total}}{w_{eixo}}, \Phi_{total} = \Phi_{inci,imp} + \Phi_{fric,imp} + \Phi_{inci,dif} + \Phi_{fric,dif} \quad (4.6)$$

onde o termo Φ_{total} é a soma de todas as perdas sofridas pelo gás ao longo do escoamento no interior do compressor e η é a eficiência do compressor.

Há várias perdas presentes no compressor, como perda na sua entrada, perda por vazamento, perda por fricção nos seus discos, dentre outras (ROMUALDO, 2011; KUS; NEKSA, 2013). Contudo, Gravdahl et al. (2000) demonstram que as perdas por fricção e incidência são as que mais impactam nas curvas do compressor. Por esta razão, foram consideradas relevantes apenas estas perdas para a construção das

curvas, como será descrito nas próximas subsecções.

4.1.1 Perdas por incidência

A perda de carga por incidência é resultado do choque entre as moléculas do gás e os desvios de deslocamento, qual sejam: a entrada tanto no difusor como no impelidor. Devido ao choque, parte da energia cinética do gás é convertida em outras formas de energia, e como consequência a direção da velocidade do gás é alterada. Como pode ser observada na Figura 4.2, com a alteração da direção de escoamento do gás, surgem componentes da velocidade identificadas como $W_{\theta 1}$ e C_{i2} , para a entrada do impelidor e difusor, respectivamente. Neste caso a perda de carga é fornecida pelas Equações 4.7 e 4.8 (WATSON; JANOTA, 1982).

$$\Phi_{inci,imp} = \frac{W_{\theta 1}^2}{2} \quad (4.7)$$

$$\Phi_{inci,dif} = \frac{C_{i2}^2}{2} \quad (4.8)$$

Para o impelidor através de geometria, apresentada na Figura 4.2 o valor de $W_{\theta 1}$ é expresso pela Eq. 4.9.

$$W_{\theta 1} = U_1 - C_{\theta 1} - C_{\alpha 1} \quad (4.9)$$

Como observado no item anterior o valor de $C_{\theta 1}$ é aproximadamente zero. E o componente da velocidade do gás perpendicular à velocidade de rotação do eixo, $C_{\alpha 1}$ é equivalente à velocidade do gás devido ao escoamento. Pela equação da continuidade esta velocidade é calculada pela Eq. 4.10.

$$C_{\alpha 1} = \frac{m}{\rho A_1} \quad (4.10)$$

onde m é a vazão mássica, ρ é a densidade do gás e A_1 é área na entrada do impelidor descrita por πr_1^2 .

Rearrmando Eq. 4.7, Eq. 4.9 e Eq. 4.10 tem-se a expressão para a perda por incidência no impelidor, em que ρ_{01} é a densidade do gás na entrada do impelidor,

apresentado na Eq. 4.11 (GRAVDAHL et al., 2000).

$$\Phi_{inci,imp} = 0.5 \cdot \left(U_1 - \frac{m \cdot \cotg(\beta_{1b})}{\rho_{01} A_1} \right)^2 \quad (4.11)$$

onde U_1 é a velocidade periférica das lâminas do compressor e β_{1b} é o ângulo das lâminas na entrada do impelidor.

Para o difusor, de modo similar ao impelidor, aplicando operações geométricas como explícito na Figura 4.2, obtém-se que o valor de C_{i2} é expresso por:

$$C_{i2} = C_{\theta 2} - C_{\alpha 2} \cotg(\alpha_{2b}) \quad (4.12)$$

onde valor de $C_{\theta 2}$ pode ser calculado por σU_2 , e a velocidade $C_{\alpha 2}$ é oriunda do escoamento. Pela equação da continuidade pode ser dado pela Eq. 4.10, entretanto ρ nesta etapa é referente à entrada do difusor. Já valor de α_{2b} é o ângulo entre velocidade do gás e a velocidade de rotação, e é descrito pela Eq. 4.13, com base na geometria da Figura 4.2.

$$\alpha_{2b} = \text{atan} \left(\frac{D_1 \cotg(\beta_{1b})}{\sigma D_2} \right) \quad (4.13)$$

Novamente, reestruturando Eq. 4.8, Eq. 4.12 e Eq. 4.13, chega-se a equação que descreve a perda por incidência no difusor (GRAVDAHL et al., 2000) pode ser expressa por:

$$\Phi_{inci,dif} = 0.5 \cdot \left(\sigma \cdot U_2 - \frac{m \cdot \cotg(\alpha_{2b})}{\rho_{imp} A} \right)^2 \quad (4.14)$$

Em resumo as perdas por incidência são calculadas pelas Eq. 4.11 e Eq. 4.14.

4.1.2 Perdas por fricção

Além das perdas por incidência têm-se também as perdas por fricção. São oriundas do atrito entre o gás e a estrutura do impelidor e do difusor. Ou seja, ao longo do caminho a ser percorrido já descontados as perdas na entrada tanto no impelidor quanto no difusor. Ferguson (1963) apud (GRAVDAHL, 1998) demonstra que para estes casos as perdas por fricção podem ser calculadas pelas Eq. 4.15 para o

impelidor.

$$\Phi_{fric,imp} = k \cdot \frac{fl_{imp}}{D_{eq}} \cdot \frac{W_{1b}^2}{2} \quad (4.15)$$

onde l_{imp} é comprimento hidráulico médio no impelidor. D_{eq} é o diâmetro equivalente do escoamento dado por $4A/a$ onde A é área de escoamento e a é o perímetro do mesmo. f é o fator de atrito e k é a constante do fator de atrito, igual a 4 se for utilizado o fator de Fanning e igual a 1 se for empregado o fator de Darcy.

Rearrmando a Eq. 4.15, tendo como base a geometria apresentada da Figura 4.2, encontram-se as expressões fornecidas pelas Equações 4.14 e 4.17 que descrevem as perdas de carga no impelidor.

$$\Phi_{fric,dif} = \frac{kf \cdot l_{imp}}{2D_{eq} (\rho_{imp} \cdot A \cdot \text{sen}(\beta_{1b}))^2} \cdot m^2 = K_{imp}m^2 \quad (4.16)$$

Já para o difusor há uma relação semelhante que pode ser adotada, como apresentada pela Eq. 4.17 (GRAVDAHL et al., 2000; JIANG; KHAN; DOUGAL, 2006; GRONG, 2009).

$$\Phi_{fric,dif} = \frac{kf \cdot l_{dif}}{2D_{eq} (\rho_{dif} \cdot A \cdot \text{sen}(\beta_{1b}))^2} \cdot m^2 = K_{dif}m^2 \quad (4.17)$$

onde l_d é comprimento hidráulico médio no difusor, ρ_{imp} e ρ_{dif} são as densidades no impelidor e difusor, respectivamente.

Dessa forma, através Eq. 4.11, Eq. 4.14, Eq. 4.16 e Eq. 4.17, é possível estimar a perda de carga e assim obter uma eficiência mecânica. Nota-se que pela Eq. 4.5 as curvas do compressor dependem apenas da rotação do eixo, entretanto como as equações da perda de carga também são funções da vazão, as curvas do compressor se tornam dependentes tanto da vazão mássica quanto da rotação do compressor, conforme exemplificado na Figura 1.1. É possível notar também que a densidade do gás está presente na descrição das perdas de carga. E por ser propriedade de um gás a medida que o gás sofre conversão de um tipo de energia para outra, o seu valor se altera em um escoamento compressível. Embora este efeito seja relevante, a literatura simplifica o escoamento no compressor, e considera que a densidade do gás segue como se o comportamento fosse de escoamento incompressível (GRAVDAHL

et al., 2000; GRONG, 2009), ou seja, a densidade permanece a mesma ao longo do compressor e igual à densidade de entrada. Em um aspecto diverso desta tendência, esse trabalho propõe aplicar os conceitos de escoamento compressível para calcular as perdas e por sua vez uma estimativa mais realista da eficiência do compressor.

4.1.3 Aplicação do escoamento compressível

Como foi mostrado nas subsecções 4.1.1 e 4.1.2, a densidade do fluido é uma das propriedades necessárias para o cálculo da perda de carga no compressor. Entretanto Gravidahl et al. (2000) ainda consideram escoamento incompressível, ou seja densidade constante ao tratar de perda de carga em compressores, de modo a simplificar o cálculo. Deste modo, para eliminar essa simplificação, as equações de escoamento compressível vistas na Secção 2.2 devem ser aplicadas.

Portanto é necessário fazer uso do balanço de energia térmica, 2.11, e do balanço de energia mecânica, 2.13 no modelo do compressor adiabático (MEIRA et al., 2015).

$$dh + u \cdot du = dw_{eixo} \quad (4.18)$$

$$\frac{u}{V^2} \cdot du + \frac{dl_w}{V^2} + \frac{dP}{V} = \frac{dw_{eixo}}{V^2} \quad (4.19)$$

onde dh é a diferenciação da entalpia, u é a velocidade do gás, w_{eixo} é o trabalho de eixo do compressor e l_w é a perda de carga ao longo do escoamento.

Como visto na Figura 4.2, a velocidade do gás u no compressor possui duas componentes, uma devida ao escoamento C_α e outra oriunda da rotação do impelidor C_θ , como apresentado na Eq. 4.20.

$$u = \sqrt{C_\alpha^2 + C_\theta^2} \quad (4.20)$$

Como abordado na Subsecção 4.1.1, a velocidade devida ao escoamento é calculada pela Eq. 4.10. Como a vazão mássica é constante no escoamento estacionário e considerando que a área ao longo do compressor é constante ao longo do escoamento, chega-se a expressão da velocidade do gás, u e sua diferencial total du , apresentadas

na Eq. 4.21 e Eq. 4.22 respectivamente.

$$u = \sqrt{\left(\frac{m \cdot V}{A}\right)^2 + C_\theta^2} \quad (4.21)$$

$$du = \frac{1}{u} \left(\frac{m^2}{A^2} V \cdot dV + C_\theta \cdot dC_\theta \right) \quad (4.22)$$

Ao serem combinadas Equações 4.21, 4.22 e 4.18, e também a equação da continuidade, encontra-se o balanço de energia térmica, Eq. 4.23 e o balanço da energia mecânica, Eq. 4.24, ambas para o impelidor do compressor.

$$\int dh + \int \frac{m^2}{A^2} V \cdot dV + \int C_\theta \cdot dC_\theta = w_{eixo} \quad (4.23)$$

$$\int \frac{m^2}{A^2} \frac{1}{V} \cdot dV + \int \frac{1}{V^2} C_\theta dC_\theta + \int \frac{dl_w}{V^2} + \int \frac{dP}{V} = \int \frac{dw_{eixo}}{V^2} \quad (4.24)$$

onde a parcela dP/V é calculada através da diferenciação total de P , como descrito pela Eq. 2.17, e o cálculo para a utilização das equações de estado estão apresentadas no Anexo A. A variação de entalpia na Eq. 4.23 é calculada através da expressão exibida na Eq. 2.8.

Em resumo, como podem ser observadas, as Eq. 4.23 e Eq. 4.24 consistem em um sistema de equações algébricas cujas incógnitas são a temperatura, T , e o volume molar, V para uma equação de estado explícita na pressão e para valores de vazão e rotação conhecidos. Como as partes do compressor relevantes para o estudo são o impelidor e o difusor, esse sistema deve ser resolvido para ambas as partes.

Para o impelidor a variação de C_θ vai de $C_{\theta 1}$ à $C_{\theta 2}$, convencionados na secção 4.1 como aproximadamente zero e σU_2 respectivamente. Todo o trabalho realizado pelo compressor se dá no impelidor, assim nesse caso o valor de w_{eixo} é fornecido pela Eq. 4.5.

Já para o difusor, não há trabalho sendo exercido sobre o gás, e também a variação de C_θ é nula, simplificando o sistema para as Equações 4.25 e 4.26

$$\int dh + \int \frac{m^2}{A^2} V \cdot dV = 0 \quad (4.25)$$

$$\int \frac{m^2}{A^2} \frac{1}{V} \cdot dV + \int \frac{dl_w}{V^2} + \int \frac{dP}{V} = 0 \quad (4.26)$$

O valor de $\int \frac{dl_w}{V^2}$ é a soma das perdas por incidência e por fricção para cada parte do compressor, como é mostrado na Eq. 4.27.

$$\int \frac{dl_w}{V^2} = \frac{1}{V^2}(\Phi_{j,inci} + \Phi_{j,fric}) \quad (4.27)$$

Com a resolução dos sistemas algébricos das equações, Eq. 4.23 à Eq. 4.27, é possível obter o valor das densidades em cada parte do compressor. Também, é possível determinar as perdas de energias no seu interior. Desta maneira, é possível estimar a sua eficiência pela Eq. 4.6. Também os perfis de temperatura e pressão em cada parte do equipamento podem ser obtidos, o que pode ser interessante para o projeto destes equipamentos, auxiliando na escolha do material do compressor bem como isolamento.

4.2 Cálculo das curvas do compressor

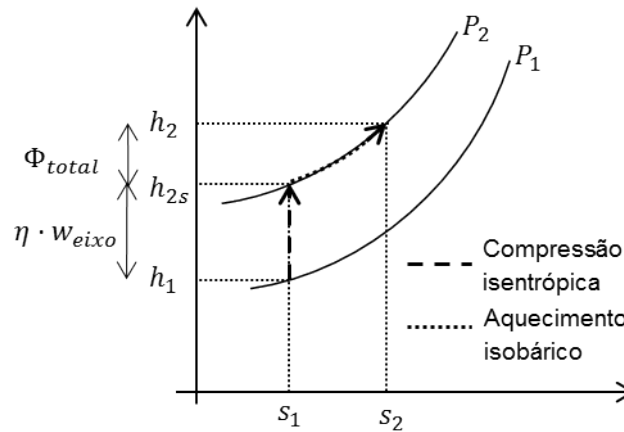
Com base nas equações apresentadas na secção 4.1 pode-se calcular as curvas de um compressor centrífugos, sendo as mais importantes: as curvas de razão de compressão, a curva de *surge* e a curva de *stonewall*. As próximas subsecções tratarão dos cálculos e métodos numéricos para a descrição destas curvas.

4.2.1 Curvas de razão de compressão

As curvas de razão da pressão de descarga pela pressão de sucção, são calculadas variando a vazão mássica e a rotação do compressor. Com estes valores, se conhecendo-se as condições de entrada do compressor, podem ser resolvidos o sistema formados pelas equações da Eq.4.23 e Eq. 4.24 para o impelidor, e o sistema formado pelas Eq.4.25 e Eq. 4.26 para o difusor. O resultado da resolução destes sistemas de equações algébricas fornece a temperatura e o volume molar em cada uma destas partes do compressor, e conseqüentemente, as respectivas perdas de carga.

Uma vez que se conhecem as perdas de energia calcula-se a eficiência do processo de compressão pela Eq. 4.6. Com a eficiência do compressor, podem ser calculadas as condições de temperatura e pressão na descarga do compressor. Para este cálculo, pode-se dividir o processo de compressão em duas etapas conforme discutido no

Figura 4.4: Diagrama entalpia versus entropia do processo de compressão.



Apêndice B e descrito pela Figura 4.4:

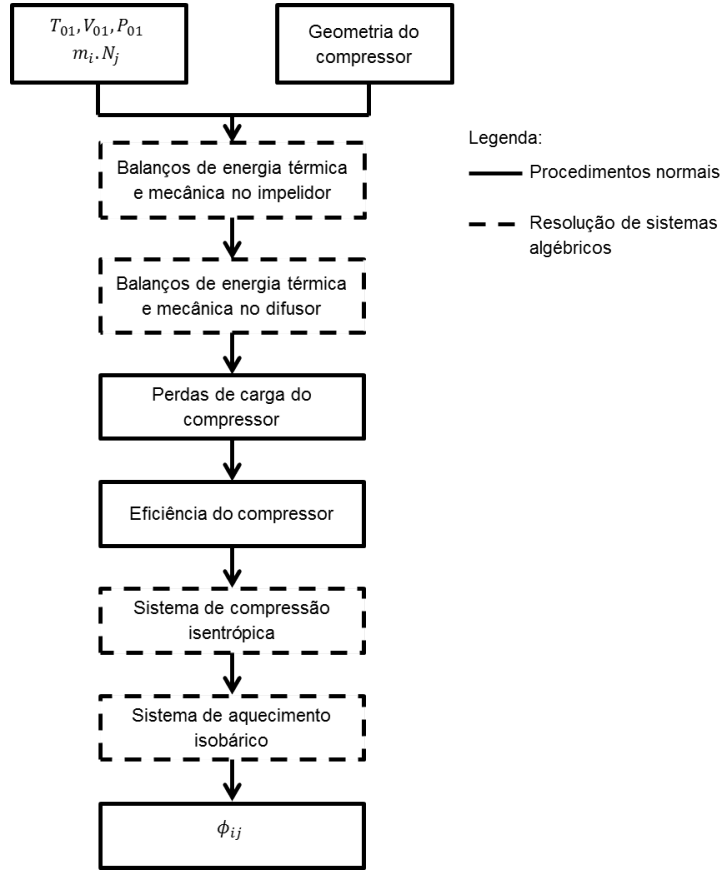
- Compressão adiabática isentrópica, representada pelo sistema formado por Eq. B.5 e B.6.
- Aquecimento isobárico, representado pelo sistema formado por formado por Eq. B.1 e B.2.

A resolução dos dois processos referenciados pela Figura 4.4, através das equações apresentadas na secção 2, retorna a temperatura e o volume molar. Finalmente com estas variáveis, calcula-se a pressão da descarga e tem-se a razão de compressão. Este cálculo é efetuado para cada valor de vazão e rotação que constitui as curvas. A Figura 4.5 mostra um diagrama de bloco para o cálculo das curvas, onde deve ser conhecida a geometria do compressor, as condições de entrada do gás, a vazão mássica e a rotação do eixo para iniciar o cálculo.

4.2.2 Curva de *surge*

A curva de *surge* é caracterizada como os pontos de máxima eficiência das curvas de um compressor centrífugo, dependente da rotação. Tendo em vista esta definição, para determinar a curva de *surge* deve-se encontrar a vazão mássica na qual, a eficiência é máxima ou a perda de carga total do compressor é mínima, conforme

Figura 4.5: Diagrama para o cálculo da curvas de razão de compressão.



expresso pela Eq. 4.28.

$$\min_m \Phi_{total} \quad (4.28)$$

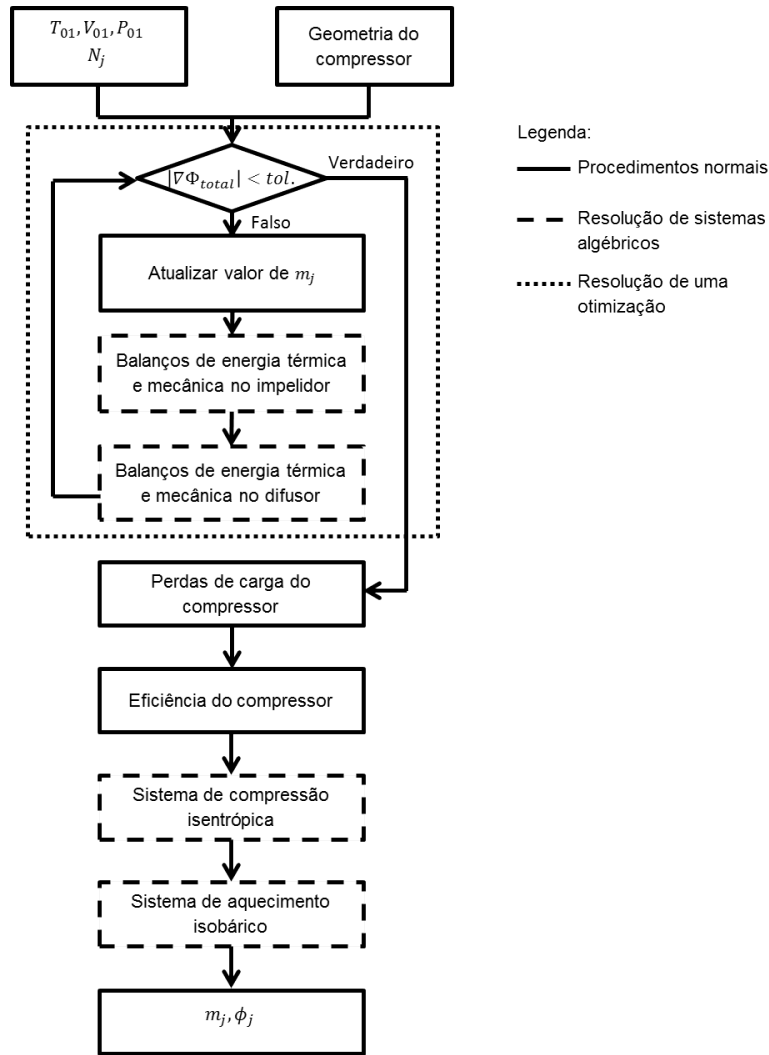
O ponto de *surge* então é obtido realizando a otimização expressa pela Eq. 4.28, em que o Φ_{total} é calculado com base na resolução dos sistemas constituída pelas Eq.4.23 e Eq. 4.24, e Eq.4.25 e Eq. 4.26.

Sendo conhecido o valor de Φ_{total} , e a vazão mássica, os mesmos passos podem ser utilizados para o cálculo da razão de compressão no *surge*. O diagrama de blocos expresso pela Figura 4.6 mostra com mais detalhe como é calculada o ponto de *surge* para cada rotação.

4.2.3 Curva de *stonewall*

Como já citado a curva de *stonewall* representa os pontos na qual a velocidade do gás no difusor atinge a velocidade do som. Este problema também pode ser expresso na forma do número de Mach cujo valor dever ser igual à 1, como mostrado na Eq.

Figura 4.6: Diagrama para o cálculo da curva de *surge*.



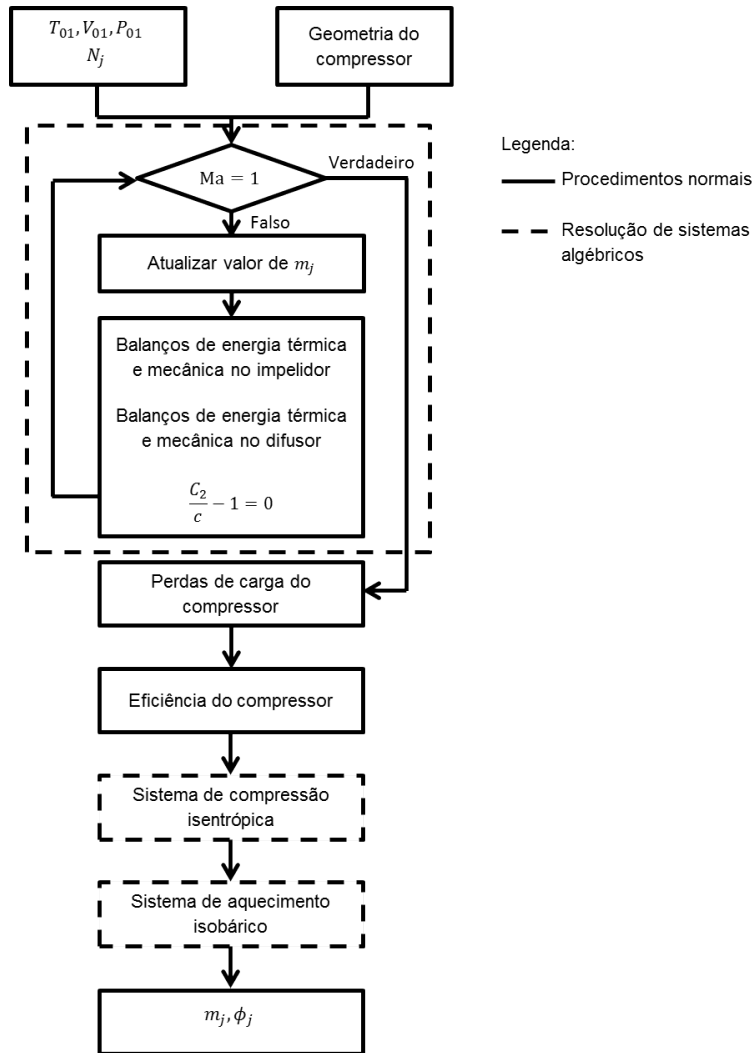
4.29.

$$Ma = u_{dif}/c = 1 \quad (4.29)$$

onde c é a velocidade do som no gás que pode ser explícita pela Eq. 2.2, e u_{dif} é a velocidade do gás no difusor dada pela Eq. 4.21.

O cálculo da curva de *stonewall* envolve, como na curva de *surge*, encontrar o valor da vazão, na qual o fenômeno acontece. Entretanto, diferente da curva de *surge* que era obtida através de uma otimização, a curva de *stonewall* será obtida através da resolução de um sistema de equações algébricas formado pelas Eq.4.23, Eq. 4.24, Eq.4.25, Eq. 4.26 e Eq. 4.29. A diferença fundamental neste caso é que os sistemas que descrevem o impelidor e o difusor serão resolvidos todos simultaneamente (nos outros casos eram resolvidos separadamente ao longo das iterações). Novamente

Figura 4.7: Diagrama para o cálculo da curva de *stonewall*.



uma vez que a vazão mássica no *stonewall* esteja definida, basta calcular a razão de compressão semelhante às outras curvas, a Figura 4.7 mostra um digrama que descreve essa etapa.

4.3 Materiais e Métodos

O objetivo desta etapa da pesquisa é construir e avaliar as curvas características com diferentes gases, para o compressor utilizado por Grong (2009). Suas especificações estão dispostas no Anexo E. Este compressor foi utilizado em todos os estudos de caso deste trabalho, devido à falta de dados da geometria do compressor em casos industriais.

As curvas características foram obtidas com a metodologia apresentada na Sec-

ção 4.2. Para cada rotação foi calculada a curva de razão de compressão, o ponto de *surge* e o ponto de *stonewall*. As estimativas iniciais para a resolução dos sistemas algébricos do cálculo das curvas de razão de compressão foram inicialmente consideradas as condições de entrada do compressor, e atualizadas do ponto anterior para os pontos seguintes. As estimativas iniciais das curvas de *surge* e *stonewall* foram consideradas pelos pontos mais próximos dos mesmo na curva de razão de compressão.

Como foi descrito no Capítulo 1, além das curvas do compressor há também uma preocupação com a sua operação, principalmente com relação ao *surge* e *stonewall*. (OLDŘICH, 2004) aconselha que a curva de operação de *surge* seja 10 % do valor da vazão mássica da curva de *surge*. De modo a superar aproximações grosseiras, este trabalho propõe o uso da incerteza das curvas de *surge* e *stonewall* para estimar a curvas de operação do compressor, que poderão ser utilizadas como referência pelos operadores e para o sistema controle.

Contudo em todos os cálculos as variáveis de entrada e o próprio modelo têm incertezas, e para a avaliação da incerteza da grandeza de saída foi utilizado o método de Monte Carlo, descrito e recomendado no Capítulo 3. No entanto, nesta pesquisa considerou-se que as incertezas devido aos parâmetros dos modelos utilizados são desprezíveis em relação à influência das incertezas das grandezas de entrada, ou seja modelo perfeito. Caso isto não fosse considerado, dever-se-ia levar em conta a incerteza dos parâmetros estimados das equações de estado e constantes adotadas.

As simulações foram efetuadas no *software* MATLAB[®], que conta com várias funções de métodos numéricos. Os sistemas de equações algébricas foram resolvidos através do método da Região de Confiança (CONN; GOULD; TOINT, 2000; NOCEDAL; WRIGHT, 2006) através da função *fsolve* implementada no MATLAB[®]. Este método transforma um sistema de equações algébricas em uma função objetivo a ser minimizada. Os parâmetros de parada do método foram definidos como sendo 10^{-8} para o erro das funções algébricas e também para a variação das variáveis calculadas.

As otimizações, necessária para a curva de *surge*, foram realizadas através da função *fmincon* com o algoritmo de conjuntos ativos, “*active-set*” (POWELL, 1978). Os parâmetros de parada do método foram definidos 10^{-8} para o erro do gradiente

Tabela 4.1: Composição dos gases estudados em percentagem

Componente	Ar ¹	Gás de síntese ²	Gás natural ³
CH ₄	-	2,82	85,88
N ₂	79,0	1,51	0,53
H ₂	-	70,92	-
CO ₂	-	9,28	0,64
CO	-	15,47	-
O ₂	21,0	-	-
C ₂ H ₆	-	-	8,30
C ₃ H ₈	-	-	3,07
nC ₄ H ₁₀	-	-	0,85
iC ₄ H ₁₀	-	-	0,47
C ₅ H ₁₂	-	-	0,24

Fonte: ¹ Considerado neste trabalho, ² Dados industriais,
³<http://sites.petrobras.com.br/minisite/premiotecnologia/index.asp>

da função objetivo e também para a variação das variáveis calculadas. As restrições utilizadas foram de mínimo e máximo para restringir a região de busca do sistema.

4.4 Resultados e discussões

As simulações das curvas características do compressor centrífugo foram calculadas e implementadas para os seguintes estudos de caso:

- Compressão de ar;
- Compressão de gás natural;
- Compressão de gás de síntese.

Estes sistemas de compressão são usualmente utilizados em plantas termoelétricas e na indústria petroquímica, as composições destas misturas estão apresentadas na Tabela 4.1.

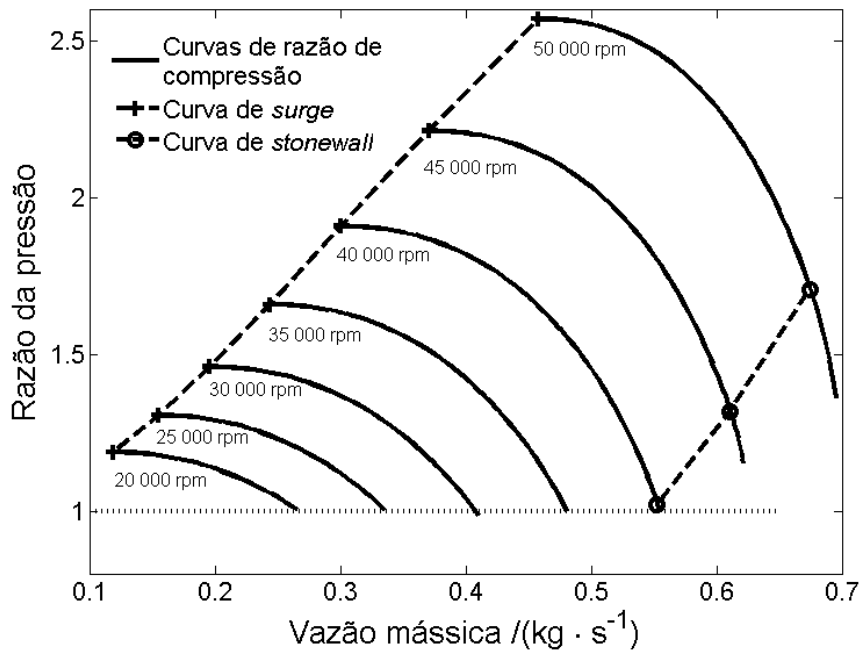
Desta forma é possível avaliar para um mesmo compressor as diferenças das curvas para gases e condições de entrada do compressor.

4.4.1 Estudo de Caso 1: Compressor de ar

Neste primeiro estudo de caso foi reproduzida a simulação de Grong (2009) para um compressor de ar. Foi considerado que o ar é composto apenas por Nitrogênio e

Oxigênio, as condições de sucção do ar estão próximas das atmosféricas, com uma pressão de 101 kPa e uma temperatura de 300 K. A rotação do compressor foi fixada com valores entre 20 000 rpm e 50 000 rpm, espaçados em 5 000 rpm. A equação de estado utilizada foi SRK, apresentada na Eq. 2.18.

Figura 4.8: Curvas características do compressor de ar na região de operação.

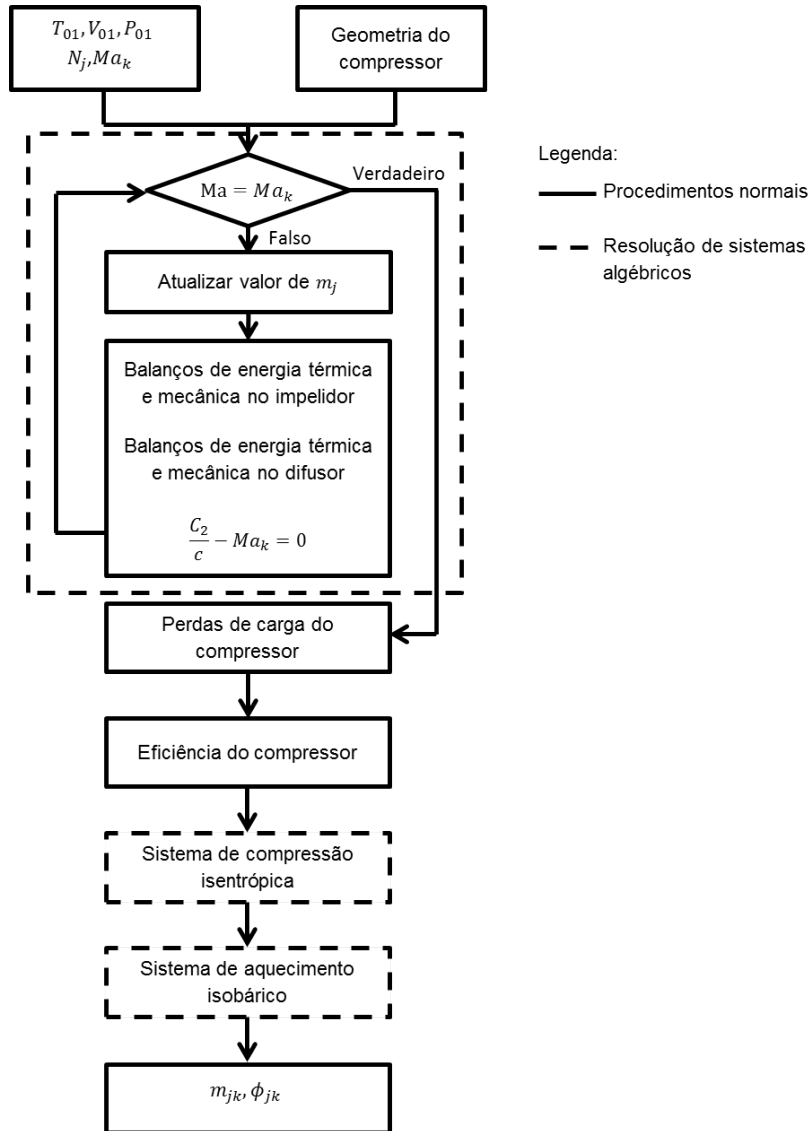


A Figura 4.8 apresenta a simulação das curvas do compressor na região de operação, limitada entre a curva de *surge* e a curva de *stonewall*. Outra limitação é a eficiência do compressor, ela é positiva quando a energia fornecida ao gás é maior que a perda de carga que o mesmo sofre, caso contrário a eficiência é negativa. Isso repercute nas curvas do compressor de modo que quando a eficiência é positiva a razão de compressão é maior que um, e quando negativa a razão de compressão é menor que um.

Ao longo da simulação das curvas de razão de compressão, houve má resolução numérica destas curvas em pontos próximos ao ponto de *stonewall*. Assim, foi constatado que o método de cálculo das curvas apresentado na Subsecção 4.2.1 não convergiu adequadamente com os métodos numéricos do *fsolve* para vazões cujos números de *Mach* são próximos a 1. Entretanto, não houve erros numéricos nos cálculos para os pontos da curvas de *stonewall*, devido ao mesmo ser calculado com uma abordagem diferente, como apresentada na Figura 4.7. Assim decidiu-se aplicar

a estrutura da subsecção 4.2.3 para calcular as curvas de razão de compressão também. Para realizar esta adaptação basta redefinir o número de Mach especificado na Eq. 4.29 como 1, a outros valores menores que 1 que complemente as curvas de razão de compressão, como mostrado no diagrama da Figura 4.9.

Figura 4.9: Diagrama para o cálculo das curvas do compressor para pontos próximos ao *stonewall*.



Este estudo de caso também visa apresentar as diferenças entre os modelos do escoamento compressível, proposto por este trabalho, e escoamento incompressível, implementado na literatura, na modelagem dos compressores. Para isto foram realizadas simulações considerando escoamento de fluido incompressível e gás ideal simultaneamente. A Figura 4.10 apresenta as curvas características do compressor para o ar, calculadas através escoamento compressível do gás SRK e escoamento de fluido incompressível. Nota-se uma grande diferença entre as curvas para al-

tas rotações. Como também que para o ar em baixas rotações o escoamento de fluido incompressível pode descrever as curvas do compressor como apresentado por (GRAVDAHL et al., 2000). Este comportamento é devido a energia transferida ao gás para baixas rotações não serem grandes o suficiente para que a densidade do gás e as suas demais propriedades tenham uma variação significativa. Este comportamento também pode ser visualizado na curva de *surge* dos dois caso como apresentado na Figura 4.11.

Figura 4.10: Curvas características do compressor de ar.

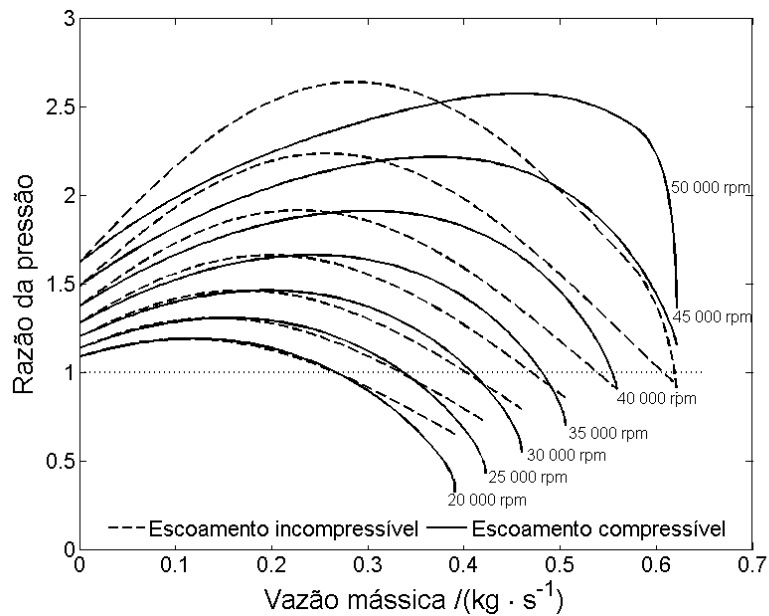
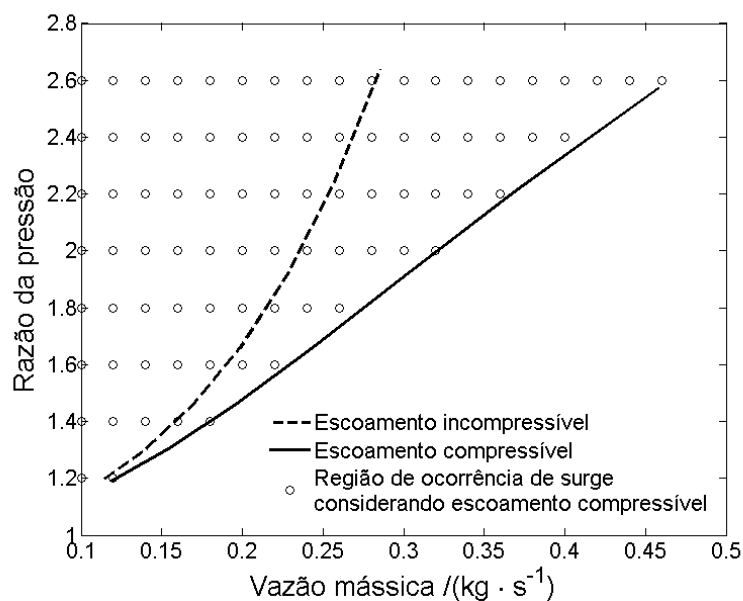
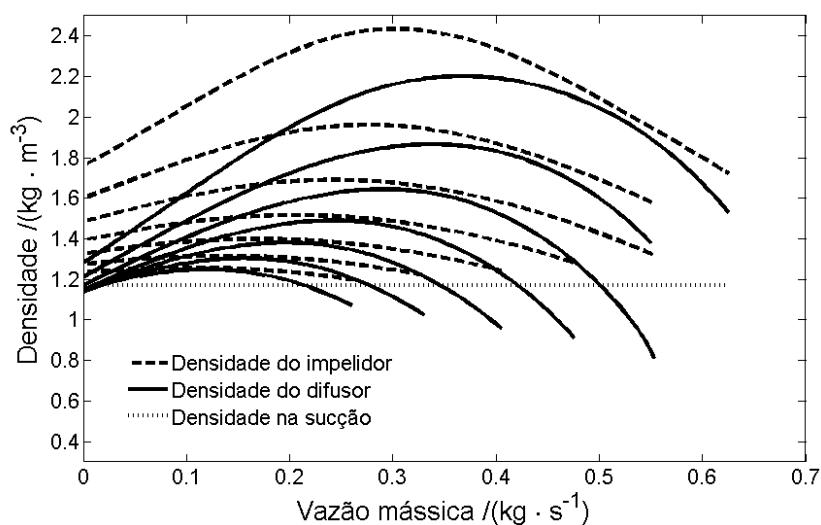


Figura 4.11: Curva de surge da compressão do ar.



A interpretação das curvas características apresentadas nas Figuras 4.10 e 4.11 sugere a inconsistência da utilização de escoamento de fluido incompressível na modelagem de compressores. Este desempenho pode ser melhor observado na Figura 4.12 que apresenta a variação da densidade ao longo do escoamento, sendo que em alguns casos a densidade pode até dobrar para altas rotações. Esta variação justifica como a aplicação do escoamento compressível foi refletida nas curvas do compressor.

Figura 4.12: Perfil da densidade do ar ao longo da compressão.

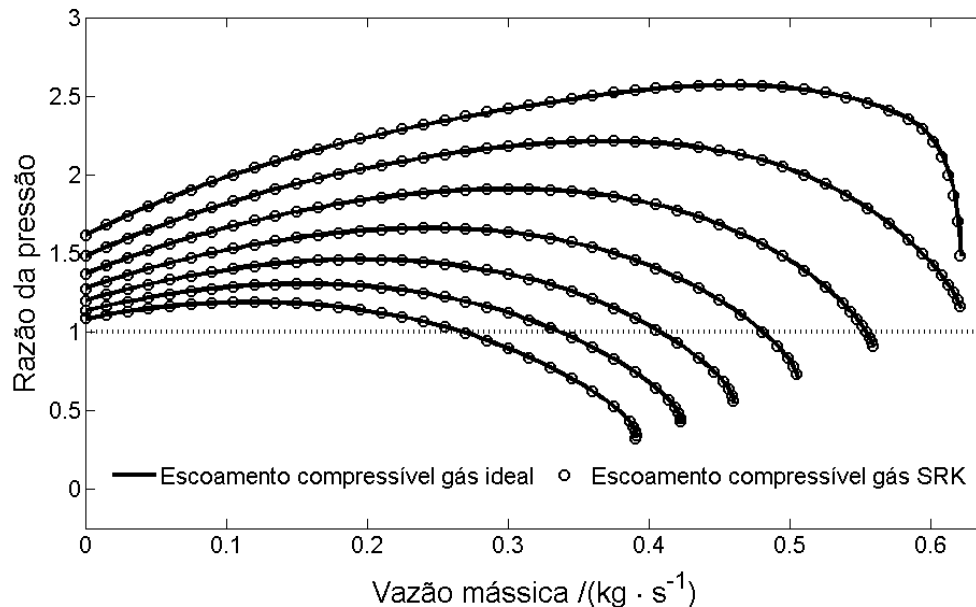


Vale salientar que a curva de *surge* para escoamento a densidade constante está inserido na região de *surge* das curvas do escoamento compressível. Isto sugere que a consideração de fluido incompressível pode levar ao equivoco de que a curva de *surge* definida mantenha a segurança do processo quando isto na verdade não acontece.

Uma apreciação realizada ainda neste estudo de caso foi a caracterização do compressor de ar com escoamento compressível, considerando gás ideal. Esta avaliação foi realizada pois muitos trabalhos nesta área ainda persistem em tratar os fluidos escoando através dos compressores como gases ideais. A Figura 4.13 apresenta a comparação das curvas características entre gás ideal e gás descrito pela equação em SRK um compressor de ar. Nota-se que há uma grande semelhança na reflexão das equações de estado no modelo do compressor, e isto mostra que para este estudo de caso a equação de estado de gás ideal pode ser utilizada. No entanto, isto só foi possível porque as condições de temperatura do gás no compressor estão próximas

às condições atmosféricas, muito distante dos ponto crítico do gás.

Figura 4.13: Curvas características do compressor de ar para escoamento compressível para o gás ideal e gás de SRK.



A Figura 4.8 apresenta a região operacional do compressor, no entanto, na prática as curvas de *surge* e *stonewall* limitam o compressor fenomenologicamente mas não delimitam a sua operação. As condições de processos industriais normalmente possuem variabilidade, assim, há um dado limite de segurança na qual o compressor deve operar, comumente adotado um ajuste de 10 % (OLDřICH, 2004; GOPALA-KRISHNAN; BIEGLER, 2013). A proposta é calcular as curvas de proteção ao *surge* e ao *stonewall* com base na incerteza dos pontos de suas curvas.

4.4.2 Avaliação da incerteza das curvas de operação do compressor de ar

Para a avaliação da incerteza foi considerada que as variáveis do processo seguem uma *PDF* normal. As fontes de incerteza consideradas foram a pressão e a temperatura de sucção e a rotação do compressor, cujas médias e variâncias estão dispostas na Tabela 4.2. Foi realizada, desta forma, a simulação de Monte Carlo, apresentada na secção 3.3, com dez mil pontos. Geralmente a simulação de Monte Carlo requer mais pontos, acima de cem mil (BIPM et al., 2008b), no entanto como as curvas resultantes se aproximam de *PDF*'s gaussianas foi possível utilizar um menor número

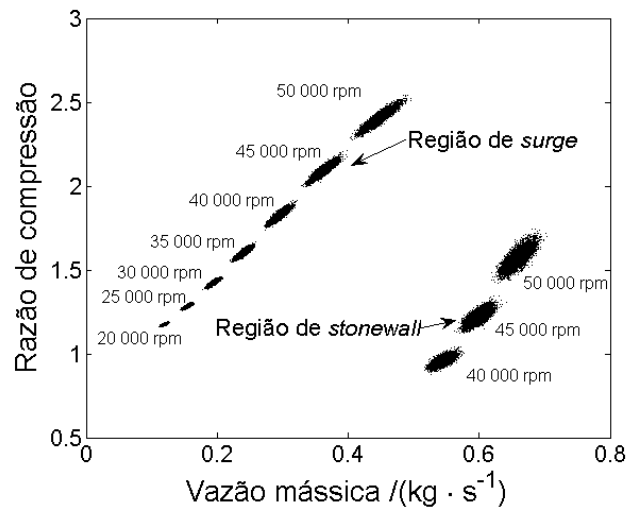
Tabela 4.2: Tabela dos parâmetros das *PDF* das variáveis de entrada do compressor.

Variável	Unidade	Média	Raiz da variância
Temperatura de sucção	K	300	3
Pressão de sucção	kPa	101	1.01
Rotação	rpm	$(20 \text{ à } 50) \times 10^3$	200 à 500

de pontos para descrever as *PDF*'s das grandezas de saída – *PDF*'s das curvas de operação do compressor.

A Figura 4.14 apresenta o resultado da simulação de Monte Carlo para os pontos de *surge* e *stonewall*. Nos casos dos pontos de *stonewall* a simulação foi realizada apenas nas três rotações mais altas, pois para as outras o ponto de *stonewall* se encontra de uma região não operacional, como pode ser avaliado através da Figura 4.8.

Figura 4.14: Simulação de Monte Carlo das curvas de *surge* e *stonewall* para compressão de ar.



Pela Figura 4.14 percebe-se que a região em que o *surge* ou *stonewall* ocorrem aumentam a medida com que aumenta a rotação. Isso era esperado visto que a incerteza da rotação é maior tanto quanto seu valor, 1 %. Outra observação importante é que a projeção dos pontos de Monte Carlo para ambos os casos lembram um elipse, o que sugere que a *PDF* conjunta da razão de compressão e da vazão mássica sejam uma multi-normal. A Figura 4.15 e a Figura 4.16 trazem os histogramas dos pontos de *surge* e *stonewall* para uma rotação de 50 000 rpm, e percebe-se que a distribuição que melhor descreva estes pontos se assemelha a uma *PDF*'s Normal. E este desempenho se repetiu para os demais pontos das curvas.

Figura 4.15: Histograma do ponto de *surge* para uma rotação de 50 000 rpm

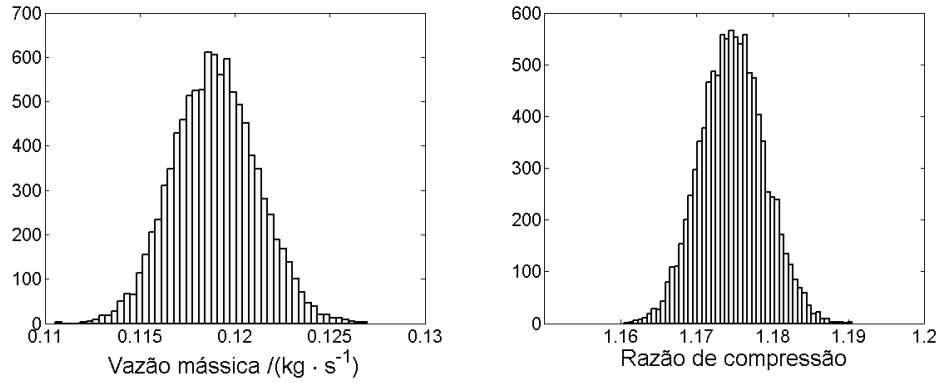
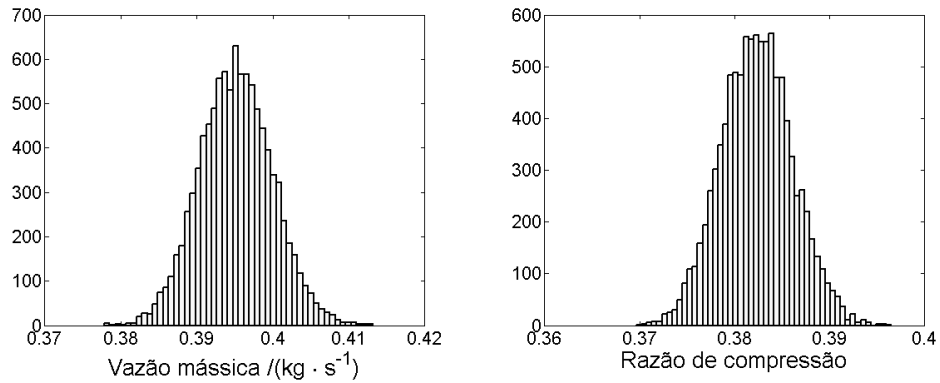


Figura 4.16: Histograma do ponto de *stonewall* para uma rotação de 50 000 rpm.



Antes de propor uma região de abrangência das descreva as regiões de *surge* e *stonewall*, deve-se averiguar se as *PDF*'s seguem realmente uma *PDF* Normal. Dessa forma, como teste de normalidade, padronizou-se os pontos da simulação de Monte Carlo para série com média 0 e desvio-padrão igual à 1. Logo após foi aplicada o teste de normalidade de Kolmogorov-Smirnov (MASSEY, 2010), que se baseia em comparar a *CDF* dos dados com a *CDF* da Normal padronizada, média 0 e variância 1, como apresentada na Eq. 4.30, para uma dada probabilidade de abrangência α , que neste trabalho foi adotada como 0,05. Este método já está implementado no MATLAB[®] através da rotina *kstest*.

$$\max |F(x) - G(x)| \quad (4.30)$$

onde $F(x)$ é a *CDF* dos dados a serem testados e $G(x)$ é a *CDF* da Normal padronizada. O teste falha se o p-valor do mesmo for menor que o fator de abrangência α ou se o KS valor for maior que o valor de C.V. (valor crítico). Na Tabela 4.3, cujos valores em negrito ressaltam os pontos em que não o teste rejeita a hipótese de ser

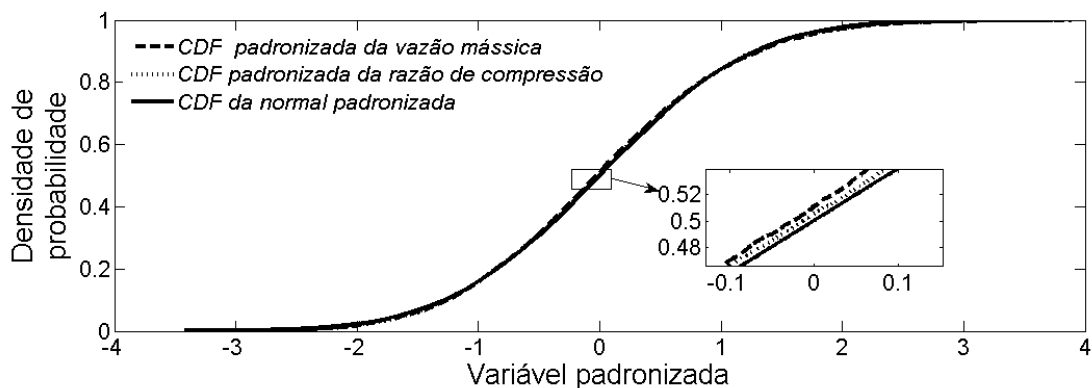
Tabela 4.3: Tabela do teste de normalidade dos pontos de *surge* e *stonewall*

Pontos de <i>surge</i>						
Rotação /(rpm)	Vazão mássica			Razão de compressão		
	KS valor	C.V.	p – valor	KS valor	C.V.	p – valor
20 000	0,0079	0,0107	0,5536	0,0075	0,0107	0,6241
25 000	0,0100	0,0107	0,2635	0,0079	0,0107	0,5601
30 000	0,0108	0,0107	0,1965	0,0123	0,0107	0,0952
35 000	0,0093	0,0107	0,3566	0,0103	0,0107	0,2422
40 000	0,0084	0,0107	0,4793	0,0073	0,0107	0,6617
45 000	0,0103	0,0107	0,2364	0,0079	0,0107	0,5551
50 000	0,0152	0,0107	0,0191	0,0070	0,0107	0,7017
Pontos de <i>stonewall</i>						
40 000	0,0085	0,0136	0,4645	0,0083	0,0136	0,4974
45 000	0,0076	0,0136	0,6006	0,0108	0,0136	0,1899
50 000	0,0133	0,0136	0,0575	0,0108	0,0136	0,1931

uma *PDF* Normal. A Tabela 4.3 apresenta os valores do p-valor, KS valor e C.V., nota-se que para apenas as rotações de 30 000 rpm e 50 000 da curva de *surge* os dados não passaram pelo teste de normalidade (KS valor > C.V.). Essa diferença do teste de normalidade em que apenas três conjuntos de pontos foram rejeitados é reflexo da quantidade pontos baixa utilizada no método de Monte Carlo.

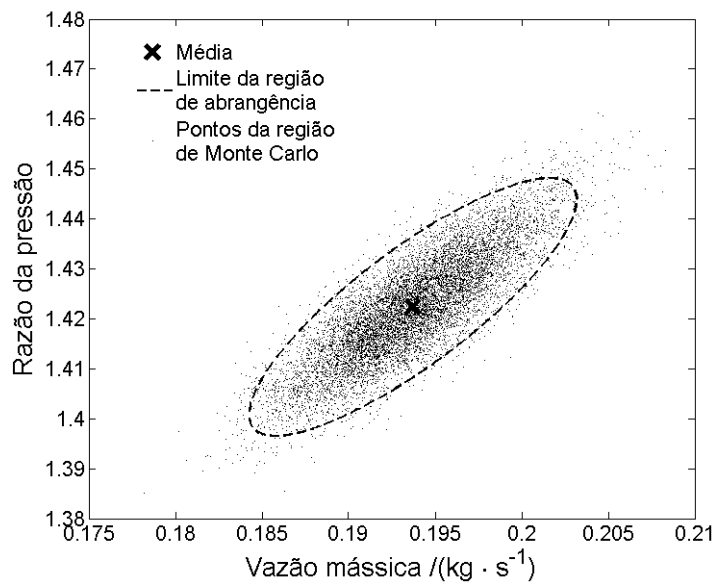
A *CDF* normal padronizada, conforme apresentada na Figura 4.17 da rotação de 50 000 rpm, apresenta que a consideração de normalidade pode ser válida, para simplificar os cálculos, mesmo que o teste de normalidade de Kolmogorov-Smirnov tenha rejeitado esta hipótese. Embora só um teste seja apresentado, todos os outros pontos, inclusive os pontos da rotação de 30 000 rpm apresentaram o mesmo resultado, tanto para a curva de *surge* quanto para a curva de *stonewall*.

Figura 4.17: Teste de normalidade do ponto de *surge* para uma rotação de 50 000 rpm.



Considerando uma probabilidade de abrangência de 95 %, a região de surge pôde ser aproximada para uma elipse, pois os dados seguem uma *PDF* Normal, como pode ser ilustrada na Figura 4.18. A partir deste comportamento foi estabelecida a Região de Abrangência para todos os pontos da simulação de Monte Carlo e as regiões de *surge* e de *stonewall*, conforme mostrado na Figura 4.19. As curvas que delimitam as regiões estudadas são obtidas de forma a tangenciar todas as elipses. Um maior detalhamento dos testes de normalidade dos pontos, e as regiões de abrangência podem ser observadas no Apêndice E.

Figura 4.18: Região de abrangência do ponto de *surge* para uma rotação de 50 000 rpm para uma probabilidade de 95 %.



Além da região de operação a avaliação da incerteza também permite apresentar a região de abrangência das curvas da razão de compressão, como apresentado na Figura 4.20. Nota-se que assim como nos estudos com os pontos de *surge* e *stonewall* a incerteza das curvas aumenta à medida que a rotação cresce. O mesmo acontece com o aumento da vazão mássica, onde para a máxima rotação para uma mesma vazão de operação a pressão de saída do compressor pode diferir em até duas vezes. Estes resultados mostram a relevância da análise da incerteza, e da necessidade de diminuir a variabilidade do compressor, através de, talvez, um bom sistema de controle.

Finalmente pode-se obter as curvas que delimitam a operação do compressor, sendo que para a operação de *surge* foi considerada o limite da região de *surge* com

Figura 4.19: Região de abrangência do ponto de *surge* para uma rotação de 50 000 rpm para uma probabilidade de 95 %.

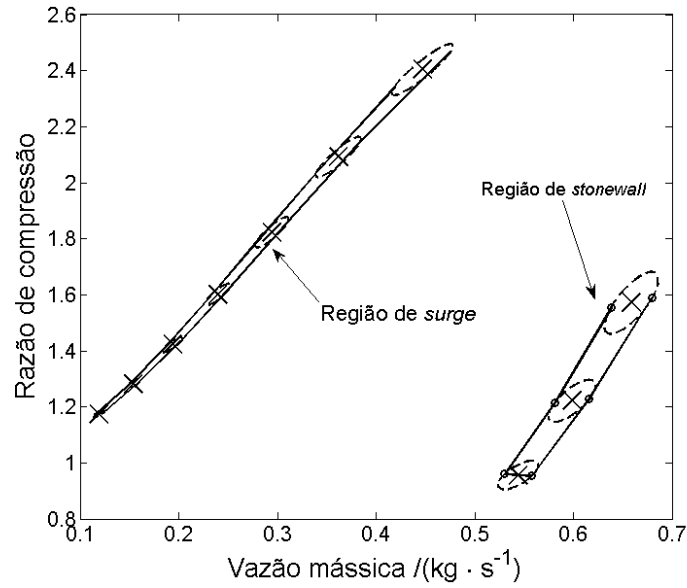
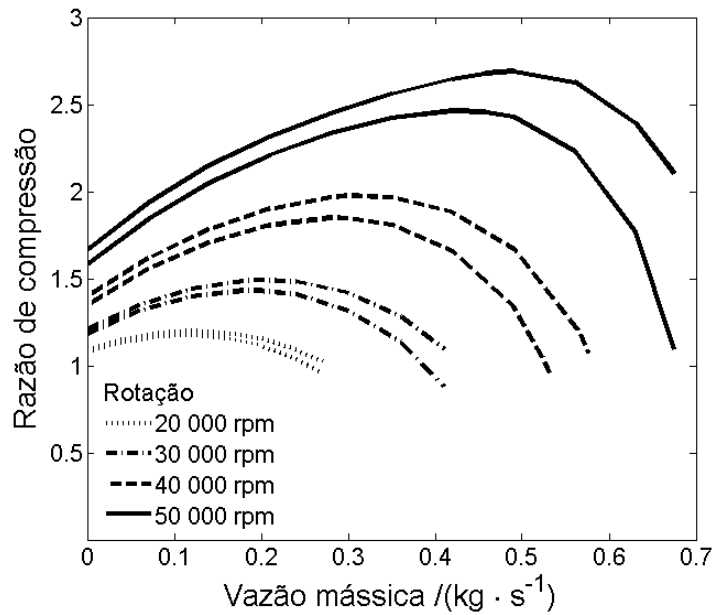


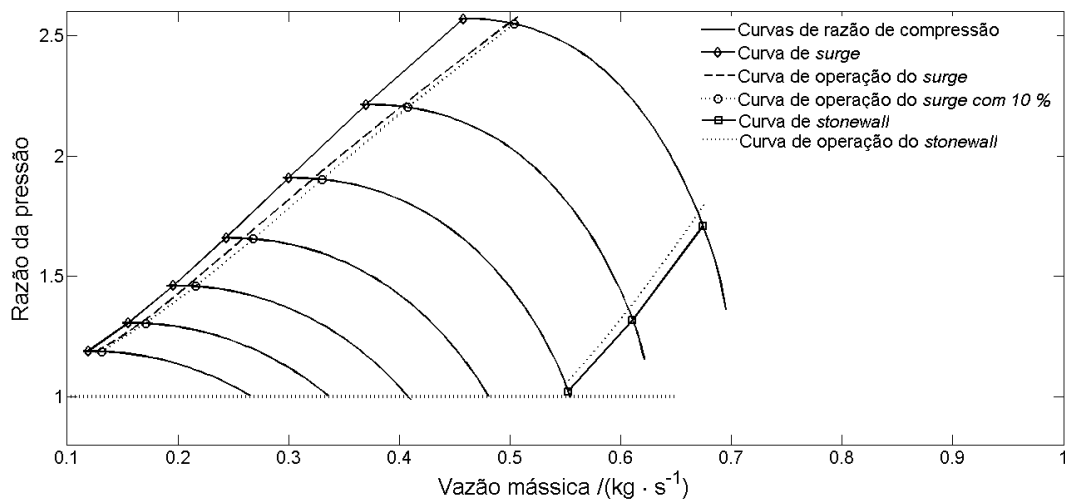
Figura 4.20: Região de abrangência das curvas características do compressor.



maior vazão e para o *stonewall* o limite para menor vazão. A Figura 4.21 apresenta a região de operação da compressão do ar, pelo compressor deste trabalho. Pode-se observar também, na Figura 4.21, a curva de operação proposta pela literatura, considerando um fator sobre a vazão de *surge* de 10 %. Nota-se que a curva obtida pela avaliação da incerteza propõe uma curva de operação mais próxima das condições de maior eficiência, visto que está mais próxima da curva de *surge*, beneficiando

assim o processo, mantendo uma margem de segurança. No entanto, é importante ressaltar que isso só foi possível devido a baixas incertezas das variáveis de entrada, salientando a importância de manter o processo com uma baixa variabilidade, seja por meio de controladores ou medidores bem calibrados. Caso contrário, para processos de alta variabilidade, a curva de operação dada pela incerteza se afastaria da curva nominal de *surge* e portanto dos pontos de maior eficiência.

Figura 4.21: Região de operação da compressão de ar.



Como a curva de *stonewall* é pouco citada como região limitante, devido a sua baixa eficiência, geralmente não há aplicação do fator de segurança para a mesma. Por outro lado a curva de surge se encontra nos pontos de maior eficiência, além de limitar a região estável do compressor. Mesmo assim, a avaliação da incerteza da curva de *stonewall* é importante para um melhor conhecimento e operação do equipamento, e evitar operar sob vibrações. Por fim pode-se utilizar estas curvas para propor estratégias de controle e operação visando aumentar a eficiência do processo, mantendo-o em condições de segurança.

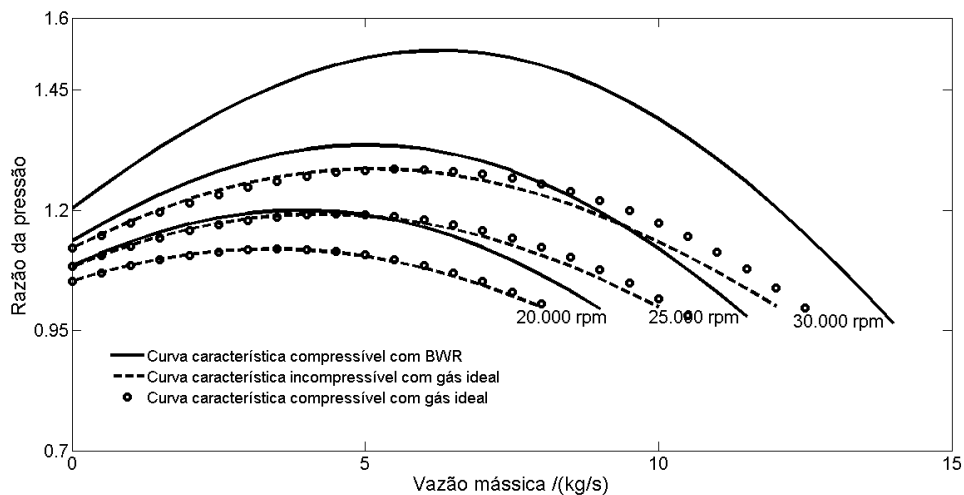
4.4.3 Estudo de Caso 2 : Gás natural

O estudo de caso para o gás natural foi realizado, motivado pelo fato de que os compressores centrífugos são muito utilizados para o transporte em gasodutos. Desta forma utilizou-se a base de dados do relatório técnico da empresa Weir Engineering Services Ltd. (2002), que cita a condições de pressão de sucção do compressor de 4600 kPa e a temperatura de sucção de 316 K para o transporte de gás natural.

Como a pressão de sucção é muito alta foram consideradas, para evitar a região de formação de líquido, apenas as baixas rotações 20 000 rpm, 25 000 rpm e 30 000 rpm. A equação de estado utilizada foi a equação BWR. Neste caso não foi estudada a curva de *stonewall*, pois para as dimensões do compressor em estudo e as rotações consideradas, a curva de *stonewall* se encontra na região de eficiência negativa.

A Figura 4.22 apresenta três casos: ● escoamento compressível gás real; ● escoamento compressível gás ideal; e ● escoamento incompressível e gás ideal. É mostrado que curva simulada com escoamento compressível e a equação de estado BWR diferem bastante dos demais casos. As curvas sugerem que a razão de compressão do gás natural com equação de estado de gás real é maior do que para gás ideal, diferente do observado para a compressão de ar. Esta diferença pode ocorrer pelo fato de que as condições de sucção do compressor estão mais próximas dos pontos críticos de cada gás. Isto reforça a importância da equação de estado no modelo do compressor, diferente do que fora aplicado em trabalhos na área (GRAVDAHL et al., 2000; CHU et al., 2012), nos quais houve o emprego da equação de estado do gás ideal.

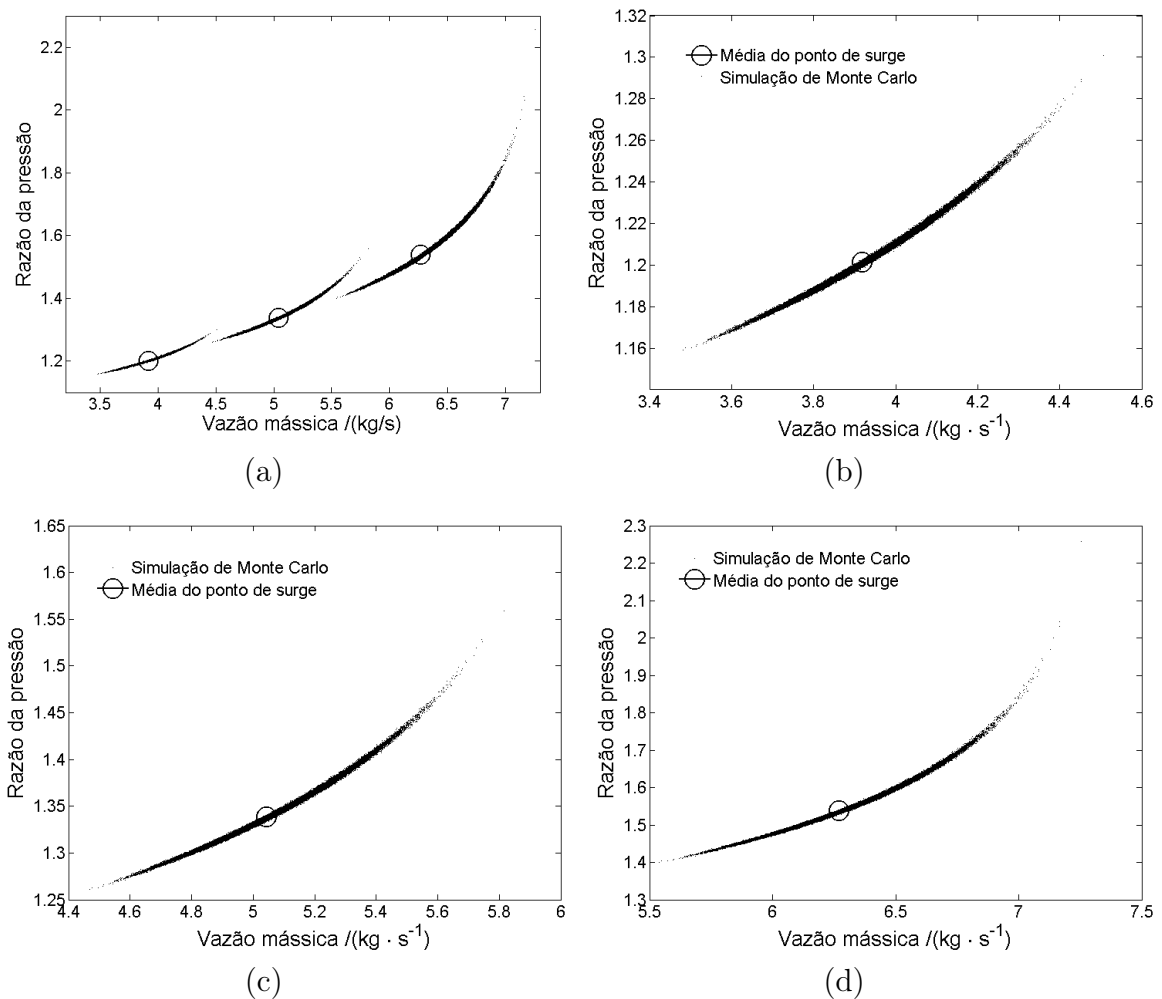
Figura 4.22: Curvas características do compressor de gás natural.



Também para este estudo de caso foi realizada a avaliação da incerteza da curva de *surge*, e assim determinar a curva de operação de *surge*. A incerteza da rotação foi considerada apenas a contribuição do Tipo B, com base numa curva de calibração de um fabricante disposta no Anexo F, já para a pressão e temperatura de sucção foi considerada uma *PDF* normal com uma incerteza padrão de 0,2 % e 2 % respec-

tivamente com base na variabilidade permitida em compressores (BRUN; NORED, 2008). Inicialmente a simulação de Monte Carlo foi realizada com 10 mil pontos como aplicado no estudo de caso do ar, no entanto devido ao formato da região não convencional de abrangência dos pontos de surge, realizou-se mais 90 mil pontos da simulação para obter *PDF* mais representativas.

Figura 4.23: Avaliação da incerteza através da simulação de Monte Carlo, da curva de compressão do gás natural.



O gráfico (a) são as simulações para as três rotações, e os gráficos (b), (c) e (d) são para as rotações de 20 000 rpm, 25 000 rpm e 30 000 rpm, respectivamente.

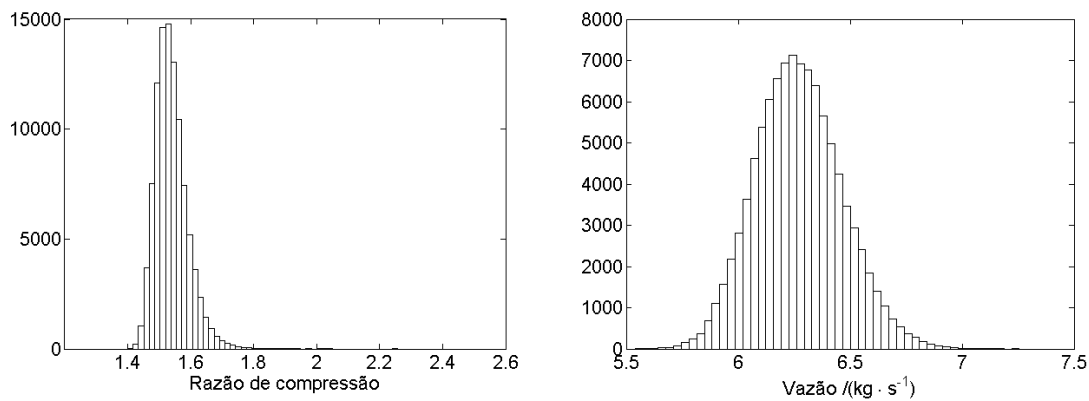
A Figura 4.23 apresenta a simulação de Monte Carlo. Nota-se que para este caso o ponto de surge expresso pela razão de compressão e a vazão no *surge* possuem uma correlação não-linear, visto que o formato das regiões não se assemelham a uma elipse mesmo que os dados de entrada tenham sido descritas por distribuições de probabilidade normais. Isso reforça o que foi discutido no Capítulo 3 da influência do

modelo na *PDF* das variáveis de saída (razão de compressão e vazão) na propagação de *PDF*.

A Figura 4.24 apresenta o histograma dos pontos da curva de *surge* para a rotação de 30 000 rpm, a qual possui maior incerteza e possui maior distorção da normalidade. Percebe-se que enquanto a vazão de surge ainda segue uma distribuição semelhante a uma normal, já a razão de compressão mais se assemelha a uma log-normal, este resultado reforça o que foi discutido no Capítulo 3, que mesmo que as variáveis tenham *PDF*'s semelhantes às conhecidas a *PDF* conjunta do sistema MIMO pode ser distorcida pela não-linearidade.

Também foi realizada a simulação da incerteza das curvas características para o gás natural, e pode-se ser apreciada no Apêndice E.

Figura 4.24: Histograma do ponto de *surge* para a rotação de 30 000 rpm na compressão do gás natural.



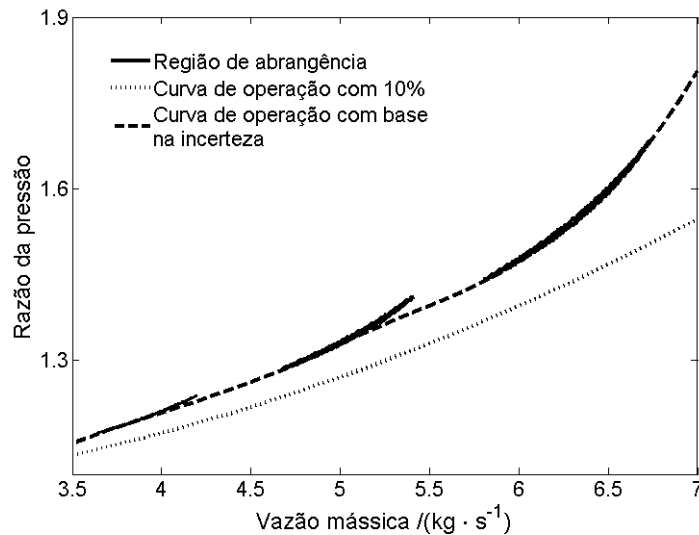
A curva de operação de *surge* proposta para o compressor de gás natural pode ser apreciada na Figura 4.25. Neste caso não foi realizada o teste de normalidade visto que a *PDF* conjunta da vazão mássica e razão de compressão dos pontos de surge não podem ser representadas por elipses. A região de abrangência foi construída considerando uma probabilidade de 99 %. Pode-se perceber também que a curva de operação proposta é bastante distante da curva de operação proposta pela literatura de 10 % da vazão de surge, diferente do observado para a compressão de ar. A Tabela 4.4 apresenta os valores da média e do desvio-padrão da simulação, calculadas pelas Eq. 3.3 e Eq. 3.4. Mesmo com uma probabilidade de abrangência alta, a curva de operação de surge com base na incerteza está muito próxima da curva nominal de *surge*. Isto porque as regiões de abrangência ocupam uma área muito fina e as curvas tentam aumentar o máximo a eficiência a tangenciando as regiões de abrangência

Tabela 4.4: Tabela com os dados estatísticos da simulação de Monte Carlo

Razão de compressão			
Rotação	Média	Desvio Padrão	Desvi relativo /%
20 000	1,202	0,014	1,1
25 000	1,339	0,027	2,0
30 000	1,540	0,051	3,3
Vazão mássica			
Rotação	Média $/(kg \cdot s^{-1})$	Desvio Padrão $(kg \cdot s^{-1})$	Desvi relativo /%
20 000	3,91	0,12	3,0
25 000	5,04	0,15	3,0
30 000	6,27	0,19	3,1

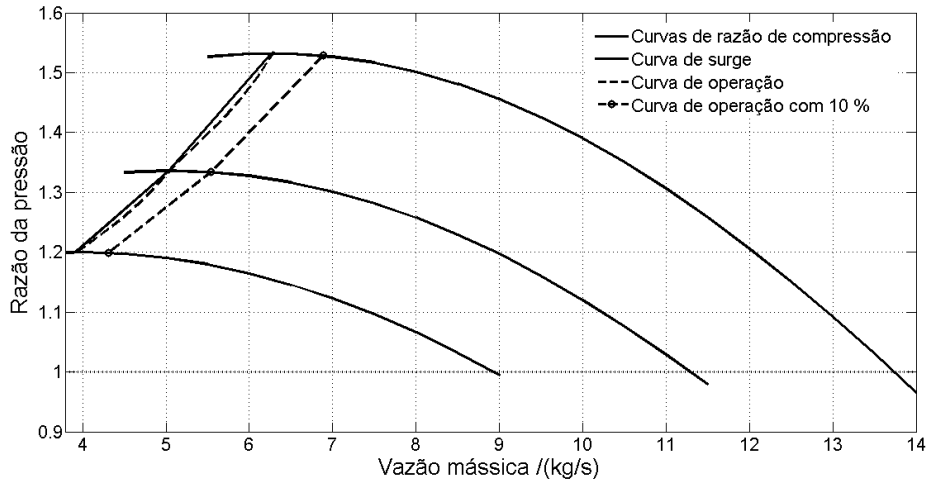
dos pontos.

Figura 4.25: Curva de operação de *surge* na compressão do gás natural considerando uma probabilidade de abrangência de 99 %.



A Figura 4.26 apresenta a região de operação do compressor além da curva de surge nominal e do limite de operação proposto pela literatura. Como a curva de operação proposta está muito próxima da curva de surge, o que leva a necessidade de uma boa estratégia de controle e bons sistemas metrológico para manter a operação em segurança.

Figura 4.26: Curvas da região de operação do compressor de gás natural.



4.4.4 Estudo de Caso 3: Gás de síntese

Como um último estudo de caso foi aplicada a metodologia apresentada neste trabalho para o gás de síntese. Este gás serve como matéria prima na indústria petroquímica para a fabricação de formol e outros subprodutos. A motivação para este estudo de caso é o acesso a dados indústrias da sucção de um compressor centrífugo. A Tabela 4.5 apresenta os dados das medições na sucção do compressor. As rotações do compressor são de 30 000 rpm a 70 000 rpm espaçadas entre 10 000 rpm.

Tabela 4.5: Tabela das medições das condições de sucção da planta industrial

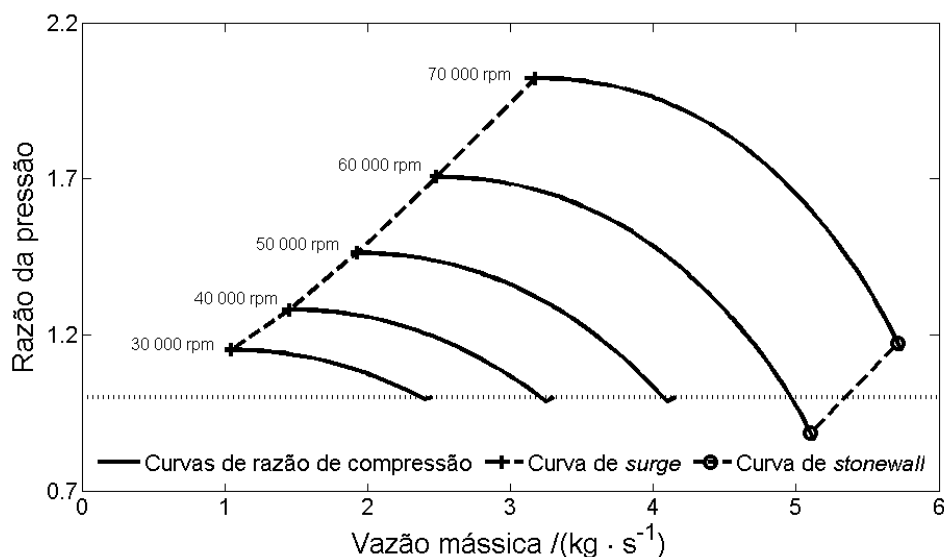
Variável	Unidade	Média \bar{x}	Desvio padrão da média $S_{\bar{x}}$
Pressão	kPa	1627	$4,2 \times 10^{-1}$
Temperatura	°C	41,3	$8,6 \times 10^{-2}$

Fonte: Dados industriais.

A Figura 4.27 apresenta as curvas características do compressor estudado quando operado com gás de síntese. Nota-se que assim como no estudo de caso com ar, para baixas rotações a curva de *stonewall* não tem importância no âmbito operacional. É importante também ressaltar o quanto as condições operacionais, bem como as propriedades dos gases influenciam nas curvas para um mesmo compressor. Ou seja, as suas propriedades estão intrinsecamente relacionadas às curvas do compressor. Todas estas observações e avaliações podem contribuir para o projeto de compressores centrífugos em trabalhos posteriores.

Assim como nos outros casos também foi realizada o cálculo da incerteza das curvas do compressor com base dos dados medidos em planta por cinco dias. Os

Figura 4.27: Curvas características do compressor para gás de síntese.



medidores da planta possuem uma resolução de 0.01 K para a medição de temperatura e 0.01 kgf/cm² para a medição de pressão. Para o método de Monte Carlo a *PDF* da resolução foi considerada uniforme. Como não houve acesso aos relatórios de calibração destes medidores, para a correção sistemática foi considerada uma *PDF* normal com média zero e incerteza de 0,001 % da medição (média), pois a variação do processo é baixa, então se espera que o instrumento seja muito bem calibrado. Para a incerteza do Tipo A foi considerada uma *PDF t-student* com base nos dados da Tabela 4.5 para um grau de liberdade de 64 (65 medições), assim os pontos de temperatura e pressão foram calculados com base na soma das *PDF*'s dos componentes da medição instrumental, correção e resolução conforme a Eq. 3.7. A incerteza da rotação foi considerada, assim como no caso para gás natural, de acordo com um certificado de calibração no Anexo F.

Os resultados da simulação de Monte Carlo estão dispostos na Figura 4.28 e a Figura 4.29 apresenta para um dos pontos de surge. Comparada aos outros casos a incerteza dos pontos de *surge* e *stonewall* possuem regiões muito pequenas, dado que o processo possui incertezas pequenas e é muito bem controlado. Assim como no estudo de caso de compressão de ar também foi realizado teste de normalidade de Kolmogorov-Smirnov como apresentado na Tabela 4.6. Fica claro que todos os pontos tanto de *surge* e *stonewall* passam do teste de hipótese, conforme descrito no

estudo de caso de compressão de ar, KS valor $>$ C.V. e o p-valor $>$ 0,05. Os gráficos das *CDF*'s, histogramas destes pontos podem ser contemplados no Apêndice E.

As incertezas da região de abrangência das curvas características do gás de síntese também foram estimadas e se encontram na Figura 4.30. Como também um comportamento semelhante ao estudo de caso de compressão de ar, onde a incerteza aumenta quanto maior a rotação e a vazão mássica. Neste caso, as regiões de abrangência das curvas são pequenas, visto que a variabilidade do processo é baixa.

Figura 4.28: Pontos de Monte Carlo para as curvas de *surge* e *stonewall* do gás de síntese

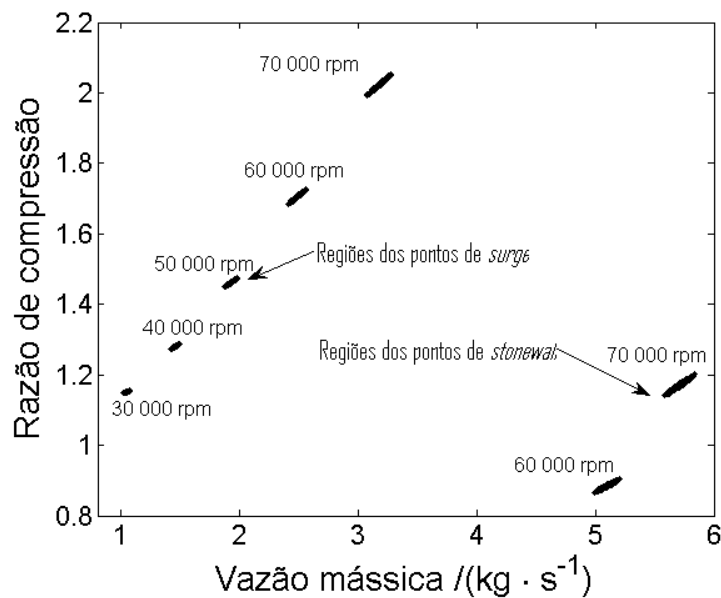


Figura 4.29: Região de abrangência com a probabilidade de 99 % do ponto de surge para 70 000 rpm

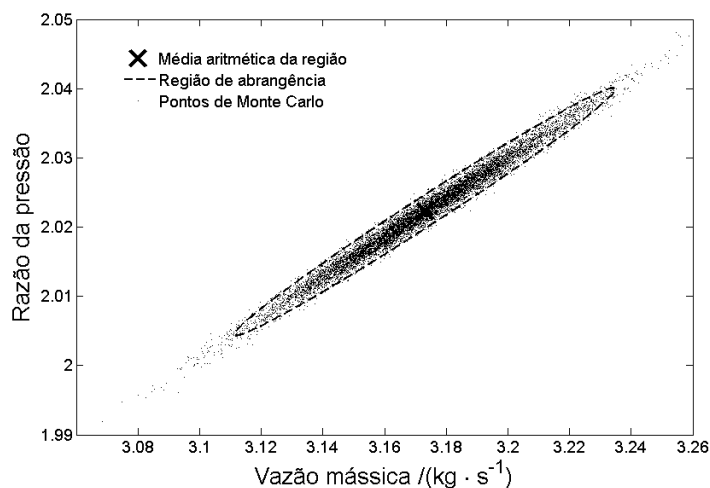


Figura 4.30: Região de abrangência das curvas características para compressão do gás de síntese

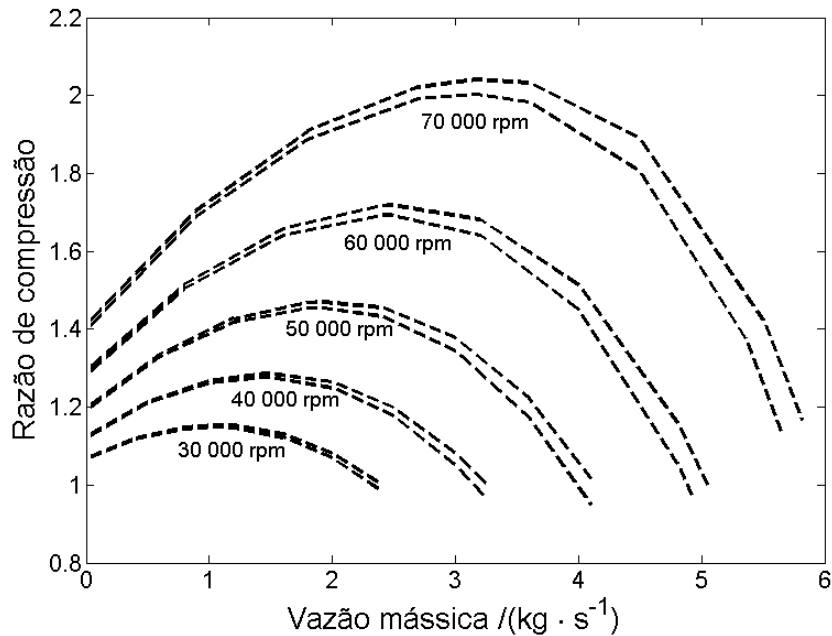


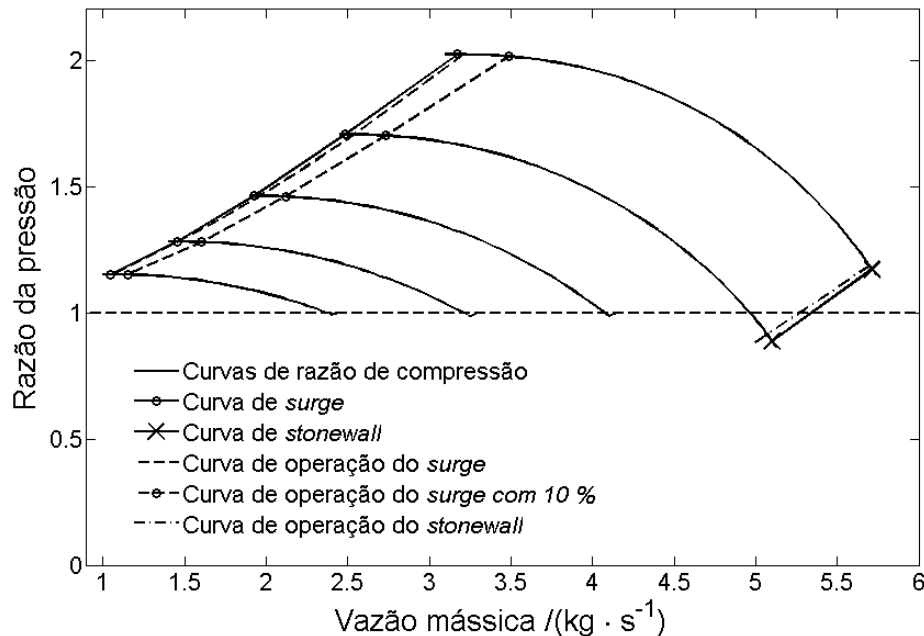
Tabela 4.6: Tabela do teste de normalidade dos pontos de *surge* e *stonewall*

Pontos de <i>surge</i>						
Rotação /(rpm)	KS valor	C.V.	p – valor	KS valor	C.V.	p – valor
30 000	0,0103	0,0107	0,2396	0,0084	0,0107	0,4850
40 000	0,0087	0,0107	0,4340	0,0091	0,0107	0,3740
50 000	0,0097	0,0107	0,2987	0,0084	0,0107	0,4839
60 000	0,0086	0,0107	0,4511	0,0090	0,0107	0,3939
70 000	0,0107	0,0107	0,2042	0,0087	0,0107	0,4395
Pontos de <i>stonewall</i>						
60 000	0,0088	0,0107	0,4117	0,0086	0,0107	0,4410
70 000	0,0102	0,0107	0,2454	0,0088	0,0107	0,4122

Conclui-se que as interpretações são similares aos encontrados no Caso 1, desta forma pode-se descrever a Região de Abrangência dos pontos das curvas de *surge* e *stonewall* por uma elipse, para uma probabilidade de abrangência de 99 %. Aplicado um procedimento semelhante podem-se chegar às curvas de operação do compressor como apresentado na Figura 4.31. Devido às pequenas incertezas dos pontos das curvas de *surge* e *stonewall*, as curvas de operação estão muito próximas das curvas nominais. Dessa forma, assim como no estudo de caso para gás natural, simulações com uma maior Probabilidade de Abrangência deveria ser adotada com base na incerteza, visto que estes limites além da eficiência também determinam a segurança operacional. No entanto, isto mostrou que um fator de 10 % é muito grande nestas

condições. Um maior detalhamento das regiões de abrangência dos pontos de *surge* e *stonewall* podem ser observados no Apêndice E.

Figura 4.31: Curvas de operação do compressor com base em suas incertezas para uma probabilidade de abrangência de 99 %.



4.4.5 Propriedades do sistema de compressão do gás de síntese

Como foi mostrado no Estudo de Caso 1, o modelo proposto de escoamento compressível com densidade variável na perda de carga, proporciona a obtenção de curvas do compressor mais fidedignas. Um diferencial é a capacidade de melhor estimar as propriedades do gás, como pressão e temperatura ao longo das partes do compressor. Este acompanhamento, por exemplo, pode ser obtido através do monitoramento da temperatura no difusor e no impelidor, como apresentado na Figura 4.32, que pode auxiliar no projeto de compressores ou na determinação do material dos componentes do compressor. Esta análise não poderia ser realizada caso fosse considerado o escoamento incompressível, pois esta hipótese também considera a temperatura do gás invariante. É importante ressaltar que as temperaturas nas duas partes do equipamento se diferenciam à medida que a vazão do compressor aumenta, em consequência de uma maior perda de carga, como apresentado na Figura 4.33.

A Figura 4.34 também apresenta a perda de carga para o caso incompressível e gás ideal. Comparando a Figura 4.34 com a Figura 4.33 também se pode mostrar a influência da compressibilidade é significativa ao variar com a rotação, visto que para o caso incompressível o formato das curvas quase não se modificou, apenas modificando a escala.

Figura 4.32: Perfil de temperatura do difusor e do impelidor na compressão do gás de síntese.

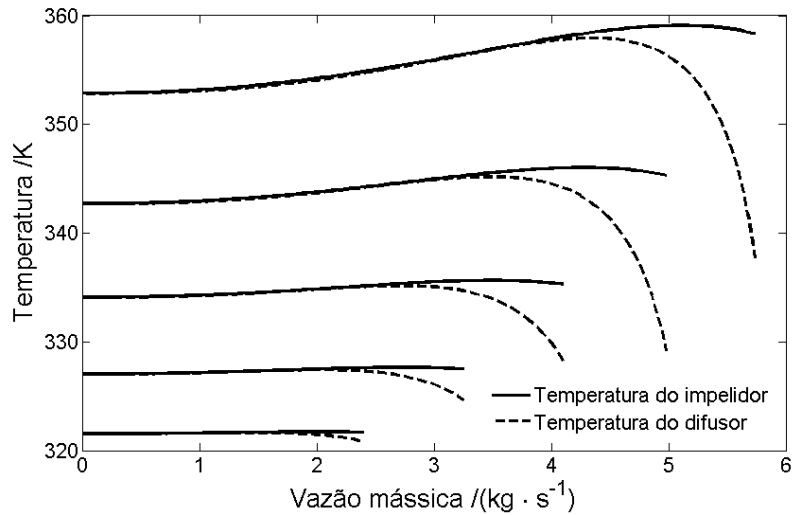


Figura 4.33: Perda de carga no compressor de gás de síntese considerando escoamento incompressível e gás ideal, a direita para uma rotação de 30 000 rpm e a outra de 70 000 rpm.

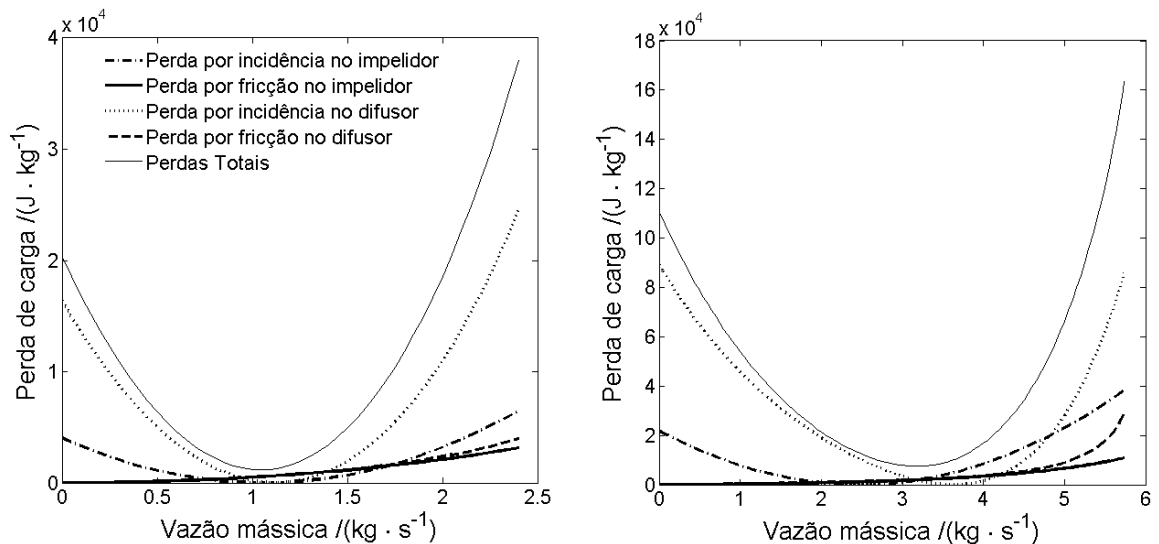
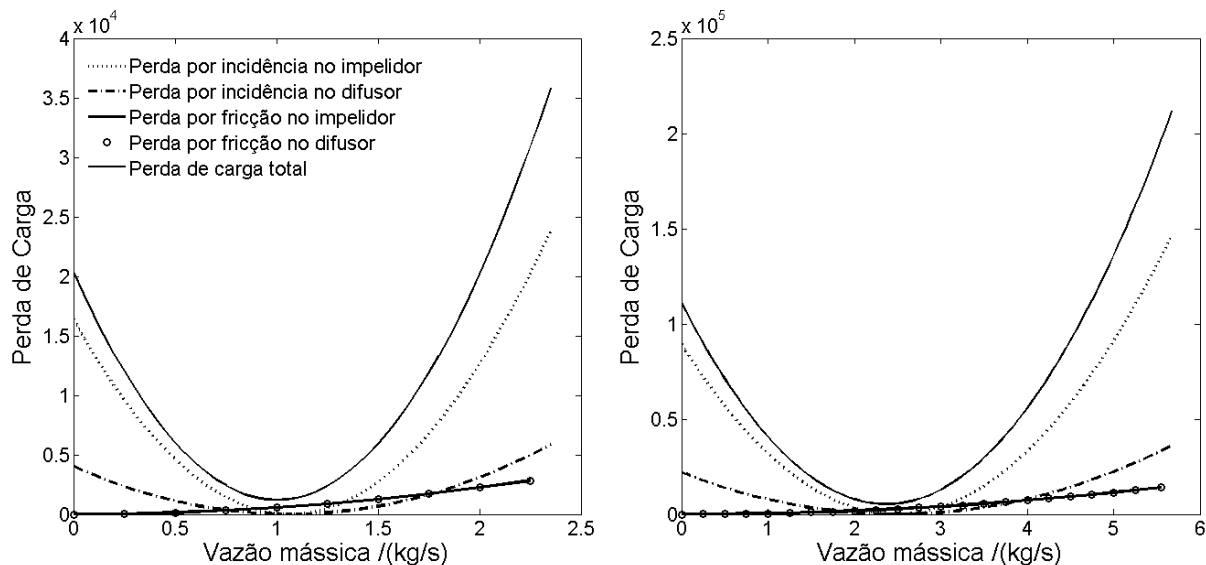


Figura 4.34: Perda de carga no compressor de gás de síntese, a direita para uma rotação de 30 000 rpm e a outra de 70 000 rpm.

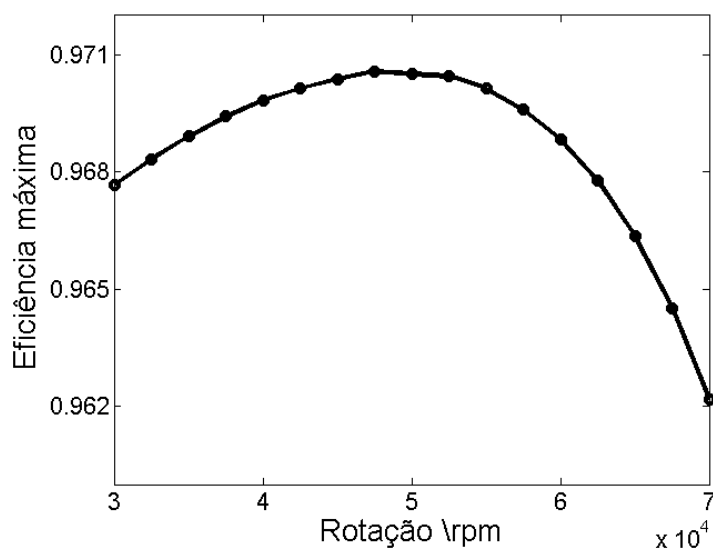


A Figura 4.33 mostra que a perda de carga por incidência é a que mais impacta nas curvas do compressor, principalmente a do impelidor. Isto pode ser útil para tentar melhorar a eficiência do compressor durante sua concepção. Outra importante curva para os compressores centrífugos são as da eficiência do compressor. A Figura 4.35 apresenta a eficiência máxima para as rotações do compressor de gás de síntese. É possível perceber que, mesmo que os valores de eficiência sejam semelhantes, há um região, em torno da rotação de 50 000 rpm, onde a eficiência é a máxima possível do compressor. Esta análise permite assim definir o melhor ponto de operação do compressor e buscar regiões mais eficientes.

4.5 Conclusões parciais

Neste capítulo foi apresentado a implementação de escoamento compressível nos modelos de perda de carga no interior do compressor descrito por Gravdahl et al. (2000). As curvas foram implementadas para diferentes gases para um mesmo compressor, avaliando assim como cada um se comporta em um processo de compressão. Foi mostrada a importância de se considerar a variação da densidade nestes modelos através das curvas do compressor, exibidas para três gases diferentes nas Seções 4.4.1, 4.4.3 e 4.4.4. Também foi estudada a importância da equação de estado nas curvas do compressor, apresentando casos nos quais o gás ideal não consegue descre-

Figura 4.35: Eficiência máxima do compressor de gás de síntese em função da rotação.



ver bem as curvas do compressor, como observado no estudo de caso de gás natural, Seção 4.4.3.

O modelo de escoamento compressível também se mostrou versátil para analisar as propriedades do fluido no interior do compressor, como densidade e temperatura, na Seção 4.4.5. Além disto, foram calculadas as regiões de eficiência máxima do compressor durante sua concepção, com base em estudos da perda de carga, Subseção 4.4.5. Vale ressaltar que no equacionamento apresentado não houve aproximações nas integrais no balanço da energia mecânica, prática comum na literatura como apresentado por (MCCOY; RUBIN, 2008).

Uma fator importante discutido neste trabalho foi a avaliação da incerteza através do método de Monte Carlo das curvas do compressor – Seções 4.4.2, 4.4.3 e 4.4.5. Foi proposto assim curvas limitantes de operação do compressor com base na região de abrangência dos pontos de surge e stonewall, as quais são mais eficientes do que utilizar um fator de erro de 10 % - Seção 4.4.2. Além disso, a avaliação da incerteza pode favorecer o aumento do rendimento do sistema de compressão, como foi observado em todos os estudos de caso – Seções 4.4.2, 4.4.3 e 4.4.5. Para alguns a curva de operação de surge sugeria a possibilidade de operar em regiões muito próximas da curva nominal de surge. Nestes casos recomendou-se utilizá-las como base para construir curvas que tenham além de eficiência um fator de segurança, por exemplo ao considerar uma maior Probabilidade de Abrangência. Estas curvas podem ser

utilizadas posteriormente como limites operacionais ou restrições em controladores.

O método de Monte Carlo também se mostrou adequado para a análise das curvas do compressor, como pôde ser observado no estudo de caso de gás natural, Caso 2 – Seção 4.4.3, onde a influência do modelo atuou no formato da região de abrangência, o que não seria observado caso fosse realizado o método de propagação da incerteza do GUM ou método de Kragten.

Capítulo 5

Simulação de linhas de CO₂

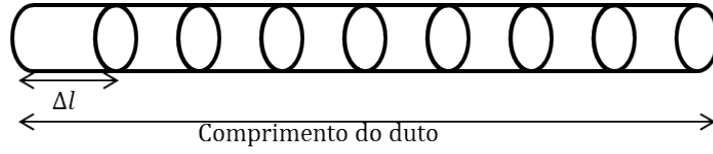
Neste capítulo é aplicado o escoamento de fluidos compressíveis, descrito no Capítulo 2, para o transporte de CO₂ em tubulações de longas distâncias, tanto no estado líquido quanto no estado gasoso. Todavia, diferente do Capítulo 4, cujo foco era a simulação e caracterização dos compressores centrífugos, neste capítulo será tratado do dimensionamento da tubulação. Além disto, na etapa de dimensionamento, o modelo proposto por este trabalho é comparado com o modelo simplificado que assume um fator de compressibilidade constante, de modo a avaliar a influência desta simplificação. Por fim, o método de Monte Carlo, descrito no Capítulo 3 foi utilizado para avaliar a região de abrangência do perfil de temperatura e pressão do fluido na ao longo da tubulação.

5.1 Aplicação do escoamento compressível

No Capítulo 4 foi mostrado como adequar o escoamento compressível em compressores centrífugos. O resultado foram as expressões na forma de sistema de equações algébricas não-lineares. Neste capítulo os balanços de energia mecânica e térmica serão apresentados na forma de um sistema de equações diferenciais, para o escoamento em tubulações retilíneas.

A simulação do escoamento compressível através de equações algébricas requer um pequeno passo de integração, e a delimitação de vários volumes de controle (SANTANA; COSTA, 1992), como apresentado na Figura 5.1. Isto demanda um grande custo computacional. Já na abordagem em equações diferenciais o custo computacional é muito menor para um mesmo grau de rigor.

Figura 5.1: Divisão do duto em vários volumes de controle



A partir das equações Eq. 2.11 e Eq. 2.15, as seguintes simplificações considerações podem ser feitas:

- Não há trabalho sendo exercido sobre o fluido, exceto o de escoamento.
- Há transferência de calor ao longo da linha.
- Ocorre somente a perda de carga por fricção.
- O gás escoa em uma tubulação de área circular de diâmetro constante.

Tendo em vista estas simplificações pode-se chegar às expressões mostradas na Eq. 5.1 e na Eq. 5.2.

$$dh + u \cdot du = dq \quad (5.1)$$

$$\frac{m^2}{A^2} V \cdot dV + kf \frac{m^2 V^2}{2D_{eq} A^2} dL + V dP = 0 \quad (5.2)$$

A diferenciação total da entalpia e da pressão são expressas pelas equações Eq. 5.3 e Eq. 5.4 para uma equação de estado explícita na pressão.

$$dh = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_V dT + \left(\frac{\partial h}{\partial V} \right)_T dV \quad (5.3)$$

$$dP = \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V dT + \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T dV \quad (5.4)$$

Sendo a tubulação enterrada, como representado na Figura 5.2, há troca de calor entre o solo e fluido escoando na tubulação. Desprezando a condutividade através da parede do tubo, a quantidade de calor por unidade de massa é expressa pela Eq. 5.5.

$$q = \frac{UA(T_{inf} - T)}{m} \quad (5.5)$$

Figura 5.2: Diagrama de um duto enterrado, cuja sua distância à superfície vale Z_A



onde o coeficiente global de troca térmica para uma tubulação enterrada UA é calculado pela Eq. 5.6 (Incropera, F.P.; De Witt, 2003).

$$UA = \frac{\pi \Delta L}{\frac{1}{h_{cov} \cdot D_{in}} + \frac{\text{acosh}(2Z_S/D_{ex})}{2\kappa_s}} \quad (5.6)$$

onde Z_S é a distância da tubulação ao solo, D_{in} e D_{ex} são o diâmetro interno e externo, respectivamente. h_{cov} é o coeficiente de convecção térmica do fluido em escoamento, κ_s é o coeficiente de condutividade térmica no solo e ΔL é o comprimento percorrido, para o caso da resolução desse sistema é também o passo de integração.

Considerando que a derivada do coeficiente global de troca térmica em relação à temperatura e ao volume é desprezível, a diferencial total do calor é dada por Eq. 5.7.

$$dq = \frac{d(UA)}{dL} \frac{(T_{inf} - T)}{m} - \frac{UA}{m} = \frac{UA}{\Delta L} \frac{(T_{inf} - T)}{m} - \frac{UA}{m} \quad (5.7)$$

A etapa seguinte consiste na substituição das expressões Eq. 5.3, Eq. 5.4, Eq. 5.7 nas equações Eq. 5.1 e Eq. 5.2. Diferenciando estas equações com relação ao comprimento, têm-se as equações diferenciais que descrevem os perfis de temperatura, pressão e volume ao longo do trecho de escoamento, apresentados pelas Eq. 5.8, Eq. 5.9 e Eq. 5.10, para um problema de valor inicial, uma vez que se especifica o valor da pressão no início da tubulação. Também, pode-se considerar um problema de condição de contorno pois é especificada a pressão ao término da tubulação. Ou seja, conhecemos a pressão necessária a ser utilizada, por exemplo, na injeção de CO_2 necessária ao deslocamento de óleo no seu reservatório.

$$\left[\frac{m^2}{A^2} V + \left(\frac{\partial h}{\partial V} \right)_T \right] \frac{dV}{dL} + \left[\left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_V + \frac{UA}{m} \right] \frac{dT}{dL} = \frac{UA}{\Delta L} \frac{(T_{inf} - T)}{m} \quad (5.8)$$

$$\left[\frac{m^2}{A^2V} + \frac{1}{V} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \right] \frac{dV}{dL} + \frac{1}{V} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \frac{dT}{dL} = -\frac{\kappa f m^2}{2DA^2} \quad (5.9)$$

$$\frac{dP}{dL} = \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \frac{dT}{dL} + \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \frac{dV}{dL} \quad (5.10)$$

É possível também rearrumar estas equações diferenciais para tornar a resolução mais simples, como descrito na Eq. 5.11 e na Eq. 5.12.

$$\frac{dV}{dL} = \left(\frac{D}{E} - \frac{A}{B} \right)^{-1} \left(\frac{F}{E} - \frac{C}{B} \right) \quad (5.11)$$

$$\frac{dT}{dL} = \frac{1}{B} \left(C - A \frac{dV}{dL} \right) \quad (5.12)$$

onde A , B , C , D , E e F são funções da temperatura e do volume expressos por:

$$A = \left[\frac{m^2}{A^2} V + \left(\frac{\partial h}{\partial V} \right)_T \right], B = \left[\left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_V + \frac{UA}{m} \right], C = \frac{UA(T_{inf} - T)}{\Delta L m} \quad (5.13)$$

$$D = \left[\frac{m^2}{A^2V} + \frac{1}{V} \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \right], E = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V, F = -\frac{\kappa f m^2}{2DA^2} \quad (5.14)$$

Estas equações podem ser utilizadas tanto para o escoamento de líquidos compressíveis ou para gases, alterando apenas o cálculo das derivadas da entalpia. Os cálculos destas derivadas estão detalhados no Anexo D.

O fator de fricção utilizado foi o fator explícito de Funning descrito por Zigrang e Sylvester (1982), apresentado na Eq. 5.15 comumente aplicado em transporte de fluidos (MCCOY; RUBIN, 2008).

$$\frac{1}{2\sqrt{f}} = -2 \log \left(\frac{\epsilon}{3,7D_{in}} - \frac{5,02}{Re} \log \left(\frac{\epsilon}{3,7D_{in}} - \frac{5,02}{Re} \log \left(\frac{\epsilon}{3,7D_{in}} + \frac{13}{Re} \right) \right) \right) \quad (5.15)$$

onde, Re é o número de Reynolds mostrado na Eq. 5.16 e ϵ é a rugosidade do duto,

$$Re = \frac{u\rho D_{in}}{\mu} = \frac{mD_{in}}{A\mu} \quad (5.16)$$

onde μ é a viscosidade do fluido e seu cálculo detalhado se encontra no Anexo D.

O coeficiente convectivo h_{cov} necessário na Eq. 5.6, foi calculado conforme apresentado na Eq. 5.17 citado por Incropera, F.P.; De Witt (2003).

$$h_{cov} = \frac{\kappa Nu}{D_{in}} = \frac{\kappa}{D_{in}} \cdot \frac{(f_t/8)(Re - 1000)Pr}{1,07 + 12,7(f_t/8)^{0,5}(Pr^{2/3} - 1)} \quad (5.17)$$

onde f_t é fornecido pela Eq. 5.18 e o número de Prandtl é dado pela Eq. 5.19. κ é o coeficiente de condutividade térmica, calculado conforme o Anexo D.

$$f_t = (1,82 \log(Re) - 1,64)^{-2} \quad (5.18)$$

$$Pr = \frac{C_P \mu}{\kappa} \quad (5.19)$$

onde C_P é calculado de acordo com Eq. 5.20 para um gás e para líquidos pela relação apresentada por (GREEN; PERRY, 2007) detalhado na Eq. 5.21

$$C_P^{gas} = C_V - T \left[\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \right]^2 \left[\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \right]^{-1} \quad (5.20)$$

$$C_P^{liq} = -8304.3 + 104.37T - 0.43333T^2 + 6,0052 \times 10^{-4} \cdot T^3 \quad (5.21)$$

onde C_P está em kJ/(kmol· K) e T está em K.

5.2 Especificações da linha de CO2

McCoy e Rubin (2008) propõe um modelo de cálculo no diâmetro de uma linha com base nas seguintes premissas:

- A vazão mássica, m , é fixa;
- O comprimento da tubulação, ΔL_{total} , é estipulado;
- A perda de carga total, ΔP , é fixa.

O diâmetro interno pode ser calculado com base nestas especificações, através da Eq. 5.22.

$$D_{in}^5 = \frac{-32kfm^2 Z_A T_A M R \Delta L_{total}}{\pi^2 (P_f^2 - P_0^2)} \quad (5.22)$$

onde P_f é a pressão ao final do duto e P_0 é a pressão no início do duto, T_A é a temperatura média do duto, Z_A é o fator de compressibilidade médio, M é a massa

molecular, f é o fator de atrito. Este modelo ainda considera algumas simplificações como:

- Desprezo da variação da energia cinética;
- Desprezo da energia potencial gravitacional;
- O tubo permanece enterrado e a temperatura do solo é constante;
- A temperatura média do fluido, T_A , ao longo da linha é igual à temperatura do solo;
- Fator de compressibilidade constante dado pela Eq. 5.23;

$$Z_A = \frac{P_A V_A}{RT_A} \quad (5.23)$$

onde P_A é dado calculado Eq. 5.24 sendo V_A obtido por uma equação de estado.

$$P_A = \frac{2}{3} \left(P_f + P_0 - \frac{P_f P_0}{P_f + P_0} \right) \quad (5.24)$$

Esta equação parece ter uma relação entre a média aritmética e a média geométrica entre a pressão inicial e final.

Assim, para calcular o diâmetro é necessário resolver uma equação algébrica não-linear, pois o fator de fricção f é dependente do diâmetro através da Eq. 5.15.

Neste trabalho é proposto o cálculo do diâmetro considerando modelos de fluidos compressíveis expressos pelas Eq. 5.8, Eq. 5.9 e Eq. 5.10, pois estas equações são capazes de retornar não só a pressão ao final do duto como também todo o perfil de temperatura e pressão do fluido ao longo do duto. Como neste caso não é possível chegar a uma equação algébrica, o cálculo do diâmetro foi realizado através de uma otimização, conforme a Eq. 5.25, onde a pressão no final do duto P_f é igual a uma pressão de projeto especificada, uma das premissas de McCoy e Rubin (2008). Como a Eq. 5.25 é uma função quadrática cujo o mínimo é zero, o problema pode ser facilmente resolvido. Esta é uma nova abordagem para o cálculo do diâmetro que permite fácil convergência e rigor nas propriedades do fluido. Observa-se que

este é um problema de importância prática pois o que se deseja é que ao final da tubulação o fluido esteja a uma pressão especificada.

$$FO = \min_D (P_f - P_{ref})^2 \quad (5.25)$$

Sujeito à:

$$P_f = P_0 + \int_{L_0}^L \left[\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \frac{dT}{dL} + \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \frac{dV}{dL} \right] dL$$

$$P_f = P_{ref} \quad (5.26)$$

onde a integral é calculada resolvendo o sistema de equações diferenciais fornecidas pelas Eq. 5.8, Eq. 5.9 e Eq. 5.10.

Outro parâmetro importante é a espessura da tubulação. A espessura da tubulação foi calculada com base no item 304.1.2 do código ASME B31.3-2012 (ASME, 2011), como mostrado na pela Eq. 5.27

$$t_t = 1,143 \left[\frac{PD_{ex}}{2(S_hEW + PY)} + C \right] \quad (5.27)$$

onde P é a pressão máxima do duto, D_{ex} é o diâmetro externo, S_h é tensão admissível do material na temperatura de projeto, E é a eficiência de solda, W é o fator da resistência de solda, Y é o coeficiente de redução de acordo com o material e com a temperatura de projeto do tubo e C é a soma das margens de corrosão.

Após uma consultoria com engenheiros da área foi aconselhado o material de aço-carbono A 23 de acordo com a norma da ASTM, com as propriedades definidas de acordo com a Tabela 5.1

Tabela 5.1: Especificação do material das tubulações

Propriedade	Valor correspondente
S_h	1406,1 kgf/cm ²
E	0,85
W	1
Y	0,4
C	1,6 mm

Fonte: Norma ASTM.

5.3 Materiais e Métodos

Antes de realizar as simulações do cálculo do diâmetro adequado, primeiro deve ser definido o passo de integração, ΔL , e analisar qual valor resolve os sistemas diferenciais com uma boa precisão e baixo custo operacional. A seguir está detalhado o procedimento da análise proposta neste trabalho. Este método é aplicado em dois estudos de caso, um para o transporte de CO₂ líquido e outro para CO₂ gasoso.

1. Calcular o diâmetro da tubulação por dois métodos o sugerido por McCoy e Rubin (2008), Eq. 5.22 e o sugerido por este trabalho Eq. 5.25. O diâmetro calculado será o correspondente ao maior adequado para satisfazer a norma NPS de fabricação de diâmetros.
2. Realizar simulações do problema de valor inicial, com as equações diferenciais Eq. 5.8 à Eq. 5.10.
3. Avaliar a incerteza do perfil de temperatura e pressão ao longo da linha via simulação de Monte Carlo.

Será considera uma linha de 100 km de extensão, com uma vazão de 5 Mton/ano para o transporte de CO₂ na fase líquida (MCCOY; RUBIN, 2008) e será considerado uma linha de mesma distância e de vazão de 2,4 Mton/ano para o transporte de CO₂ na fase gasosa, na qual é uma vazão coerente para tornar o transporte viável. A vazão do transporte em fase gasosa geralmente é menor que na fase líquida pois, como gás as variações de densidade e pressão são mais significativas, assim necessitando de um diâmetro muito maior para transportar a mesma quantidade que em comparação com o estado líquido. A equação de estado utilizada foi a de Peng-Robinson, porque vem sendo utilizada em vários trabalhos sobre escoamento de CO₂ (ZHANG et al., 2006; MCCOY; RUBIN, 2008; JENSEN et al., 2013).

De maneira semelhante ao cálculos das curvas dos compressores, as simulações foram realizadas no *software* MATLAB®, pois suas funções de métodos numéricos já estão implementadas.

Como nos estudos de caso com compressores centrífugos o algoritmo de otimização utilizado foi conjuntos ativos (POWELL, 1978). Os parâmetros de parada do método foram definidos como sendo 10^{-8} para o erro do gradiente da função objetivo

e também para a variação das variáveis calculadas. As restrições utilizadas foram de mínimo e máximo para restringir a região de busca do sistema.

A resolução das equações diferenciais por problemas de valor iniciais foram calculadas pelos métodos de diferenças regressivas de Klopfenstein-Shampine (SHAMPINE; REICHELDT, 1997; SHAMPINE; REICHELDT; KIERZENKA, 1999), na qual combina a integração do sistema diferencial implícito com a resolução de equações algébricas. Os parâmetros de parada do método foram definidos como sendo 10^{-8} para o erro das funções algébricas e também para a variação das variáveis calculadas.

5.4 Resultados

Antes de realizar o estudo sobre o dimensionamento da linha de CO_2 , deve-se primeiro avaliar qual o passo de integração ΔL , que fornece um resultado satisfatório e ao mesmo tempo com rápida resolução. Para isto foi simulada um caso teste, com um diâmetro interno de 50 cm, para três passos diferentes: 10 m, 100 m e 1000 m. Este teste foi realizado tanto para o estado líquido quanto para o estado gasoso, cujas pressões de alimentação foram 13,8 MPa e 4,5 MPa respectivamente.

As Figuras 5.3 e 5.4 apresentam os perfis de pressão e temperatura para os dois estados do fluido. Nota-se que independente dos passos, os perfis de temperatura e pressão são bem próximos. O perfil para o passo de integração maior, de 1000 m, à distância ao de 10 m é relativamente maior do que a mesma análise para o passo de 100 m. Desta forma, escolheu-se trabalhar com o passo de integração de 100 m, pois neste passo o sistema é convergente para o mesmo ponto e desta maneira evita erros muito grandes ao trabalhar com um passo também grande.

Uma vez definido o passo de integração para a resolução do sistema de equações diferenciais que descrevem os perfis de pressão e temperatura da linha de gás, o próximo passo é o estudo do dimensionamento das linhas. Os resultados das simulações deste capítulo são divididos em duas subseções: o escoamento em estado líquido e o escoamento em estado gasoso.

Figura 5.3: Avaliação do passo de integração para o escoamento de CO₂ líquido.

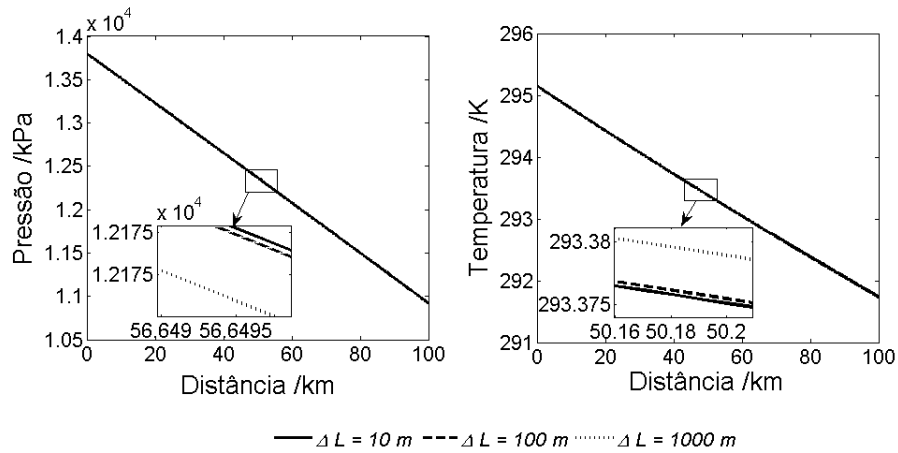
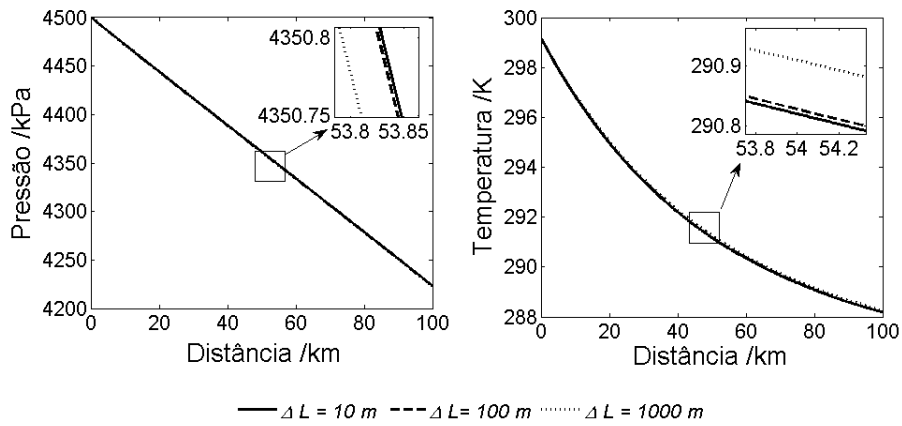


Figura 5.4: Avaliação do passo de integração para o escoamento de CO₂ gasoso.



5.4.1 Escoamento em estado líquido

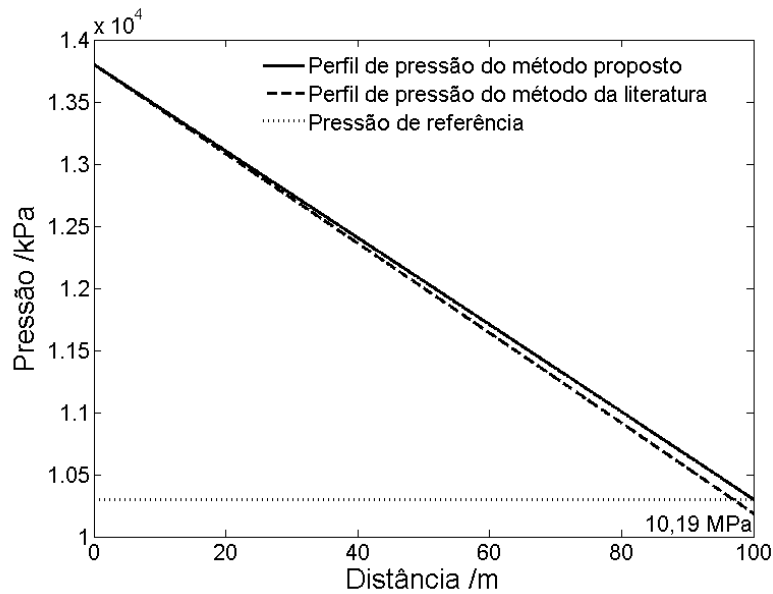
Para o dimensionamento da linha foram consideradas a pressão de entrada no duto e de descarga no duto como sendo as mesmas adotadas em McCoy e Rubin (2008). As demais considerações das condições do gás e do solo estão dispostas na Tabela 5.2.

Tabela 5.2: Dados para a simulação do duto de CO₂ líquido.

Variável	Unidade	Módulo
Pressão do fluido na entrada	MPa	13,8*
Pressão desejada na saída	MPa	10,3*
Temperatura do solo	°C	15*
Temperatura do fluido na entrada	°C	22**
Distância do duto à superfície do solo	m	2**

* Retiradas de McCoy e Rubin (2008), ** consideradas neste trabalho.

Figura 5.5: Perfil de pressão com base nos diâmetros calculados.

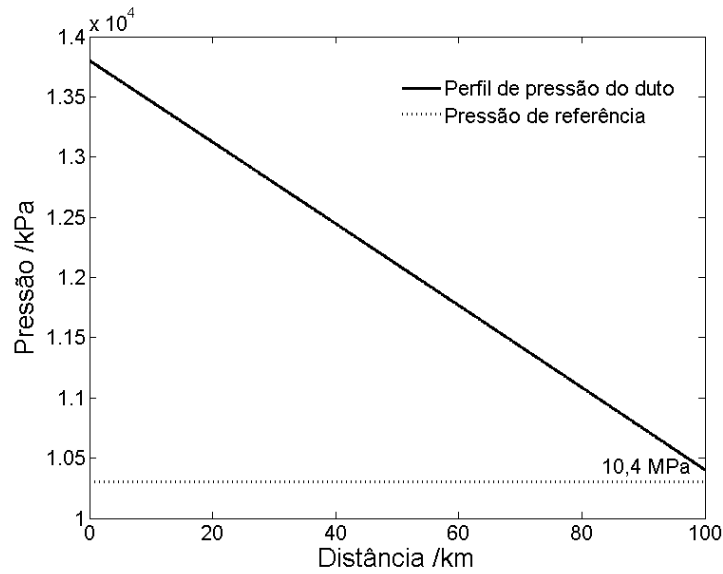


Através do cálculo do diâmetro usando as duas abordagens, pode ser verificado que ambas convergem para um resultado similar. Diâmetro de 38.3 cm através do método da literatura e 38.5 cm para o método proposto por este trabalho. A Figura 5.5 apresenta o perfil de pressão com base nos diâmetros calculados. Embora pequena, é possível perceber que há diferença entre os dois perfis. A pressão final para o diâmetro calculado pelo método da literatura desviou apenas 0,01 MPa do valor de referência. Dessa forma aponta-se que para o escoamento de líquidos compressíveis o método da literatura fornece uma boa estimativa do diâmetro.

Como o diâmetro calculado não está inserido na norma NPS dos fabricantes de dutos, deve-se adequá-lo para um diâmetro interno de 38,5 cm e uma espessura de 3,0 cm, calculada pela Eq. 5.27. A especificação mais próxima é o diâmetro NPS 18 e *schedule* 120. O *schedule* deve ser alto pois as pressões no escoamento também são altas. Esta especificação retorna um diâmetro interno de 38,7 cm e um diâmetro externo de 47,5 cm.

Uma vez especificadas as dimensões da tubulação, pode-se calcular os perfis de pressão e temperatura do fluido escoando, como estão apresentados nas Figuras 5.6 e 5.7. Como o diâmetro especificado é maior do que o necessário, a pressão ao final da linha é maior do que a determinada no dimensionamento que é 10,3 MPa. Outro detalhe relevante: mesmo para um distância de 100 km a temperatura não atinge a temperatura do solo, como é admitido nos modelos encontrados na literatura. No

Figura 5.6: Perfil de pressão para o duto de CO₂ líquido especificado.



entanto como a diferença entre a temperatura do líquido e a temperatura do solo é pequena, não houve muita distinção no cálculo do fator de compressibilidade médio pela Eq. 5.23.

A grande importância do modelo compressível é obtenção do perfil das propriedades do fluido ao longo da linha. Desta forma, é possível utilizar estas informações para tomar melhores decisões de dimensionamento, como a capacidade de bombas e compressores ao final e/ou ao longo da linha de transporte. Liu et al. (2015) mostraram que o monitoramento da linha em conjunto com a simulação pode auxiliar

Figura 5.7: Perfil de temperatura para o duto de CO₂ líquido especificado.

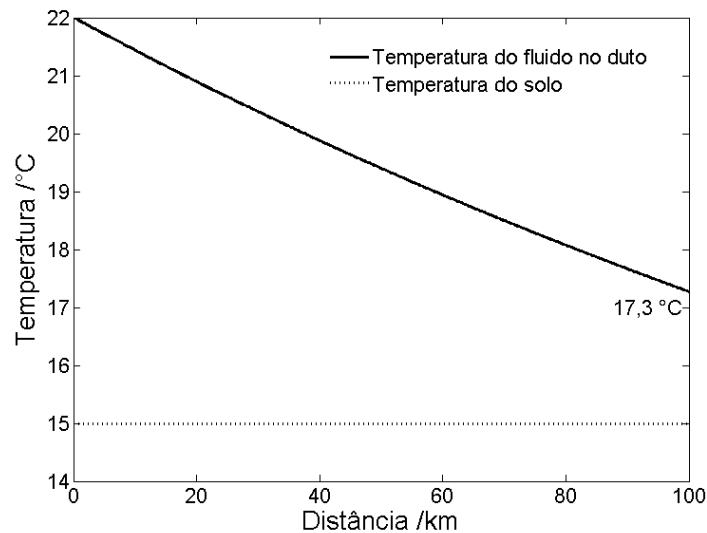


Tabela 5.3: Tabela dos dados de entrada e os parâmetros da *PDF* normal da simulação de CO₂ líquido

Variável	Unidade	Média	Desvio padrão
Temperatura de alimentação	°C	22	2
Pressão de alimentação	MPa	1,380	0,027
Vazão mássica do duto	kg/s	158,5	3
Temperatura do solo	°C	15	1

Fonte: (MCCOY; RUBIN, 2008).

na detecção de vazamentos. Além disso, de modo a avaliar melhor uma tomada de decisão é a avaliação de incerteza. No Capítulo 4, foi mostrado como a avaliação de incerteza pode auxiliar na determinação das curvas de operação do *surge* e do *stonewall*.

5.4.2 Avaliação da incerteza do escoamento de CO₂ líquido

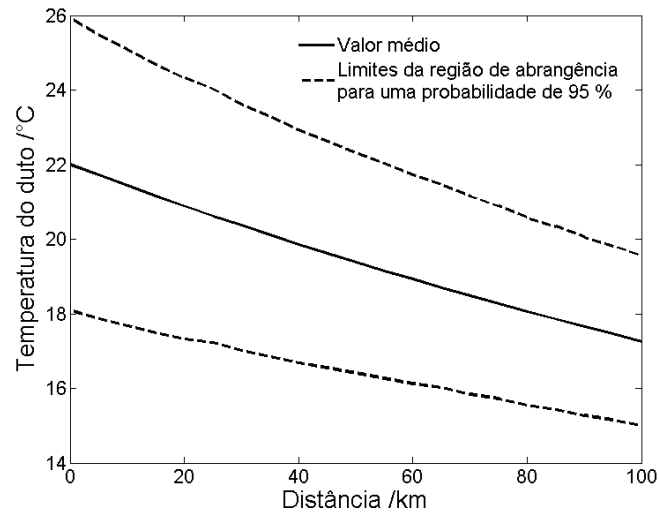
A análise de incerteza também foi inserida nesta aplicação de fluidos compressíveis. Para isto foi realizada a propagação de *PDF*'s via simulação de Monte Carlo, descrita e recomendada no Capítulo 3, para 100 mil pontos. O número de pontos nesta aplicação é maior visto que a resolução deste sistema de equações diferenciais é muito mais rápida do que no caso dos compressores. No caso dos compressores para a simulação do ponto de surge, por exemplo, é necessário realizar uma otimização, na qual possui a resolução de sistemas algébricos inseridas no cálculo da função objetivo, perda de carga. Nesta fator a simulação de linhas de CO₂, problemas de valores iniciais, são mais facilmente resolvidos, e possuem um custo computacional menor.

As variáveis de entrada cujas *PDF*'s foram propagadas estão dispostas na Tabela 5.3, e as suas distribuições foram consideradas Normais.

Para a simulação de Monte Carlo foi calculado a região de abrangência do perfil de temperatura e pressão do modelo compressível, como é apresentado nas Figuras 5.8 e 5.9. Pode-se notar que a região de abrangência da temperatura diminui ao longo do escoamento. Este fato pode ser explicado, pois a temperatura do fluido tende a se igualar a temperatura do solo que possui um incerteza menor que a temperatura de alimentação do duto, já que estamos considerando regime estacionário. Porém, observando a região de abrangência do perfil de pressão, nota-se que há um aumento

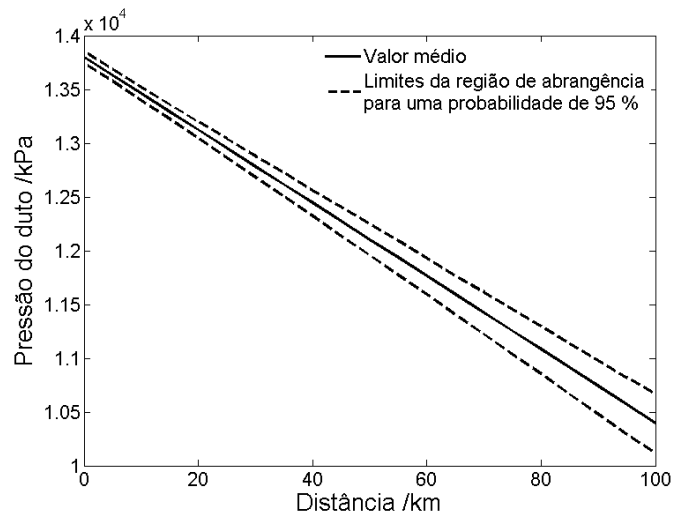
ao longo do duto. Desta maneira, ocorre um acúmulo da incerteza ao longo do escoamento.

Figura 5.8: Região de abrangência da temperatura do fluido ao longo da linha para uma probabilidade de 95 %.



No cálculo da temperatura ao longo da tubulação está regulada pela temperatura do solo, que é suposta ser conhecida, dessa forma esse maior conhecimento das condições de contorno conduz a uma menor incerteza na avaliação da incerteza ao longo da tubulação. Esta análise é feita não se considerando a transitoriedade da temperatura exterior ao solo, ou seja da atmosfera. Contudo o mesmo não pode ser dito para a pressão, portanto há um maior desconhecimento sobre o comportamento da pressão ao longo da tubulação e conseqüentemente sua incerteza aumenta

Figura 5.9: Região de abrangência da pressão do fluido ao longo da linha para uma probabilidade de 95 %.



à medida que nos afastamos do ponto inicial.

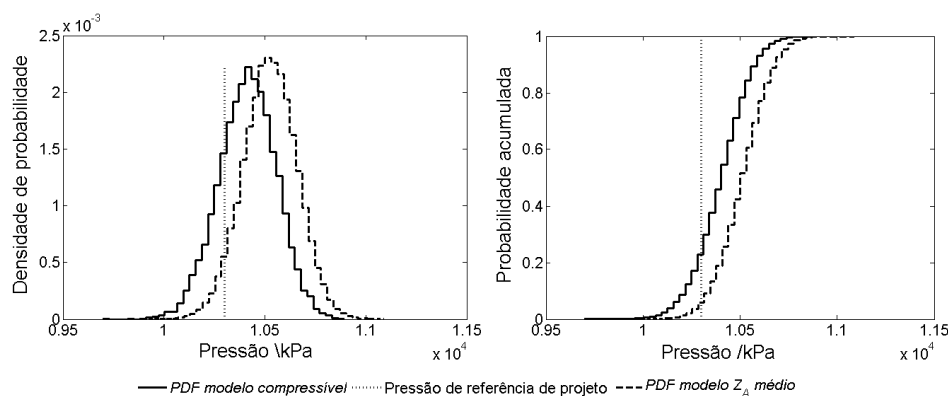
Também foi avaliada a *PDF* da pressão ao final do duto para o modelo de fator de compressibilidade constante. A Tabela 5.4 apresenta os valores da média e desvio-padrão dos pontos de Monte Carlo, calculados pelas Eq. 3.3 e Eq. 3.4. Embora os valores da média sejam diferentes a incerteza de ambos os métodos é similar. Pela Figura 5.10 que descreve a *PDF* e a *CDF* da pressão final do duto calculadas pelos dois métodos. Pode-se observar que as regiões de abrangência entre os dois modelos de escoamento são coincidentes em sua maior parte, entretanto a média das duas distribuições são bem distintas, reforçando a diferença existente entre os dois modelos.

A análise proposta por este trabalho é avaliar qual a probabilidade da pressão no final do duto ser menor que a especificada no projeto em 10,3 MPa. Para o modelo compressível a probabilidade vale 27,1 % e para o fator de compressibilidade médio 7,6 %. Isto mostra que mesmo que os dois modelos possam ser utilizados para o projeto de linhas sendo o CO₂ considerado como líquido, o uso do modelo do fator de compressibilidade médio neste caso pode acarretar em um avaliação errada da incerteza, tomando o modelo proposto como o referência, pois há menos simplificações presentes nele.

Tabela 5.4: Tabela dos dados da simulação de Monte Carlo para o escoamento em estado líquido

Modelo	Média /MPa	Desvio Padrão /MPa
Modelo proposto	1,040	0,014
Modelo da literatura	1,051	0,013

Figura 5.10: *PDF* e *CDF* da pressão ao final do duto para o escoamento de CO₂ líquido.



5.4.3 Escoamento em estado gasoso

O mesmo tratamento foi realizado considerando o escoamento de CO₂ no estado gasoso. Metz (2005) recomenda que a pressão de alimentação quando se trata de escoamento gasoso deve ser em torno de 4,5 MPa. Considerando esta pressão como sendo a pressão de entrada e considerando que a perda de pressão no duto não deve ser maior que 1,5 MPa, ou seja a pressão ao final da linha deve estar em torno de 3,0 MPa, o dimensionamento foi realizado seguindo os dois métodos o descrito pela Eq. 5.22, (MCCOY; RUBIN, 2008) e o proposto por este trabalho com base na Eq. 5.25. Esta especificação da perda de carga é importante, porque geralmente o fluido é comprimido novamente ao longo da tubulação, e caso a pressão seja muito baixa, o trabalho de compressão torna-se maior.

Os resultados do dimensionamento mostraram que os dois métodos convergiram para um mesmo diâmetro sendo o valor de 52,3 cm. Este comportamento demonstra que para o escoamento em estado gasoso os dois modelos são muito próximos ao realizar o dimensionamento do duto. Pode-se notar também que a influência da energia cinética no escoamento de CO₂ tanto no estado líquido quanto no gasoso se mostrou pequena de acordo com os resultados obtidos. Este comportamento já era esperado pois a não ser que seja observado uma variação muito grande do diâmetro, sempre a variação da energia cinética é desprezível em relação aos demais termos. O modelo da literatura despreza esta contribuição e mesmo assim consegue representar bem a perda de pressão.

Pela Eq. 5.27 a espessura do duto sugerida é de 1,3 cm, no entanto como tanto este diâmetro quanto esta espessura não correspondem aos diâmetros comerciais, foi aplicado o diâmetro NPS de 22 polegadas com *schedule* 40, cujos valores são os mais próximos do dimensionado. Assim os seus valores ajustados foram 52,7 no diâmetro interno e 55,9 cm para o diâmetro externo.

As Figuras 5.11 e 5.12 apresentam os perfis de pressão e temperatura, respectivamente. O resultado da simulação mostra que a pressão ao final da linha difere em 80 kPa com relação à pressão de referência utilizada no dimensionamento. Também foi averiguado que o perfil da temperatura do fluido decresce abaixo ainda da temperatura do solo, atingindo um valor no ao final do duto de 8,3 °C.

Este perfil de temperatura pode ser explicado por dois fatores: o primeiro é que no início do duto a temperatura tende a atingir a temperatura do solo; o segundo é que para um gás, a temperatura é mais sensível a variação da pressão e isso faz com que a temperatura continue diminuindo. Isto mostra a importância do estudo do perfil de temperatura do duto, principalmente em projetos mais sofisticados, como por exemplo na elaboração de proteções contra o corrosão. Também se pôde analisar sobre a possível formação de líquido, visto a temperatura de saturação na pressão no final do duto de 3,0 MPa, retorna um valor de $-5,5\text{ }^{\circ}\text{C}$. Dessa forma, pode-se ressaltar a importância da análise do perfil de temperatura também para monitorar o equilíbrio de fases no duto, o que pode levar a um aumento da perda de carga, dentre outras complicações.

Figura 5.11: Perfil de pressão para o duto de CO_2 gasoso especificado.

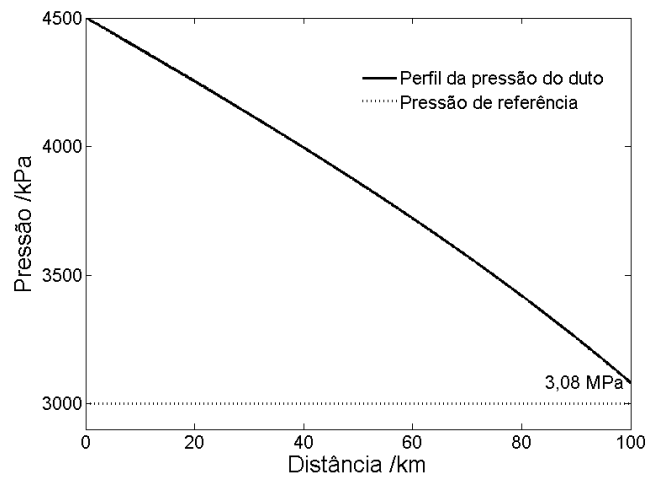
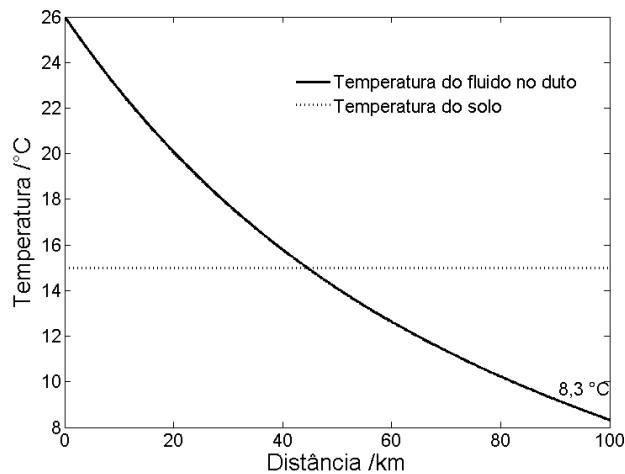


Figura 5.12: Perfil de temperatura para o duto de CO_2 gasoso especificado.



5.4.4 Avaliação de incerteza do escoamento de CO₂ gasoso

A avaliação da incerteza do perfil de temperatura e pressão também foi realizada neste estudo de caso. A Tabela 5.5 apresenta os parâmetros da *PDF* normal das variáveis de entrada para o método de Monte Carlo, sendo pontos de simulação também em um total de 100 mil. Os perfis de pressão e temperatura com uma probabilidade de abrangência de 95 % estão apresentados nas Figuras 5.13 e 5.14. Visto que o intervalo de abrangência da pressão aumenta ao longo do duto assim como no escoamento do estado líquido .

No entanto o intervalo de abrangência da temperatura do gás tende a diminuir até aproximadamente a distância de 60 km e depois a incerteza recomeça a aumentar gradativamente. Este fenômeno pode ser melhor visualizado na Figura 5.15 e na Tabela 5.6, que apresenta o desvio do intervalo de abrangência com relação à média do perfil de temperatura. Isto reforça, os dois fatores discutidos anteriormente para explicar o perfil de temperatura do escoamento gasoso: troca de calor inicialmente e influência da variação de pressão após 60 km. Recomenda-se, pela análise do perfil de temperatura e sua região de abrangência, que para casos onde o gás será recomprimido, o mesmo deve ser aquecido antes para evitar formação de líquido, visto que o limite mínimo da temperatura é de 6,32 °C.

Tabela 5.5: Tabela dos dados de entrada e os parâmetros da *PDF* normal da simulação de CO₂ líquido

Variável	Unidade	Média	Desvio padrão
Temperatura de alimentação	°C	26	2
Pressão de alimentação	MPa	4,500	0,009
Vazão mássica do duto	kg/s	76,1	1,5
Temperatura do solo	°C	15	1

Para a pressão ao final do duto a incerteza foi avaliada pelos dois modelos, como foi analisado no escoamento de CO₂ líquido. A *PDF* e *CDF* de ambos os modelos podem ser visualizados na Figura 5.16. O resultado reforça que há uma grande semelhança entre os dois modelos, já constatada pelo resultado do diâmetro no dimensionamento. Também foi possível inferir, pela análise da *PDF* da pressão ao final do duto, a probabilidade do gás chegar ao final a uma pressão maior que é a referência de projeto. Para o modelo diferencial a probabilidade é de 17,7 % e para o modelo da literatura, a probabilidade é 16,5 %.

Figura 5.13: Região de abrangência da temperatura do gás ao longo da linha para uma probabilidade de 95 %.

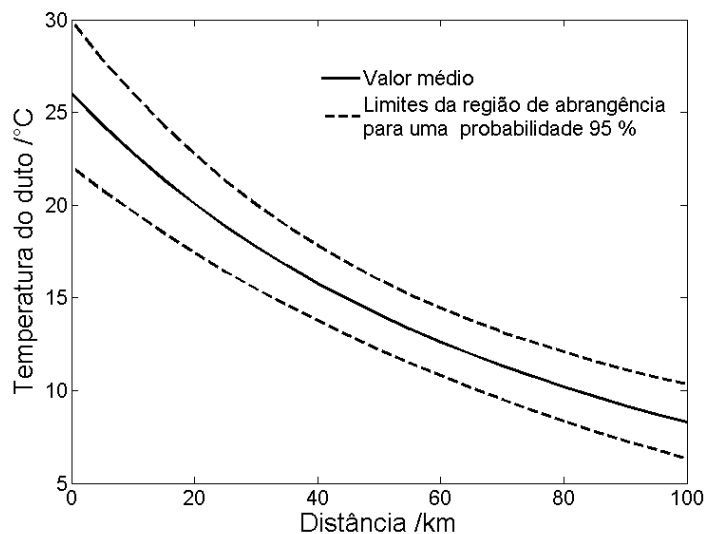
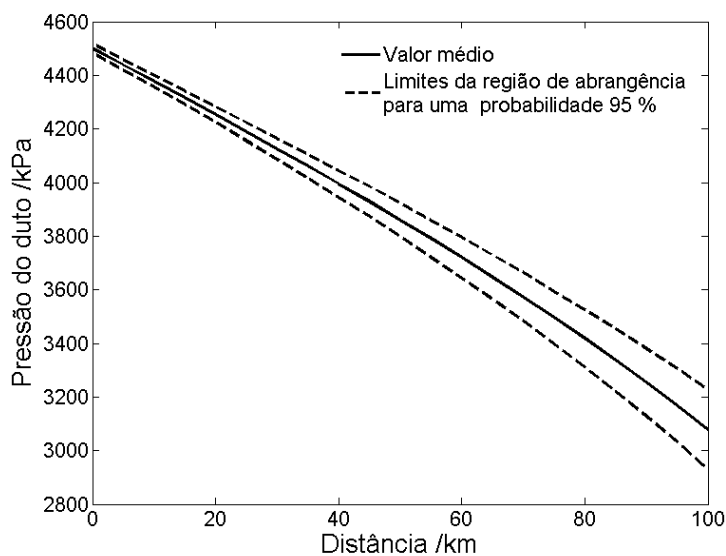


Figura 5.14: Região de abrangência da pressão do gás ao longo da linha para uma probabilidade de 95 %.



A Tabela 5.7 apresenta os valores da média e dos desvio-padrão da pressão no final do duto. Vale notar que o modelo da literatura não considera a incerteza da temperatura de entrada, como se pode observar na Eq. 5.22, e mesmo assim a incerteza da pressão por este modelo apresenta uma variabilidade, expressa pelo desvio-padrão, semelhante à abordagem diferencial.

Figura 5.15: Variação da região de abrangência da temperatura do gás em relação à média ao longo da linha.

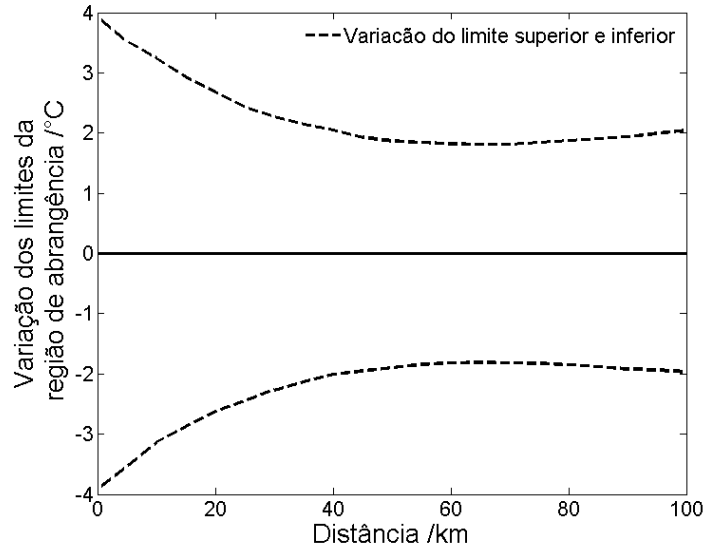


Tabela 5.6: Variação do intervalo de abrangência da temperatura com o comprimento

Distância /km	T_{sup}	T_{inf} /°C	$\Delta T(T_{sup} - T_{inf})$ /°C
0	29,92	22,09	7,84
10	26,02	19,64	6,38
20	22,74	17,43	5,31
30	20,03	15,48	4,55
40	17,82	13,77	4,05
50	15,95	12,18	3,76
60	14,42	10,79	3,64
70	13,14	9,50	3,64
80	12,07	8,35	3,72
90	11,13	7,28	3,86
100	10,33	6,32	4,02

Figura 5.16: PDF e CDF discretas da pressão final do gás.

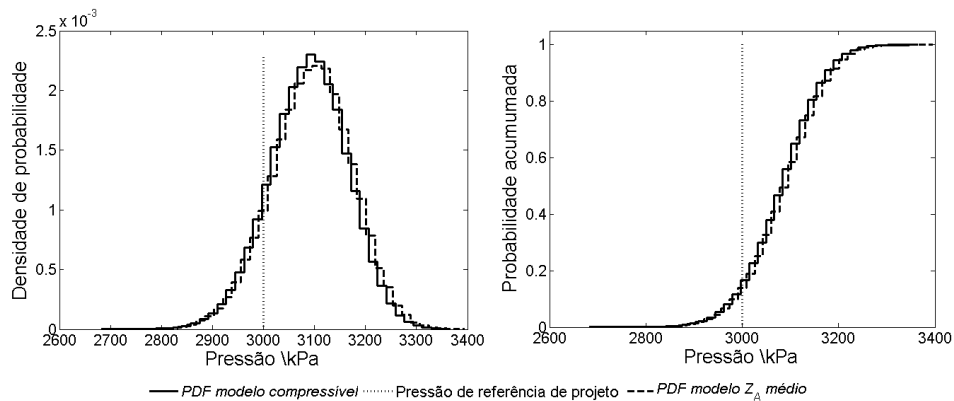


Tabela 5.7: Tabela dos dados da simulação de Monte Carlo para o escoamento em estado gasoso

Modelo	Média /kPa	Desvio Padrão /kPa
Modelo proposto	3079	76
Modelo da literatura	3086	79

A vantagem de avaliar a incerteza da pressão do duto é justamente obter uma probabilidade na qual as especificações são atendidas. No caso do líquido e do gás a probabilidade da pressão ser menor que a de referência é de 27,1 % e 17,7 % respectivamente, dada as incertezas consideradas. Esta análise pode influenciar na decisão se é necessário ou não realizar um novo dimensionamento do duto. O dimensionamento de um novo diâmetro, pode se aumentar o diâmetro da escala comercial e superdimensionar o duto, deixando-o mais caro. Outra opção é diminuir a variabilidade do processo, para tentar garantir uma incerteza menor da pressão final. Esta informação também pode ser útil no dimensionamento do compressor ou bomba que vai recomprimir o fluido, preparando-o para receber baixas pressões.

5.5 Conclusões parciais

Neste capítulo foi apresentada a aplicação do escoamento compressível no escoamento de transporte de fluidos em longas distâncias. As equações abordadas foram do tipo diferenciais, o que torna a simulação da linha mais rápida, comparada com o método de divisão da linha em vários volumes de controle (SANTANA; COSTA, 1992). Foram aplicadas estas equações para o transporte de CO₂ tanto no estado líquido tanto no estado gasoso.

Além de simulações do transporte de CO₂, foi realizada avaliação do dimensionamento do diâmetro da tubulação sob duas abordagens: considerando o fator de compressibilidade médio e outra com base nas equações do perfil de pressão ao longo do duto. Ambos os modelos do dimensionamento apresentaram resultados semelhantes, demonstrando que para o cálculo do diâmetro, as simplificações com fator de compressibilidade constante e desprezo da energia cinética podem ser adotadas. No entanto, para os perfis de temperatura e pressão o modelo simplificado mostrou-se não ser o ideal, visto que para a simulação no estado líquido as pressões ao final do duto são diferentes, enquanto que para o gás o perfil de temperatura pos-

sui uma tendência decrescente abaixo da temperatura do solo, e foram destacados os cuidados para evitar a formação de duas fases no duto.

Os resultados mostram a importância da utilização do modelo proposto – fator de compressibilidade variável e modelo de gás real, principalmente por realizar uma estimativa melhor das propriedades do fluido ao longo do duto, e pode ser usado no dimensionamento de válvulas e monitoramento do duto. É importante ressaltar também que nem sempre a contribuição da energia cinética pode ser desprezada, isso depende da faixa de densidade do fluido e da aplicação do escoamento compressível, como foi visto no Capítulo 4 com compressores centrífugos.

Uma importante análise também realizada foi a avaliação da incerteza dos perfis de temperatura e pressão dos fluidos. Sendo que para o líquido foi mostrado que a incerteza da temperatura tende a diminuir, ocasionado pela tendência da temperatura do gás atingir a do solo que possui uma incerteza menor. Enquanto que para o gás a incerteza diminui em parte do percurso e volta a aumentar à medida que a influência da variação da pressão impacta a temperatura. Já para o perfil de pressão foi mostrado que a incerteza tende a aumentar ao longo da linha.

Outra contribuição da avaliação da incerteza, é a possibilidade de avaliar a probabilidade do dimensionamento calculado atender a premissa de que a pressão ao final do duto pode ser maior que a especificada. Ao realizar esta análise com os dois modelos de escoamento apresentados, foi possível mostrar que para o escoamento em estado líquido, o modelo de fator de compressibilidade constante pode retornar um resultado que indica uma diferença de 20 % na probabilidade do duto não atender às especificações.

Por fim, este trabalho demonstrou a importância de modelos mais rigorosos tanto no dimensionamento como na simulação de dutos de longas distâncias. Além disto, a avaliação da incerteza mostrou-se essencial na tomada de decisão do âmbito do projeto e da operação.

Capítulo 6

Conclusão e Recomendações

Neste trabalho foram abordadas as aplicações do escoamento compressível na modelagem e simulação de sistemas gasosos e na presença de incertezas, para dois casos: caracterização de compressores centrífugos, e transporte de CO₂ por longos gasodutos.

Na caracterização de compressores centrífugos, o modelo fenomenológico abordado por (GRAVDAHL et al., 2000), considera que a compressibilidade constante e gás ideal, foi aperfeiçoado considerando fluido compressível e gás real. Neste aspecto, foi apresentada uma modelagem mais rigorosa das equações que descrevem, visto que normalmente as integrais dos balanços de energia são normalmente aproximadas. Também foram estudadas três misturas gasosas, sendo elas: o ar, gás natural e gás de síntese, em condições de temperatura e pressão normalmente encontradas na indústria.

Na caracterização de compressores centrífugos, o modelo fenomenológico abordado por Gravdahl et al. (2000), que desconsidera a compressibilidade do gás e o que segue um comportamento ideal, foram adaptados.

As simulações mostraram que há uma significativa distinção entre o modelo considerando escoamento compressível e escoamento incompressível, principalmente ao aumentar a rotação do eixo do compressor, onde as vazões correspondentes às das curvas de surge podem diferenciar em até 37 %, como apresentado nas Seções 4.4.1, 4.4.4 e 4.4.5.

Já para o estudo de gás natural em altas pressões, além da compressibilidade do gás, Seção 4.4.3, a equação de estado apresentou uma importante contribuição na construção das curvas, visto que a pressão de saída do compressor pode variar em até 470 kPa ou quase 4,7 atm.

Além de melhor prever as curvas de *surge* e *stonewall* do compressor, o modelo a partir do escoamento compressível, também contribui para definir melhor a região de operação do compressor. A avaliação da incerteza destas curvas, através do método de Monte Carlo, e define a melhor região de operação do compressor, como apresentado nas Seções 4.4.2, 4.4.3 e 4.4.4. Esta avaliação se mostrou importante, porque em todos os casos as curvas de limites de operação ficaram abaixo do fator de 10 % recomendado por (OLDŘICH, 2004), mesmo adotando probabilidades de abrangência de 95 % e 99 %. Assim, pode-se, com um sistema de controle adequado operar o compressor em condições de maior eficiência e com segurança.

Além de considerar fator de compressibilidade não constante, gás real e perda de carga no compressor, o modelo apresentado também permite acompanhar o perfil das propriedades do gás ao longo do compressor. Isto pode ser significativo em projetos de novos compressores. É também possível analisar a influência das perdas de carga no compressor.

É importante ressaltar que o bom desempenho das curvas de operação obtidas com incerteza, comparadas com os projetos que consideram um fator de segurança 10 %, só é possível devido a uma baixa incerteza das variáveis do processo (temperatura e pressão de sucção e a rotação). Dessa forma recomenda-se que haja bons sistemas metrológicos e de controle de modo a manter a variabilidade do processo baixa e por consequência o processo operando em segurança e com alta eficiência. Esta recomendação é válida tanto para o estudo de compressores centrífugos, transporte de fluidos e qualquer outro processo industrial.

No Capítulo 5 foram apresentadas as simulações do transporte de gás carbônico tanto no estado líquido, quanto gasoso, em longas distâncias. Para a realização destas simulações, e também do dimensionamento, as equações dos balanços de energia foram adequadas na forma de um sistema de equações diferenciais o qual permite a resolução numérica mais rápida que a abordagem da divisão do duto em vários volumes de controle como apresentado em Santana e Costa (1992). Vale ressaltar que estes modelos podem ser utilizados para o transporte de qualquer gás desde que este seja bem representado por uma equação de estado.

O dimensionamento da tubulação de transpor de fluido foi realizado com base nas premissas e no modelo da linha apresentados por (MCCOY; RUBIN, 2008). No

entanto algumas das premissas adotadas por estes autores, como a temperatura e fator de compressibilidade constantes foram desconsideradas no modelo rigoroso apresentado na Seção 5.1. Os dimensionamentos pelos dois métodos apresentaram um resultado similar tanto para o transporte no estado líquido quanto no estado gasoso, isto indicou que no caso nominal a consideração de um fator de compressibilidade médio consegue estimar bem a pressão ao final do duto. Entretanto o modelo mais simplificado possui a desvantagem de só observar o início e o final do duto, não informando o perfil de temperatura e pressão.

Como o modelo mais rigoroso é capaz de calcular o perfil de temperatura e pressão ao longo do duto, foi mostrando que o perfil de temperatura não atende um valor constante, como havia sido considerado no modelo simplificado de McCoy e Rubin (2008). Este comportamento é observado principalmente para o escoamento do estado gasoso, cujo perfil de temperatura pode atingir uma temperatura abaixo daquela considerada do solo, em virtude da sensibilidade com relação à variação de pressão.

Além do dimensionamento e do cálculo dos perfis de temperatura e pressão, este trabalho também, através do método de Monte Carlo, avaliou a incerteza destes perfis, como mostrado nas Seções 5.4.2 e 5.4.4. Esta avaliação da incerteza permitiu observar a dúvida que o perfil de temperatura e pressão possuem. Tanto para o escoamento de CO₂ líquido ou gasoso a incerteza da pressão, expresso pela região de abrangência, aumenta ao longo do duto.

A incerteza da temperatura apresentou um comportamento peculiar nos dois casos (escoamento líquido e gasoso) devido à incerteza da sucção do gasoduto ser maior que à incerteza da temperatura do solo. Dessa forma a incerteza da temperatura do estado líquido tende a diminuir, até se aproximar da temperatura do solo. Para o estado gasoso, a incerteza da temperatura diminui até uma dada distância e logo após começa a aumentar novamente à medida que a variação da pressão se torna mais significativa ao longo do escoamento.

Assim, a avaliação da incerteza se mostrou importante, visto que influencia no dimensionamento de outros equipamentos como válvulas, aquecedores e compressores. Dessa forma, isso ressalta a importância de um modelo mais rigoroso em simulações de linhas de transporte de fluidos.

Além do perfil de temperatura e pressão, também foi avaliada a incerteza da pressão ao final do duto sob os dois modelos, o descrito pela literatura e o modelo apresentado por este trabalho. Dessa forma foram obtidas as *PDF* da pressão no final do duto para os dois modelos abordados. Assim, é possível inferir a probabilidade do gás não atingir a pressão desejada no dimensionamento. Esta é uma informação relevante, pois pode auxiliar no dimensionamento de compressores ou bombas.

O estudo da incerteza da pressão ao final do duto mostrou uma probabilidade da pressão ser menor que a desejada de 27 % e 16 % na simulação do estado líquido e gasoso respectivamente. Estes valores indicam que caso o fluido seja re-comprimido, uma maior quantidade de energia deve ser fornecida. Diante disto, recomenda-se empenhar um maior esforço de diminuir esta incerteza, ou dimensionar bombas e compressores com uma capacidade maior. Outra opção seria refazer o dimensionamento e aumentar o diâmetro do duto, no entanto esta alternativa pode aumentar significativamente o investimento necessário para a instalação da tubulação.

Por fim, este trabalho apresentou a importância de estudar e aplicar as equações de escoamento compressível com o auxílio de equações de estado para gases reais em compressores e escoamento de gases em tubulações. Além disso, a avaliação da incerteza se mostrou de importante para as tomadas de decisão nos estudos apresentados seja para obter uma maior eficiência nos compressores centrífugos seja para um melhor dimensionamento da linhas de transporte de CO₂. Isto remete a que em trabalhos futuros, estes conceitos possam ser difundidos e aplicados para uma melhor qualidade no projeto e operação de processos e equipamentos com fluidos compressíveis.

Capítulo 7

Trabalhos futuros

No caso de compressores centrífugos, ainda falta aplicar a implementação da metodologia concebida neste trabalho em compressores industriais com curvas industriais conhecidas, e assim validá-lo. Um ponto a ser avaliado é a aplicação desta metodologia para sistemas com multiestágios de compressão, e obter as suas respectivas curvas. Outro estudo sugerido é a avaliação das incertezas das curvas do compressor, funções da rotação e da vazão mássica, visto que neste trabalho foram concentradas apenas nas curvas de surge e stonewall. Assim seria interessante avaliar a incerteza das propriedades do compressor, como temperatura do gás, perda de carga e eficiência.

Seria importante também ampliar estes modelos para o regime dinâmico, visto que muitos trabalhos nesta linha realizam as mesmas simplificações de escoamento incompressível. Recomenda-se aplicar as curvas de operação obtidas com base na incerteza para o *surge* e o *stonewall* como restrições em controladores industriais, levando o processo a uma região de maior eficiência, com maior garantia de atender aos requisitos de segurança.

Para escoamento e dimensionamento de tubulações, recomenda-se a aplicação do regime dinâmico nos modelos do escoamento considerando perda de carga em regime dinâmico, como também realizar simulações e validação das premissas utilizando outros gases, como, por exemplo gás natural. Uma outra proposta de estudo que pode ser realizado, é o transporte em dutos tendo diferentes temperaturas do meio ambiente, como trechos em superfície, ou submersos. Além disto é necessário incorporar no modelo a influência da energia potencial gravitacional, importante na simulação de injeção em poços de petróleo. Além disto, podese adaptar os modelos também para sistemas multifásicos e redes de linhas de gás, neste caso sendo

necessário o estudo conjunto de escoamento com equilíbrio de fases.

Um ponto interessante a ser estudado seria a utilização de modelos sob o ponto de vista de análise econômica e considerar no dimensionamento do duto os investimentos de instalação, operação e manutenção, na presença de incertezas. Desta forma realizar uma otimização do duto que gere o maior retorno do investimento possível. Incorporar também a estes modelos unidades de compressão e descrever qual seria a melhor posição das mesmas que aumentasse a eficiência do transporte.

Referências

ALT, B.; HERMANN, E. Robust Surge Avoidance Control for a Low Pressure Compressor of a Turbojet Engine. *Journal of Intelligent & Robotic Systems*, Springer Netherlands, v. 69, n. 1-4, p. 57–67, 2013. ISSN 0921-0296. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s10846-012-9700-y>>.

ARETAKIS, N.; MATHIOUDAKIS, K.; KEFALAKIS, M.; PAPAILIOU, K. Turbocharger Unstable Operation Diagnosis Using Vibroacoustic Measurements. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, ASME, v. 126, n. 4, p. 840–847, nov 2004. ISSN 0742-4795. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1115/1.1771686>>.

ASME. *Process Piping - ASME Code for Pressure Piping, B31*. [S.l.], 2011. v. 76, n. 8, 95–108 p.

BENEDICT, M.; WEBB, G. B.; RUBIN, L. C. An Empirical Equation for Thermodynamic Properties of Light Hydrocarbons and Their Mixtures I. Methane, Ethane, Propane and n-Butane. *The Journal of Chemical Physics*, v. 8, n. 4, p. 334–345, 1940. ISSN 00219606.

BIPM; IEC; IFCC; ILAC; ISO; IUPAC; IUPAP; OIML. Evaluation of measurement data — Guide to the expression of uncertainty in measurement. n. September, 2008.

BIPM; IEC; IFCC; ILAC; ISO; IUPAC; IUPAP; OIML. Evaluation of measurement data — Supplement 1 to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement” — Propagation of distributions using a Monte Carlo method. *Evaluation*, JCGM 101:2, p. 90, 2008.

BIPM; IEC; IFCC; ILAC; ISO; IUPAC; IUPAP; OIML. JCGM 102 : 2011 Evaluation of measurement data – Supplement 2 to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement” – Extension to any number of output quantities. *Jcgm*, v. 102, n. October, p. 1–72, 2011.

BOYCE, M. P. Principles Of Operation And Performance Estimation Of Centrifugal Compressors. *XXII TURBO MACHINERY SYMPOSIUM*.

BROEK, M. van den; BREDERODE, E.; RAMÍREZ, A.; KRAMERS, L.; KUIP, M. van der; WILDENBORG, T.; TURKENBURG, W.; FAAIJ, A. Designing a cost-effective CO2 storage infrastructure using a GIS based linear optimization energy model. *Environmental Modelling & Software*, Elsevier Ltd, v. 25, n. 12, p. 1754–1768, 2010. ISSN 13648152. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364815210002045>>.

BRUN, K.; NORED, M. G. *Application guideline for centrifugal compressor surge control systems*. [S.l.], 2008. v. 4.3, n. April, 9–10 p.

CHACZYKOWSKI, M.; OSIADACZ, A. J. Dynamic simulation of pipelines containing dense phase/supercritical CO₂-rich mixtures for carbon capture and storage. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Elsevier Ltd, v. 9, p. 446–456, 2012. ISSN 17505836. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijggc.2012.05.007>>.

CHANDEL, M. K.; PRATSON, L. F.; WILLIAMS, E. Potential economies of scale in CO₂ transport through use of a trunk pipeline. *Energy Conversion and Management*, Elsevier Ltd, v. 51, n. 12, p. 2825–2834, 2010. ISSN 01968904. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2010.06.020>>.

CHU, F.; WANG, F.; WANG, X.; ZHANG, S. Performance modeling of centrifugal compressor using kernel partial least squares. *Applied Thermal Engineering*, Elsevier Ltd, v. 44, p. 90–99, nov 2012. ISSN 13594311. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1359431112002281>>.

CLAUDINO, R.; FONTES, R. M.; NASCIMENTO, E.; LIMA, R. Avaliação da incerteza de medição na determinação do ponto de fluidez de um óleo combustível. In: *8 Congresso Brasileiro de Metrologia*. Bento Gonçalves: [s.n.], 2015. p. 1–4. Disponível em: <http://media.metrologia2015.org.br/media/uploads/trabalhos/Artigo{_}Ponto{_}de{_}Fluidez{_}{_}{_}Metro>.

CONN, A. R.; GOULD, N. I. M.; TOINT, P. L. *Trust Region Methods*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000. (MPS-SIAM Series on Optimization). ISBN 9780898719857. Disponível em: <<https://books.google.co.uk/books?id=wfs-hsrd4WQC>>.

COSTA, E. A.; MARTINS, M. A. F.; FERNANDES, J. K. O.; KALID, R. A. Análise de desempenho de um trocador de calor industrial considerando a incerteza de medição. In: *XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química*. Florianópolis: [s.n.], 2014. p. 1–8.

ELAOU, S.; HADJ-TAÏEB, E. Transient flow in pipelines of high-pressure hydrogen–natural gas mixtures. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 33, n. 18, p. 4824–4832, 2008. ISSN 03603199. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S036031990800743X>>.

FERGUSON, T. *The centrifugal compressor stage*. London: [s.n.], 1963.

Fox, R.W.; McDonald, A.T.; Pritchard, P. *Introdução à mecânica dos fluidos*. 5^a ed. Rio de Janeiro: [s.n.], 2001. ISBN 8521612613.

GALINDO, J.; SERRANO, J.; GUARDIOLA, C.; CERVELLÓ, C. Surge limit definition in a specific test bench for the characterization of automotive turbochargers. *Experimental Thermal and Fluid Science*, v. 30, n. 5, p. 449–462, may 2006. ISSN 08941777. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0894177705001275>>.

GAO, L.; FANG, M.; LI, H.; HETLAND, J. Cost analysis of CO₂ transportation: Case study in China. *Energy Procedia*, Elsevier, v. 4, p. 5974–5981, 2011. ISSN 18766102. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1876610211008794>>.

GARCIA, J. G.; REQUIÃO, R.; KALID, R. D. A. Extensão do Método de Kragten para sistema multivariados. *VII Congresso Brasileiro de Metrologia*, n. 1, p. 1–4, 2013.

GHANBARIANNAEENI, A.; GHAZANFARIHASHEMI, G. Protecting a centrifugal compressor from surge. *Pipeline & Gas Journal*, v. 239, n. 3, 2012.

GOMES, M. C.; TRUSLER, J. The speed of sound in two methane-rich gas mixtures at temperatures between 250 K and 350 K and at pressures up to 20 MPa. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, v. 30, n. 9, p. 1121–1129, 1998. ISSN 00219614. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021961498903780>>.

GOPALAKRISHNAN, A.; BIEGLER, L. T. Economic Nonlinear Model Predictive Control for periodic optimal operation of gas pipeline networks. *Computers and Chemical Engineering*, Elsevier Ltd, v. 52, p. 90–99, 2013. ISSN 00981354. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2012.11.011>>.

GRABOSKI, M. S.; DAUBERT, T. E. A Modified Soave Equation of State for Phase Equilibrium Calculations . 1 Hydrocarbon Systems. v. 17, n. 4, 1978.

GRABOSKI, M. S.; DAUBERT, T. E. Modified Soave Equation of State for Phase Equilibrium Calculations. 3. Systems Containing Hydrogen. v. 18, n. 2, p. 300–306, 1979.

GRAVDAHL, J. T. *Modeling and Control of Surge and Rotating Stall in Compressors*. Tese (Doutorado) — Norwegian University of Science and Technology, 1998.

GRAVDAHL, J. T.; WILLEM, F.; JAGER, B. D.; EGELAND, O. Modeling for surge control of centrifugal compressors : comparison with experiment. In: *Conference on DEcision and Control*. Sydney: [s.n.], 2000. p. 1341–1346.

GRAVDAHL, J. T.; WILLEMS, F.; JAGER, B. D.; EGELAND, O. Modeling of Surge in Free-Spool Centrifugal Compressors: Experimental Validation. *Journal of Propulsion and Power*, v. 20, n. 5, p. 849–857, 2004. ISSN 0748-4658.

GREEN, D.; PERRY, R. *Perry's Chemical Engineers' Handbook, Eighth Edition*. McGraw-Hill Education, 2007. (McGraw Hill professional). ISBN 9780071593137. Disponível em: <<https://books.google.com.au/books?id=tH7IVcA-MX0C>>.

GRONG, T. S. Modeling of Compressor Characteristics and Active Surge Control. n. June, 2009.

HWANG, C. Burnett and pycnometric (p,Vm,T) measurements for natural gas mixtures. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, v. 29, n. 12, p. 1455–1472, 1997. ISSN 00219614. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021961497902585>>.

Incropera, F.P.; De Witt, D. Escoamento Interno. In: *Fundamentos de Transferência de Calor e Massa*. 5ª. ed. [S.l.]: LTC, 2003. p. 258–373.

Javadi Moghaddam, J.; MADANI, M. A decoupled adaptive neuro-fuzzy sliding mode control system to control rotating stall and surge in axial compressors. *Expert Systems with Applications*, Elsevier Ltd, v. 38, n. 4, p. 4490–4496, apr 2011. ISSN 09574174. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0957417410010791>>.

JAYAPALAN, G.; AGNIHOTRI, G.; DESHPANDE, D. M. Real Time Implementation of Incremental Fuzzy Logic Controller for Gas Pipeline Corrosion Control. v. 2014, 2014.

JENSEN, M. D.; PEI, P.; SNYDER, A. C.; HEEBINK, L. V.; BOTNEN, L. S.; GORECKI, C. D.; STEADMAN, E. N.; HARJU, J. A. Methodology for Phased Development of a Hypothetical Pipeline Network for CO₂ Transport during Carbon Capture, Utilization, and Storage. 2013.

JIANG, W.; KHAN, J.; DOUGAL, R. a. Dynamic centrifugal compressor model for system simulation. *Journal of Power Sources*, v. 158, n. 2, p. 1333–1343, aug 2006. ISSN 03787753. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378775305014813>>.

KNOOPE, M.; RAMÍREZ, a.; FAAIJ a.P.C. A state-of-the-art review of techno-economic models predicting the costs of CO₂ pipeline transport. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Elsevier Ltd, v. 16, p. 241–270, aug 2013. ISSN 17505836. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S175058361300011X>>.

KOELBL, B.; BROEK, M. van den; RUIJVEN, B. van; FAAIJ a.P.C.; VUUREN, D. van. Uncertainty in the deployment of Carbon Capture and Storage (CCS): A sensitivity analysis to techno-economic parameter uncertainty. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Elsevier Ltd, v. 27, p. 81–102, aug 2014. ISSN 17505836. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1750583614001170>>.

KRAGTEN, J. A standard scheme for calculating numerically standard deviations and confidence intervals. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 28, n. 1, p. 89–97, 1995. ISSN 01697439.

KUS, B.; NEKSA, P. Development of one-dimensional model for initial design and evaluation of oil-free CO₂ development of a one-dimensional model for the evaluation of a turbo-compressor initial design and oil-free CO₂. v. 6, 2013.

LEAL, D. d. S. *Avaliação de equações de estado no cálculo de propriedades do dióxido de carbono úteis ao estudo do seu escoamento*. 253 p. Tese (Doutorado), 2012.

LEE, B. I.; KESLER, M. G. A generalized thermodynamic correlation based on three-parameter corresponding states. *AIChE Journal*, v. 21, n. 3, p. 510–527, may 1975. ISSN 0001-1541. Disponível em: <<http://doi.wiley.com/10.1002/aic.690210313>>.

LI, J.; YIN, Y.; LI, S.; ZHANG, J. Numerical simulation investigation on centrifugal compressor performance of turbocharger. *Journal of Mechanical Science and Technology*, v. 27, n. 6, p. 1597–1601, jul 2013. ISSN 1738-494X. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/s12206-013-0405-3>>.

LI, S.; LI, F. Prediction of Cracking Gas Compressor Performance and Its Application in Process Optimization. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, Chemical Industry and Engineering Society of China (CIESC) and Chemical Industry Press (CIP), v. 20, n. 6, p. 1089–1093, dec 2012. ISSN 10049541. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1004954112605916>>.

LIU a.X.; ZHENG, X. Methods of surge point judgment for compressor experiments. *Experimental Thermal and Fluid Science*, Elsevier Inc., v. 51, p. 204–213, nov 2013. ISSN 08941777. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S089417771300174X>>.

LIU, C.; LI, Y.; MENG, L.; WANG, W.; ZHAO, F.; FU, J. Computational fluid dynamic simulation of pressure perturbations generation for gas pipelines leakage. *Computers and Fluids*, Elsevier Ltd, v. 119, p. 213–223, 2015. ISSN 00457930. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2015.06.023>>.

MARTINS, M. A. F.; KALID, R. A. COMPARAÇÃO ENTRE OS MÉTODOS LINEAR E NÃO LINEAR PARA A. v. 21, n. 6, 2010.

MARTINS, M. A. F.; REQUIAO, R.; KALID, R. Correções de ordens superiores para a incerteza padrão combinada. *VI Congresso Brasileiro de Metrologia*, p. 1–4, 2011.

MASSEY, F. J. The Kolmogorov-Smirnov Test for Goodness of Fit. *Journal of the American Statistical Association*, v. 46, n. 253, p. 68–78, 2010.

MASSOL, O.; TCHUNG-MING, S.; BANAL-ESTAÑOL, A. Joining the CCS club! The economics of CO₂ pipeline projects. *European Journal of Operational Research*, v. 247, n. 1, p. 259–275, nov 2015. ISSN 03772217. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0377221715004245>>.

MCCOY, S.; RUBIN, E. An engineering-economic model of pipeline transport of CO₂ with application to carbon capture and storage. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, v. 2, n. 2, p. 219–229, apr 2008. ISSN 17505836. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1750583607001193>>.

MEIRA, R. L.; COSTA, G. M. N.; KALID, R. A.; PONTES, K. V. Novo Método Para a Caracterização Compressores Centrifugos Na Presença de Incerteza. In: *Congresso de Métodos Numéricos em Engenharia*. [S.l.: s.n.], 2015. p. 1–19.

METZ, B. *Carbon dioxide capture and storage: special report of the intergovernmental panel on climate change*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005. ISBN 052186643X.

NIMTZ, M.; KLATT, M.; WIESE, B.; KÜHN, M.; Joachim Krautz, H. Modelling of the CO₂ process- and transport chain in CCS systems-Examination of transport and storage processes. *Chemie der Erde - Geochemistry*, Elsevier,

- v. 70, n. SUPPL. 3, p. 185–192, 2010. ISSN 00092819. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.chemer.2010.05.011>>.
- NIU, D.; SHI, A.; CHANG, Y.; WANG, F. Modelling of Multistage Centrifugal Compressor *. v. 973, p. 1144–1147, 2011.
- NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. *Numerical Optimization*. Springer New York, 2006. (Springer Series in Operations Research and Financial Engineering). ISBN 978-0-387-30303-1. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/978-0-387-40065-5>>.
- OLDŘICH, J. VARIABLE COMPOSITION GAS CENTRIFUGAL COMPRESSOR. In: *ČKD NOVÉ ENERGO*. Papiernička: [s.n.], 2004. p. 177–184.
- PENG, D.-Y.; ROBINSON, D. B. A New Two-Constant Equation of State. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, v. 15, n. 1, p. 59–64, 1976. ISSN 0196-4313. Disponível em: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/i160057a011>>.
- PIRES, J. C. M.; MARTINS, F. G.; ALVIM-FERRAZ, M. C. M.; SIMÕES, M. Recent developments on carbon capture and storage: An overview. *Chemical Engineering Research and Design*, Institution of Chemical Engineers, v. 89, n. 9, p. 1446–1460, 2011. ISSN 02638762. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.cherd.2011.01.028>>.
- POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. *The properties of gases and liquids*. 5th. ed. McGraw-Hill, 2001. ISBN 9780070116825. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=s{_}NUAAAAM>.
- POWELL, M. J. D. A fast algorithm for nonlinearly constrained optimization calculations. In: *Numerical Analysis*. Springer Berlin Heidelberg, 1978. p. 144–157. Disponível em: <<http://www.springerlink.com/index/10.1007/BFb0067703>>.
- REDLICH, O.; KWONG, J. N. S. On the Thermodynamics of Solutions. V. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions. *Chemical Reviews*, v. 44, n. 1, p. 233–244, feb 1949. ISSN 0009-2665. Disponível em: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/cr60137a013>>.
- REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; SHERWOOD, T. K. *The properties of gases and liquids*. New York: [s.n.], 1977. 688 p. ISBN 0070517908.
- REQUIÃO, R.; MARTINS, M. A. F.; KALID, R. d. A.; SOARES, R. d. P. Uncertainty evaluation for multivariate industrial processes. *Computer Aided Chemical Engineering*, v. 31, p. 365–369, 2012.
- RODRIGUES, P. S. B. *Compressores Industriais*. 1. ed. [S.l.: s.n.], 1991. 509 p. ISBN 8571900299.
- ROMUALDO, M. d. S. *Otimização geométrica e aerodinâmica de um impelidor de compressor centrífugo*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2011.

- SANDBERG, M. R.; STAFF, S. Equation Of State Influences On Compressor Performance Determination. In: *THIRTY-FOURTH TURBOMACHINERY SYMPOSIUM*. [S.l.: s.n.], 2005.
- SANTANA, G. L.; COSTA, G. M. N. Dimensionamento de linha de gás natural utilizando equação de estado multiparametrica. In: *Simposio Latinoamericano de Propriedade de Fluidos y Equilibrio de Fases*. Oaxaca - México: [s.n.], 1992. p. 385–394.
- SHAMPINE, L. F.; REICHEL, M. W. The MATLAB ODE Suite. *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 18, n. 1, p. 1–22, jan 1997. ISSN 1064-8275. Disponível em: <<http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/S1064827594276424>>.
- SHAMPINE, L. F.; REICHEL, M. W.; KIERZENKA, J. A. Solving Index-1 DAEs in MATLAB and Simulink. *SIAM Review*, v. 41, n. 3, p. 538–552, jan 1999. ISSN 0036-1445. Disponível em: <<http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/S003614459933425X>>.
- SMITH, J. M.; Van Ness, H. C.; ABBOTT, M. M. *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*. [S.l.: s.n.], 2005. v. 27. 584 p. ISSN 00219584. ISBN 0072402962.
- SOAVE, G. Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state. *Chemical Engineering Science*, v. 27, n. 6, p. 1197–1203, jun 1972. ISSN 00092509. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0009250972800964>>.
- STARLING, K. E.; POWERS, J. E. Enthalpy of Mixtures by Modified BWR Equation. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, v. 9, n. 4, p. 531–537, nov 1970. ISSN 0196-4313. Disponível em: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/i160036a002>>.
- VALDERRAMA, O. The State of the Cubic Equations of State. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, p. 1603–1618, 2003.
- WANG, L.; YANG, C.; ZHAO, B.; LAO, D.; MA, C.; LI, D. The change of the inlet geometry of a centrifugal compressor stage and its influence on the compressor performance. *Journal of Thermal Science*, v. 22, n. 3, p. 197–208, may 2013. ISSN 1003-2169. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/s11630-013-0613-2>>.
- WANG, Z.; Fimbres Weihs, G.; CARDENAS, G.; WILEY, D. Optimal pipeline design for CCS projects with anticipated increasing CO₂ flow rates. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Elsevier Ltd, v. 31, p. 165–174, dec 2014. ISSN 17505836. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1750583614003119>>.
- WATSON, N.; JANOTA, M. *Turbocharging the Internal Combustion Engine*. New York: [s.n.], 1982.
- Weir Engineering Services Ltd. *Case Study Natural gas compressor re-rate Natural gas compressor re-rate in South East Asia*. [S.l.], 2002. Disponível em: <www.weirpowerindustrial.com>.

WITKOWSKI, A.; RUSIN, A.; MAJKUT, M.; RULIK, S.; STOLECKA, K. Comprehensive analysis of pipeline transportation systems for CO₂ sequestration. Thermodynamics and safety problems. *Energy Conversion and Management*, Elsevier Ltd, v. 76, p. 665–673, 2013. ISSN 01968904. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0196890413004664>>.

ZHANG, Z.; WANG, G.; MASSAROTTO, P.; RUDOLPH, V. Optimization of pipeline transport for CO₂ sequestration. *Energy Conversion and Management*, v. 47, n. 6, p. 702–715, apr 2006. ISSN 01968904. Disponível em: <<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0196890405001561>>.

ZHU, Z. F.; MA, C. C.; CHEN, S. Investigation on surge in centrifugal compressors. *Journal of Beijing Institute of Technology (English Edition)*, v. 18, n. 4, p. 422–427, 2009. ISSN 10040579.

ZIGRANG, D. J.; SYLVESTER, N. D. Explicit approximations to the solution of Colebrook's friction factor equation. *AIChE Journal*, v. 28, n. 3, p. 514–515, may 1982. ISSN 0001-1541. Disponível em: <<http://doi.wiley.com/10.1002/aic.690280323>>.

Apêndice A

Publicações

Este trabalho gerou um artigo publicado no Congresso de Métodos Numéricos em Engenharia, realizado em Lisboa no ano de 2015:

- Novo método de caracterização de compressores centrífugos na presença de incerteza (MEIRA et al., 2015).

Além disso também foi submetidos, aprovado e apresentado um trabalho no Congresso Brasileiro de Engenharia Química de 2016:

- Equações de estado e curvas características de compressores centrífugos: uma análise integrada considerando a incerteza de modelagem.

Também foi submetido um trabalho ao *Rio Oil & Gas Conference* de 2016, cujo resumo estendido foi aprovado:

- Estudo da relação entre a potência do compressor e sua posição em uma linha de CO₂

Apêndice B

Processos termodinâmicos

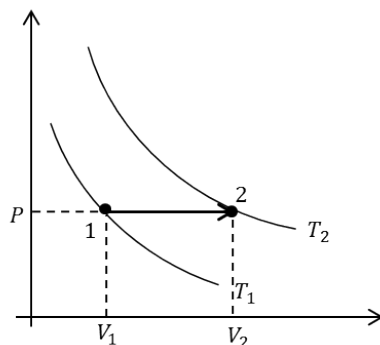
Este apêndice apresenta a formulação matemática dos principais processos termodinâmicos de interesse para o trabalho proposto, para uma dada equação de estado explícita em P , expressa como $P = \xi(T, V)$:

- Troca de calor isobárica: um sistema duas de equações algébricas não-lineares formada pelas Eq. B.1 e Eq. B.2. Em casos mais comuns, as condições de entrada de P , T e V , estado 1 da Figura B.1, bem como a variação de entalpia são conhecidas, sendo necessário calcular os valores de T e V na saída, estado 2 da Figura B.1.

$$\Delta h = h_2(T_2, V_2) - h_1(T_1, V_1) \quad (\text{B.1})$$

$$\xi(T_1, V_1) = \xi(T_2, V_2) \quad (\text{B.2})$$

Figura B.1: Ilustração da transição de um fluido no estado 1 para o estado 2 por processo isobárico



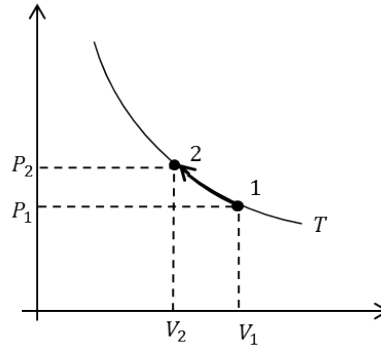
- Expansão ou compressão isotérmica: um sistema de duas equações algébricas não-lineares formada pelas Eq. B.3 e Eq. B.4. Em casos mais comuns, as condições de entrada de P , T e V , estado 1 da Figura B.2, bem como a variação de entalpia são conhecidas, sendo necessário calcular as condições de P e V na saída, estado 2

da Figura B.2.

$$\Delta h = h_2(T, V_2) - h_1(T, V_1) \quad (\text{B.3})$$

$$P_2 = \xi(T, V_2) \quad (\text{B.4})$$

Figura B.2: Ilustração da transição de um fluido no estado 1 para o estado 2 por processo isotérmico



De modo que para o estado líquido Δh é expresso pela Eq. 2.10 e para o estado gasoso é dado pela Eq. 2.8.

- Expansão ou compressão adiabática isentrópica: um sistema de três equações algébricas não-lineares formada pelas Eq. B.5, Eq. B.6. e Eq. B.7. Em casos mais comuns, as condições de entrada de P , T e V , estado 1 da Figura B.3, bem como a variação de entalpia são conhecida, sendo necessário calcular as condições de P , T e V na saída, estado 2 da Figura B.3.

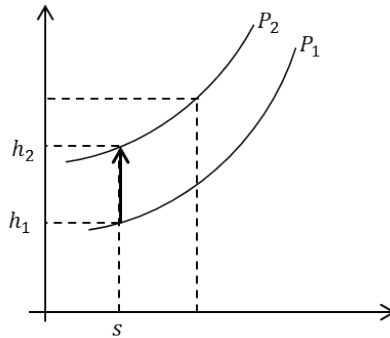
$$\Delta h = h_2 - h_1 \quad (\text{B.5})$$

$$\Delta s = s_2 - s_1 = 0 \quad (\text{B.6})$$

$$P_2 = \xi(T_2, V_2) \quad (\text{B.7})$$

- Vaporização ou condensação de substâncias puras: descrita por uma equação algébrica não-linear expressa pela relação de Clausius–Clapeyron Eq. B.8 (SMITH; Van Ness; ABBOTT, 2005). Normalmente se conhece as a temperatura e pressão,

Figura B.3: Ilustração da transição de um fluido no estado 1 para o estado 2 por processo adiabático reversível



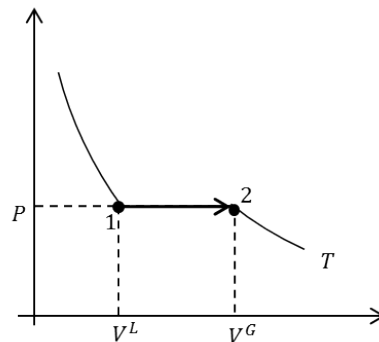
e deseja-se calcular a entalpia de vaporização.

$$\Delta h_{vap} = (V^G - V^L)T \frac{dP^{vap}}{dT} \quad (\text{B.8})$$

onde os valores de V^G e V^L para uma equação de estado cúbica, são as raízes reais maior e menor respectivamente para um dado P e T . E a função $P^{vap}(T)$ pode ser calculada por uma equação de Antoine (POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2001), como exemplificado na Eq. B.9.

$$\ln(P^{vap}) = A + \frac{B}{T + C} \quad (\text{B.9})$$

Figura B.4: Ilustração da transição de um fluido no estado 1 para o estado 2 por processo de mudança de fase



Apêndice C

Escolha da equação de estado para o gás natural

Antes das simulações envolvendo gás natural, foi realizado uma pesquisa visando para determinar qual equação de estado descreve melhor o comportamento do gás. As equações de estado implementadas foram: Peng-Robinson (PR), Benedict-Webb-Rubin (BWR) e Soave-Redlich-Kwong (SRK). Com esta finalidade foram realizadas simulações do cálculo da densidade e da velocidade do som no gás para várias condições de temperatura e pressão e comparadas com dados experimentais da literatura, na faixa de temperatura e pressão empregadas neste trabalho.

Os dados experimentais considerados são os apresentados em (GOMES; TRUSLER, 1998) para a densidade e (HWANG, 1997) para a velocidade do som. Além disso foram calculadas, para a densidade e a velocidade do som, a incerteza pelo métodos de Monte Carlo. Para isto foi determinada que a temperatura e pressão seguissem uma distribuição normal com incerteza de 2 % e 0,2 % respectivamente.

As Tabelas C.1 e C.2 apresentam os desvios relativos e desvios padrões relativos para as simulações de densidade e velocidade do som respectivamente. Os resultados mostraram que, para a predição da densidade e da velocidade do som, a equação PR tem uma precisão inferior comparadas a outras duas equações de estado, e isto também ficou evidente na incerteza destas mesmas propriedades. Comparando a equação BWR e a equação SRK, nota-se que as duas equações conseguem descrever bem as propriedades do gás natural, e possuem uma incerteza similar. No entanto, em virtude de uma melhor previsão da densidade e em algumas condições da velocidade sônica, a equação da BWR foi utilizada nas simulações.

Tabela C.1: Desvio relativo e desvio-padrão relativo obtidos pelas equações de estado para massa específica

T/K	P / kPa	Desvio % BWR	Desvio- padrão % BWR	Desvio % PR	Desvio- padrão % PR	Desvio % SRK	Desvio- padrão % SRK
300	8569,38	0,355	0,0390	2,268	0,0396	1,256	0,0386
	5866,17	0,292	0,0356	1,972	0,0364	0,629	0,0356
	3984,25	0,210	0,0330	1,517	0,0337	0,323	0,0331
	2684,53	0,170	0,0314	1,121	0,0319	0,148	0,0315
325	8812,29	0,368	0,0361	2,010	0,0367	1,251	0,0358
	5960,89	0,308	0,0335	1,680	0,0342	0,696	0,0334
	4013,53	0,257	0,0319	1,304	0,0325	0,368	0,0320
	2688,36	0,236	0,0309	0,990	0,0314	0,158	0,0310

Tabela C.2: Desvio relativo e desvio-padrão relativo obtidos pelas equações de estado para velocidade do som

T / K	P / kPa	Desvio % BWR	Desvio- padrão % BWR	Desvio % PR	Desvio- padrão % PR	Desvio % SRK	Desvio- padrão % SRK
300	10046	0,934	0,0058	4,092	0,0071	1,429	0,0029
	7574,8	0,901	0,0045	3,012	0,0060	0,903	0,0015
	5014,4	4,316	0,0025	6,172	0,0034	3,405	0,0003
	2624,5	5,108	0,0011	6,173	0,0015	4,738	0,0001
350	9995,7	4,984	0,0041	6,641	0,0049	2,710	0,0018
	7744,8	4,992	0,0031	6,222	0,0040	3,158	0,0011
	5034,3	7,008	0,0019	7,995	0,0025	5,856	0,0004
	2544,5	4,191	0,0008	4,621	0,0009	3,587	0,0003

Apêndice D

Derivada total da entalpia

Este Apêndice apresenta o cálculo das derivadas necessárias na Eq. 5.3 tanto para o estado líquido quanto para o estado gasoso. As equações foram deduzidas com base nos ciclos termodinâmicos (SMITH; Van Ness; ABBOTT, 2005).

D.1 Gás

Considerando como variáveis independentes a temperatura, T e o volume molar, V a derivada total da entalpia dada pela Eq. D.1.

$$dh = \left(\frac{\partial h}{\partial V} \right)_T dV + \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_V dT \quad (\text{D.1})$$

A entalpia pode ser calculada para uma condição de temperatura e pressão pela Eq. D.2.

$$h = h_0 + \int C_P^{IG} dT + h^R - h_o^R \quad (\text{D.2})$$

onde h_0 é a entalpia no estado de referência a uma dada condição T_0 e P_0 , C_P^{IG} é a capacidade calorífica a pressão constante para um gás ideal, h^R é a entalpia residual para T e V dada pelos Quadros A.1 e B.1. E h_o^R é a entalpia residual para as condição T_0 e P_0 .

Dessa forma a derivada parcial da entalpia com relação à temperatura e ao volume pode ser dada pelas Eq. D.3 e Eq. D.4.

$$\left(\frac{\partial h}{\partial V} \right)_T = \frac{\partial h^R}{\partial V} \quad (\text{D.3})$$

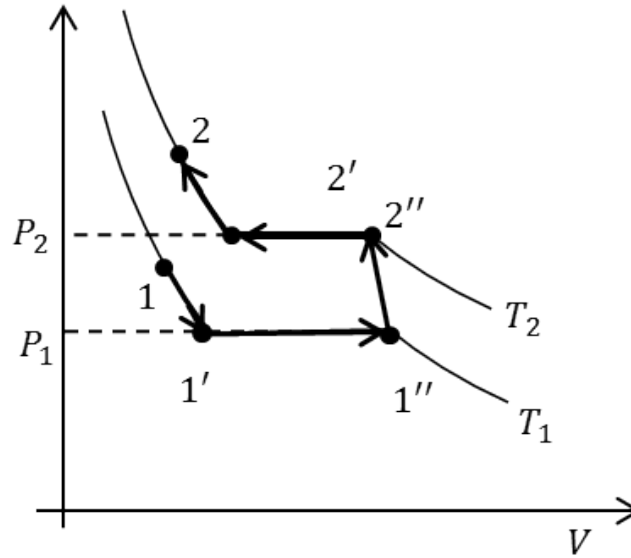
$$\left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_V = C_P^{IG} + \frac{\partial h^R}{\partial T} \quad (D.4)$$

sendo que a derivada da entalpia residual pode ser encontrada nos Quadros A.1 e B.1.

D.2 Líquido

Para o caso especial de sistemas puros no estado líquido, uma modificação adicional deve ser apresentada, pois a propriedade residual não o atinge. Neste caso as etapas para o seu cálculos são expressas pela Eq. D.5, conforme a Figura D.1, que conta com processos isotérmicos no estado líquido, mudança de fase e aquecimento no estado gasoso.

Figura D.1: Processo de variação de entalpia para o estado líquido.



$$\Delta h = (h_2 - h_{2,liq}) + (h_{2,liq} - h_{2,vap}) + (h_{2,vap} - h_{1,vap}) + (h_{1,vap} - h_{1,liq}) + (h_{1,liq} - h_1) \quad (D.5)$$

onde cada etapa deste processo é calculado de acordo com Eq. D.6 à Eq. D.10

$$(h_2 - h_{2,liq}) = (P_2 V_2 - P_2^{vap} V_{2,liq}) + \int_{V_2}^{V_{2,liq}} \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] dV \quad (D.6)$$

$$(h_{2,vap} - h_{2,liq}) = \Delta h_2^{vap} = (V_{2,liq} - V_{2,vap}) T \frac{dP^{vap}}{dT} \quad (D.7)$$

$$(h_{2,vap} - h_{1,vap}) = \int_{T_1}^{T_2} C_P^{IG} dT + h_2^R - h_1^R \quad (D.8)$$

$$(h_{1,liq} - h_{1,vap}) = -\Delta h_1^{vap} = (V_{1,vap} - V_{1,liq})T \frac{dP^{vap}}{dT} \quad (D.9)$$

$$(h_{1,liq} - h_1) = (P_1 V_{1,liq} - P_1^{vap} V_1) + \int_{V_{1,liq}}^{V_1} \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] dV \quad (D.10)$$

onde o volume do líquido saturado, V_{liq} , a pressão de saturação, P^{vap} , e o volume do vapor saturado, V_{vap} , são funções da temperatura. Note que apenas a equação D.6 é função direta do volume molar final, V_2 .

Dessa forma, como a derivada é efetuada sobre as variáveis de saída, temperatura, T e volume molar, V , o cálculo das derivadas parciais da entalpia com relação a temperatura e volume molar podem ser dadas pelas Eq. D.11 e Eq. D.12

$$\left(\frac{\partial h}{\partial V} \right)_T = V \frac{\partial P}{\partial V} + T \frac{\partial P}{\partial T} \quad (D.11)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_V &= \frac{\partial}{\partial T} (PV - P^{vap} V_{liq}) + \frac{\partial}{\partial T} \left[\int_{V_{liq}}^V \left[T \frac{\partial P}{\partial T} - P \right] dV \right] + \\ &+ \frac{\partial(\Delta h_2^{vap})}{\partial T} + C_P^{IG} + \frac{\partial h^R}{\partial T}(T, V_{vap}) \end{aligned} \quad (D.12)$$

onde cada parcela da Eq. D.12 é calculada pelas Eq. D.13 à Eq. D.16.

$$\frac{\partial}{\partial T} (PV - P^{vap} V_{liq}) = V \frac{\partial P}{\partial T} - V_{liq} \frac{\partial P^{vap}}{\partial T} - P^{vap} \frac{\partial V_{liq}}{\partial T} \quad (D.13)$$

$$\frac{\partial(\Delta h_2^{vap})}{\partial T} = \left(\frac{\partial V_{liq}}{\partial T} - \frac{\partial V_{vap}}{\partial T} \right) T \frac{\partial P^{vap}}{\partial T} + (V_{2,liq} - V_{2,vap}) \left[\frac{\partial P^{vap}}{\partial T} + T \frac{\partial^2 P^{vap}}{\partial T^2} \right] \quad (D.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} \left[\int_V^{V_{liq}} \left[T \frac{\partial P}{\partial T} - P \right] dV \right] = Y(T, V, V_{liq}) - \left[T \frac{\partial P}{\partial T}(T, V_{liq}) - P(T, V_{liq}) \right] \frac{\partial V_{liq}}{\partial T} \quad (D.15)$$

$$\frac{\partial h^R}{\partial T}(T, V_{vap}) = \frac{\partial h^R}{\partial T}(T, V_{vap}) + \frac{\partial V_{vap}}{\partial T} \frac{\partial h^R}{\partial V}(T, V_{vap}) \quad (D.16)$$

onde, as derivadas da pressão e da entalpia residual com relação a temperatura e

volume estão apresentadas nos Quadros A.1 e B.1, e Y é dado pela Eq. D.17.

$$Y(T, V, V_{liq}) = \frac{\partial}{\partial T} \left[\int_{V_{liq}}^V \left[T \frac{\partial P}{\partial T} - P \right] dV \right]_{V, V_{liq}} \quad (D.17)$$

As derivadas dos volumes de líquido e vapor saturado são dados pelas Eq. D.19 à Eq. D.18.

$$\frac{\partial V_{liq}}{\partial T} = \left(-\frac{\partial P}{\partial T}(T, V_{liq}) + \frac{\partial P^{vap}}{\partial T} \right) \left(\frac{\partial P}{\partial V}(T, V_{liq}) \right)^{-1} \quad (D.18)$$

$$\frac{\partial V_{vap}}{\partial T} = \left(-\frac{\partial P}{\partial T}(T, V_{vap}) + \frac{\partial P^{vap}}{\partial T} \right) \left(\frac{\partial P}{\partial V}(T, V_{vap}) \right)^{-1} \quad (D.19)$$

onde as derivadas da pressão de saturação, dada pela Eq. C.2, podem ser calculadas pelas Eq. D.20 e Eq. D.21.

$$\frac{\partial P^{vap}}{\partial T} = P^{vap}(T) \left[-\frac{B}{(T+C)^2} + \frac{D}{T} + E \cdot F \cdot T^{F-1} \right] \quad (D.20)$$

$$\frac{\partial^2 P^{vap}}{\partial T^2} = \frac{1}{P^{vap}} \left(\frac{\partial P^{vap}}{\partial T} \right)^2 + P^{vap} \left[\frac{2B}{(T+C)^3} - \frac{D}{T^2} + EF(F-1) \cdot T^{F-2} \right] \quad (D.21)$$

Para a equação de estado de Peng-Robinson, na qual estas equações foram aplicadas, o valor de Y pode ser dado pela Eq. D.22.

$$Y_{PR}(T, V, V_{liq}) = -\frac{1}{2\sqrt{2}b} \left(-T \frac{d^2 a}{dT^2} \right) \cdot \left[\ln \left(\frac{V + b(1 + \sqrt{2})}{V + b(1 - \sqrt{2})} \right) - \ln \left(\frac{V_{liq} + b(1 + \sqrt{2})}{V_{liq} + b(1 - \sqrt{2})} \right) \right] \quad (D.22)$$

É importante observar que se utilizando destas equações funcionais não são feitas aproximações algumas. Trata-se de um estudo detalhado da influência da temperatura e do volume molar ou da temperatura e da pressão nas propriedades a serem utilizadas nos problemas envolvidos nesta dissertação.

Apêndice E

Gráficos estatísticos da simulação de Monte Carlo para os compressores centrífugos

Este apêndice contém gráficos complementares a testes de normalidade para a simulação de Monte Carlo, regiões de abrangência e histogramas dos pontos de *surge* e *stonewall*.

E.1 Compressão de ar

E.1.1 Teste de normalidade para os pontos de *surge*

Figura E.1: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 20 000 rpm.

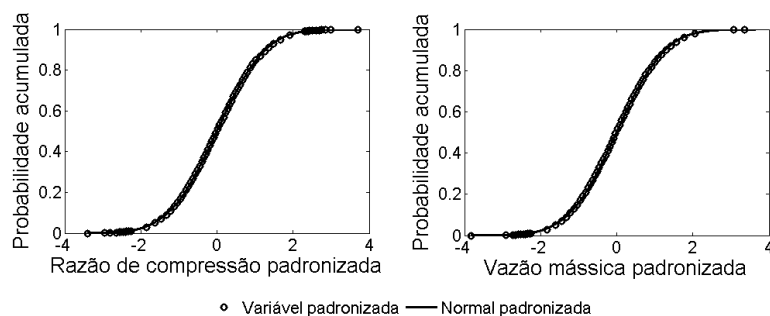


Figura E.2: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 25 000 rpm.

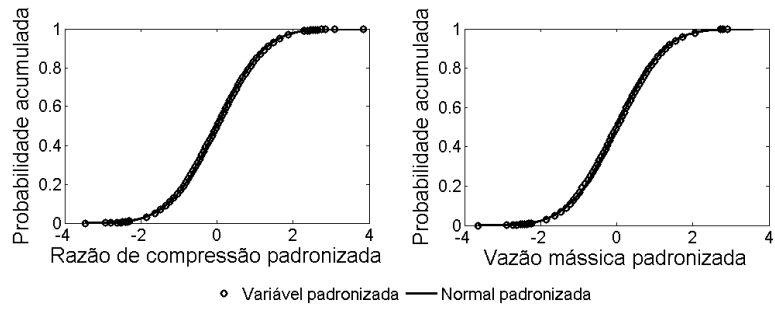


Figura E.3: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 30 000 rpm.

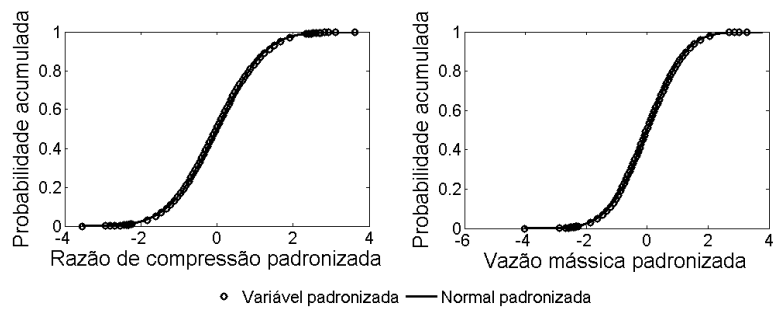


Figura E.4: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 35 000 rpm.

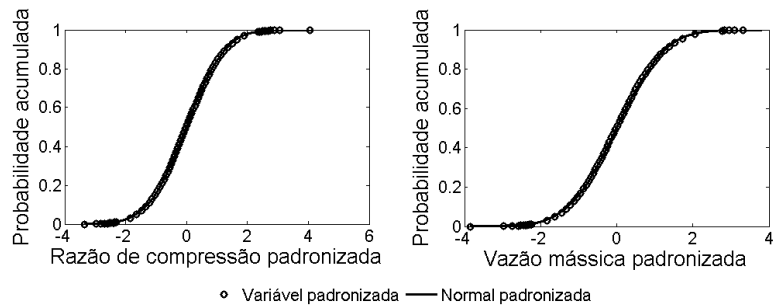


Figura E.5: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 40 000 rpm.

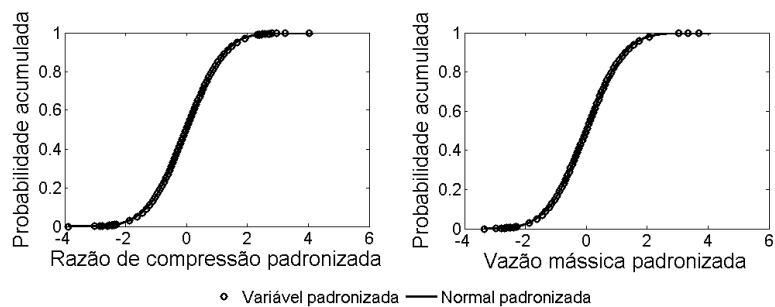


Figura E.6: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 45 000 rpm.

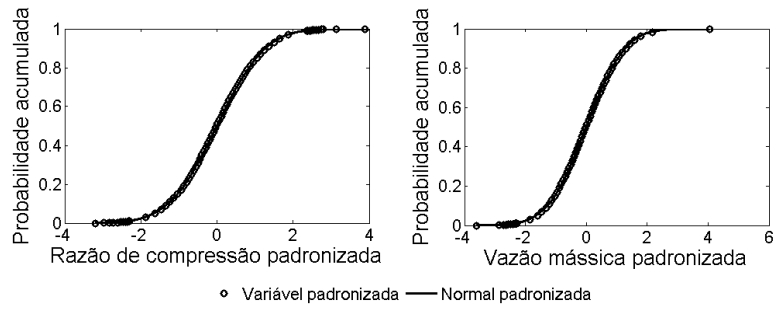
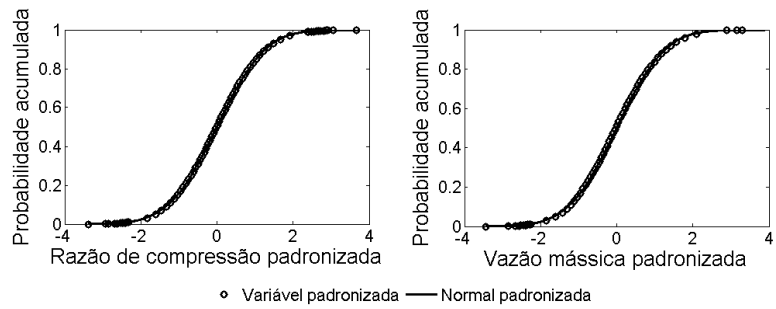


Figura E.7: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 50 000 rpm.



E.1.2 Teste de normalidade para os pontos de *stonewall*

Figura E.8: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 40 000 rpm.

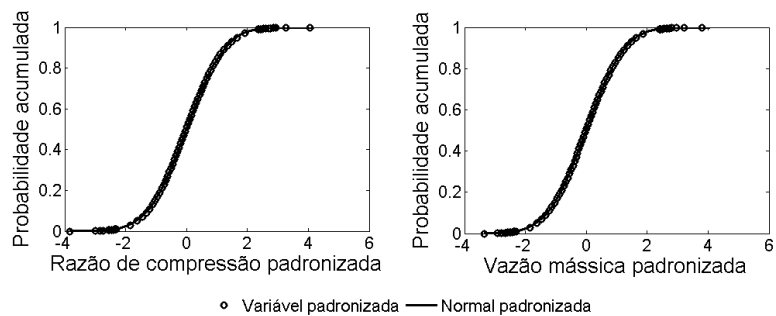


Figura E.9: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 45 000 rpm.

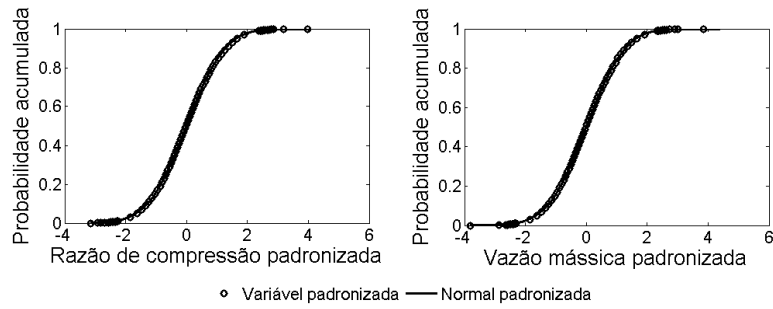
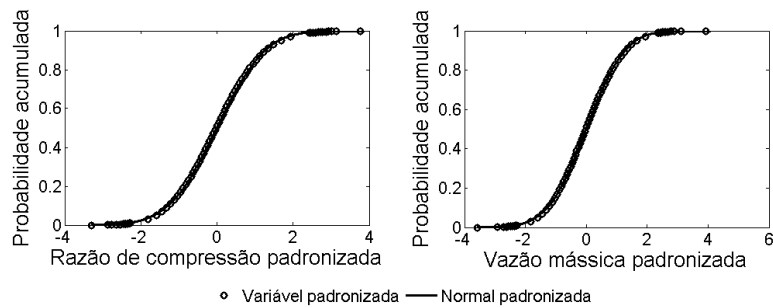


Figura E.10: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 50 000 rpm.



E.1.3 Regiões de abrangência dos pontos de *surge*

Figura E.11: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 20 000 rpm.

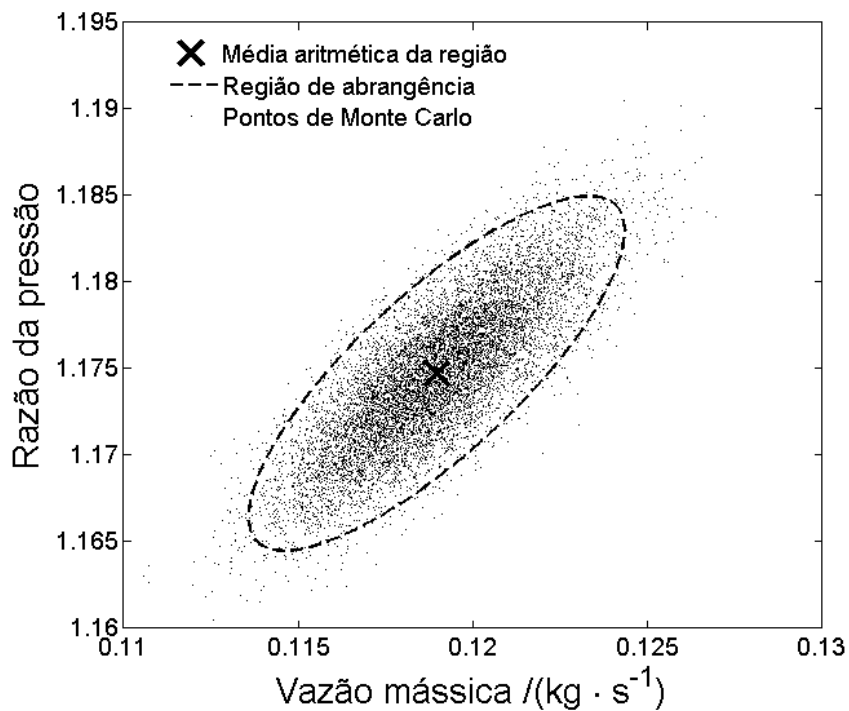


Figura E.12: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 25 000 rpm.

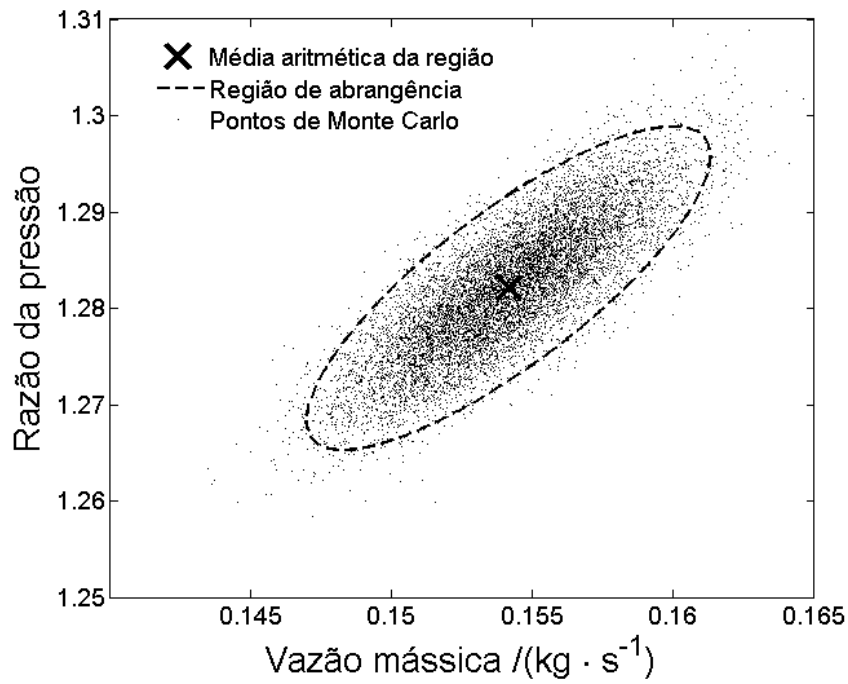


Figura E.13: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 30 000 rpm.

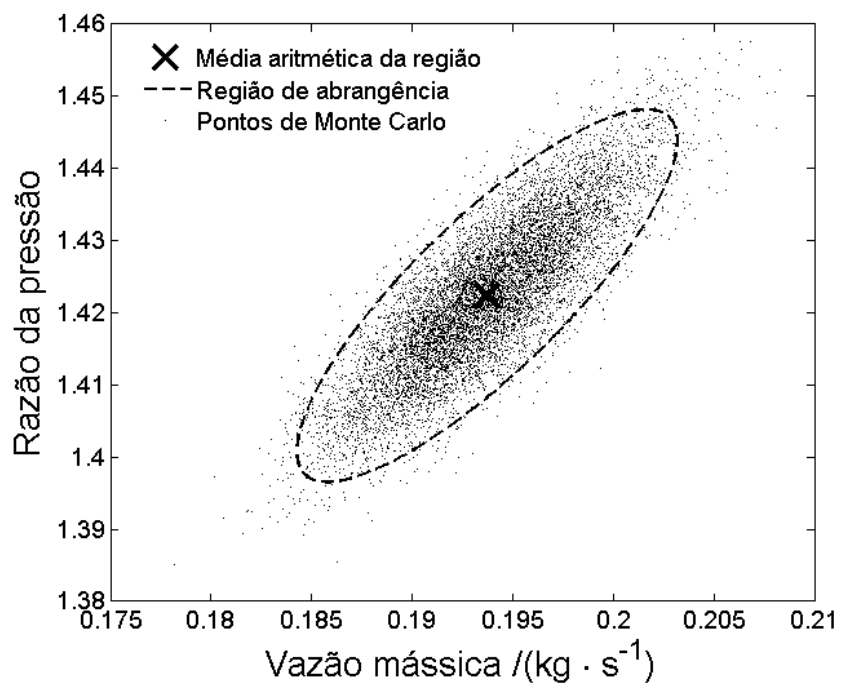


Figura E.14: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 35 000 rpm.

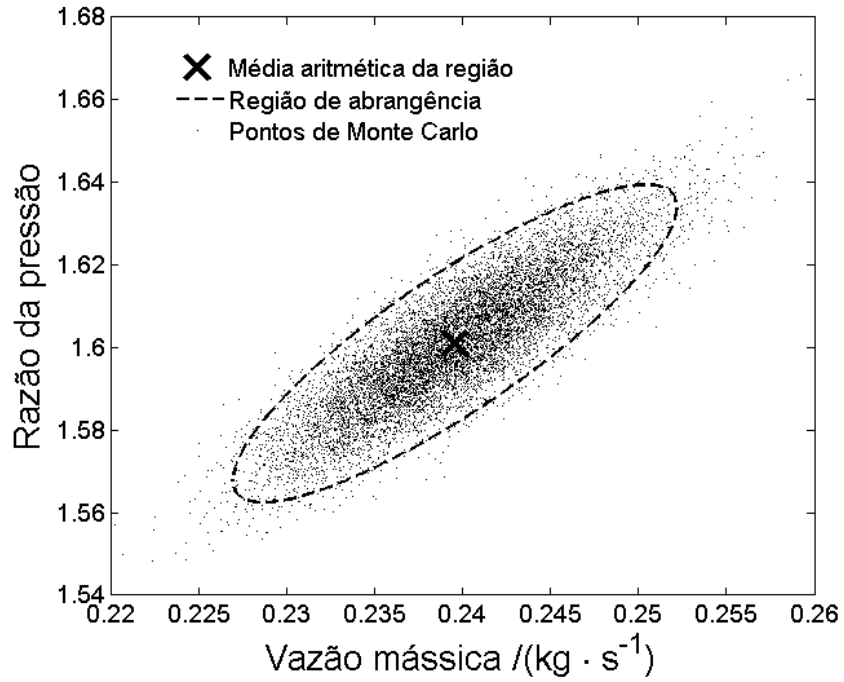


Figura E.15: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 40 000 rpm.

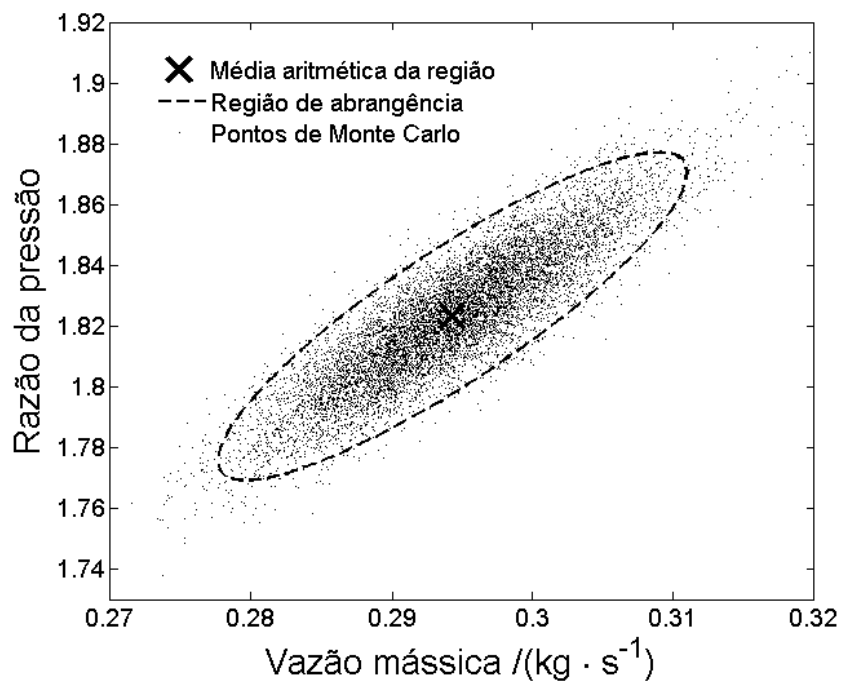


Figura E.16: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 45 000 rpm.

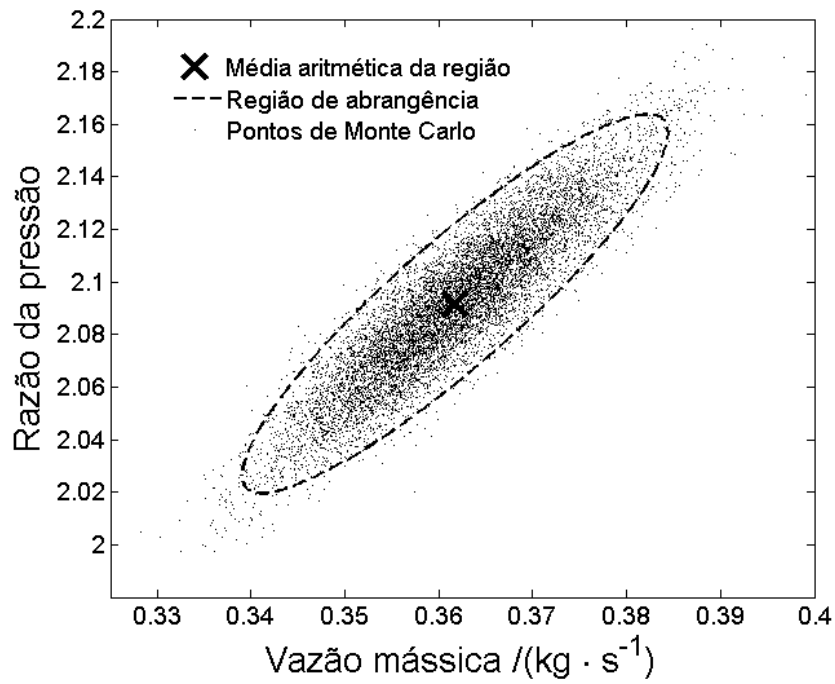
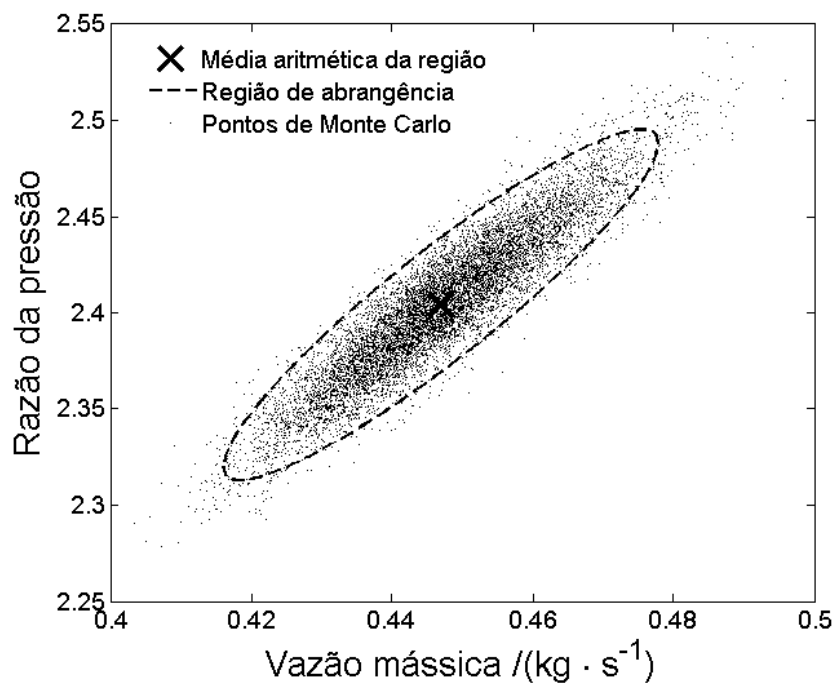


Figura E.17: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 50 000 rpm.



E.1.4 Regiões de abrangência dos pontos de *stonewall*

Figura E.18: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 40 000 rpm.

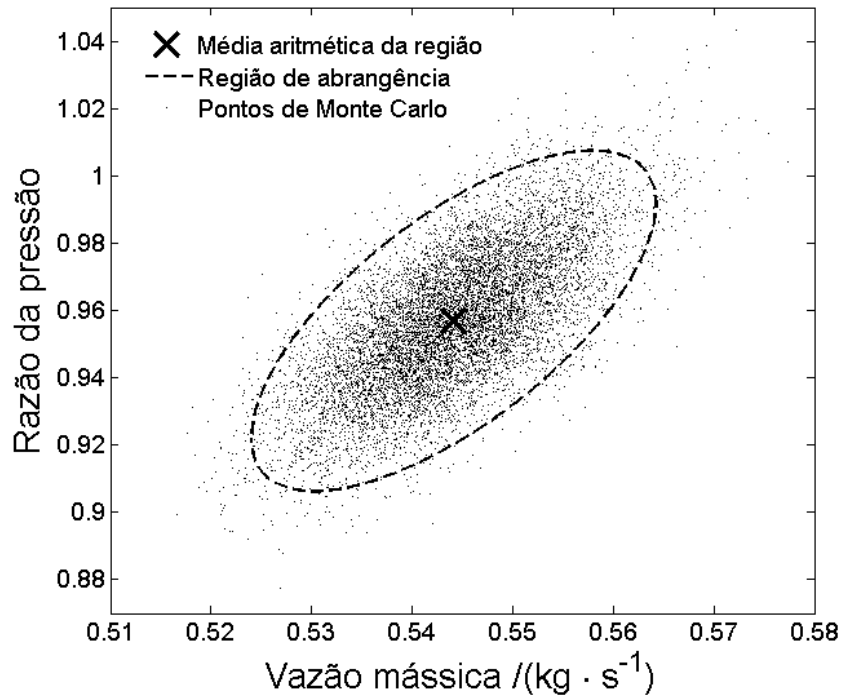


Figura E.19: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 45 000 rpm.

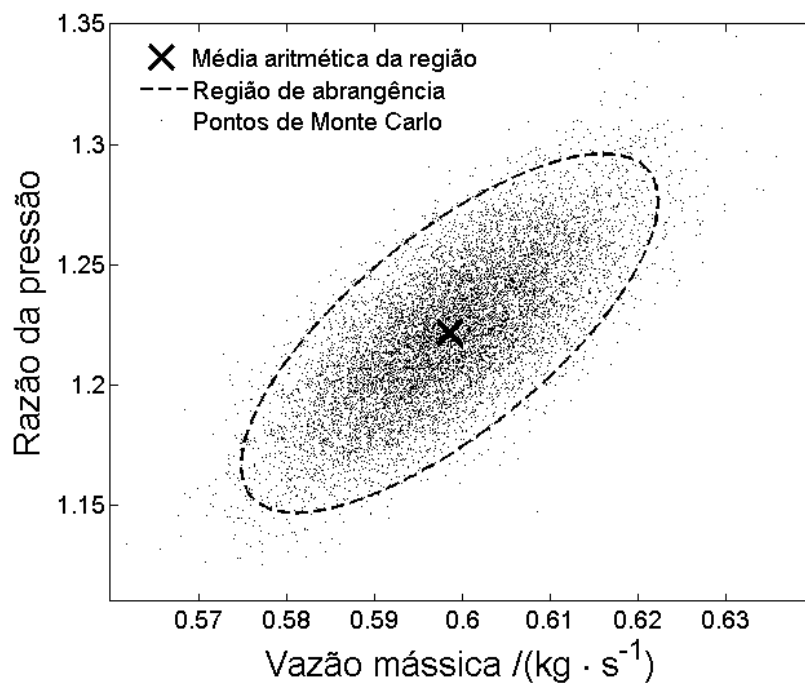
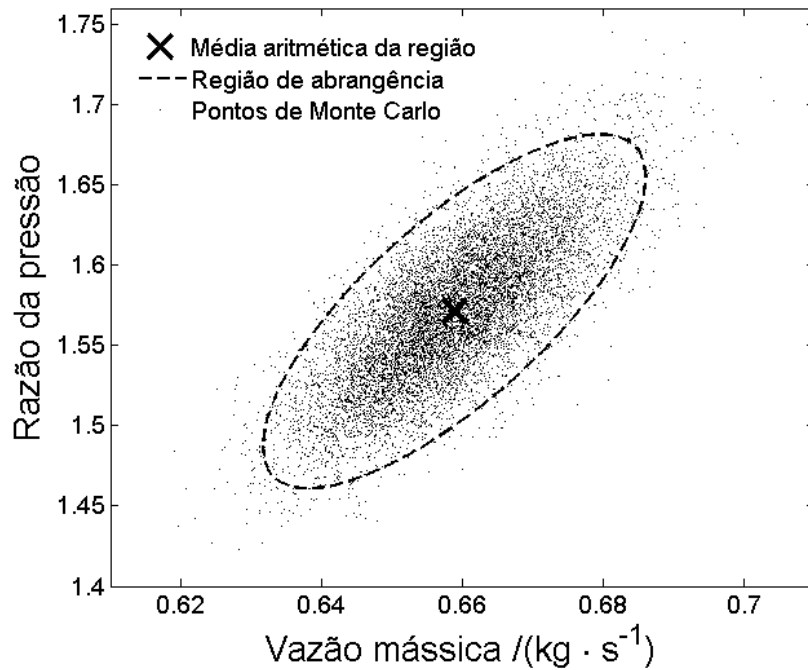


Figura E.20: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 50 000 rpm.



E.1.5 Histogramas dos pontos de *surge*

Figura E.21: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 20 000 rpm.

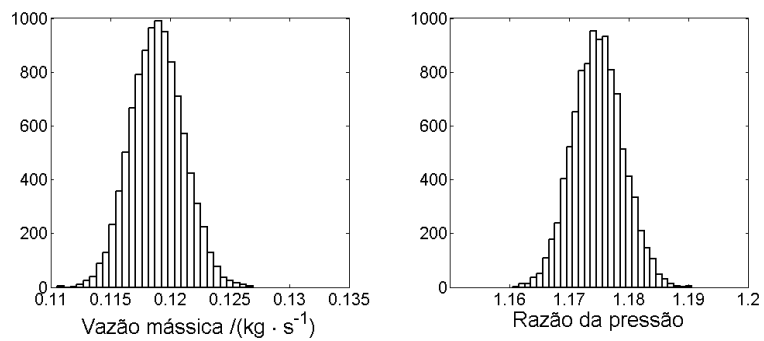


Figura E.22: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 25 000 rpm.

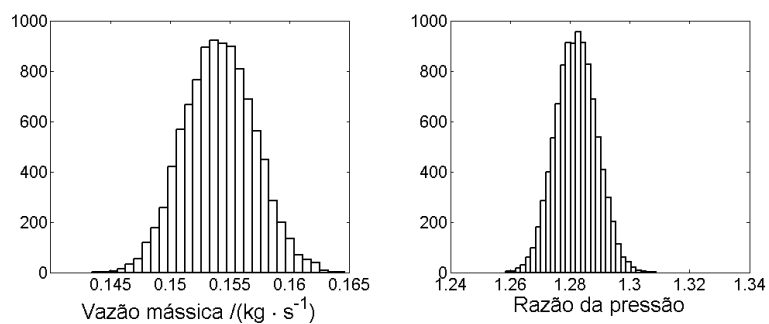


Figura E.23: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 30 000 rpm.

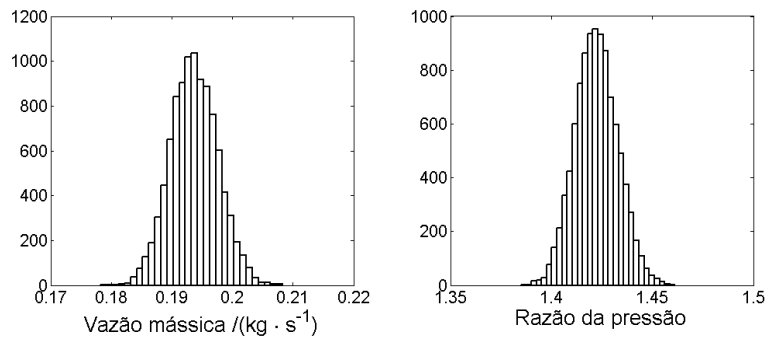


Figura E.24: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 35 000 rpm.

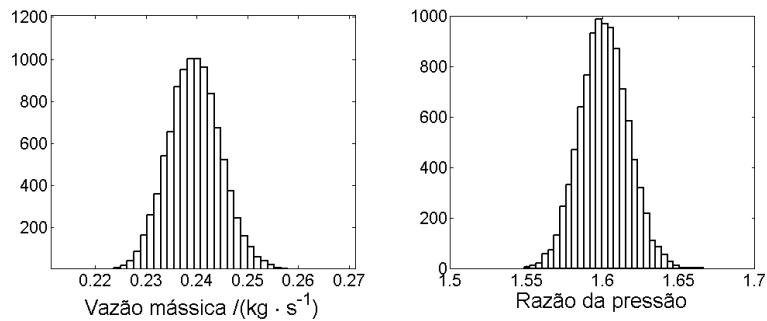


Figura E.25: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 40 000 rpm.

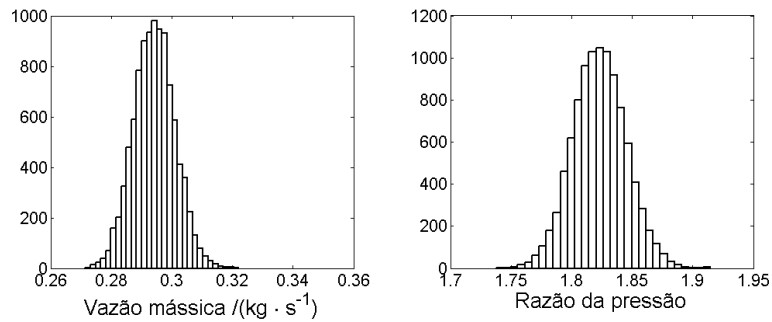


Figura E.26: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 45 000 rpm.

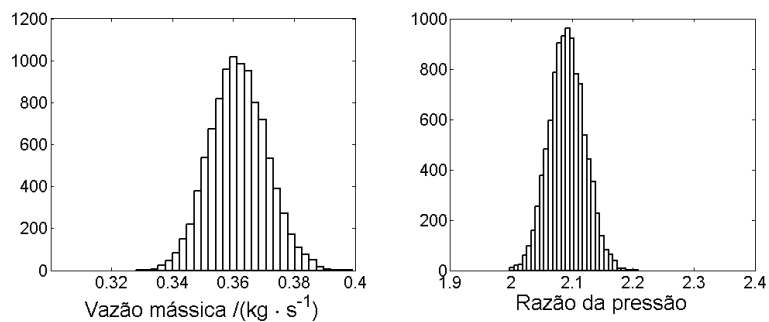
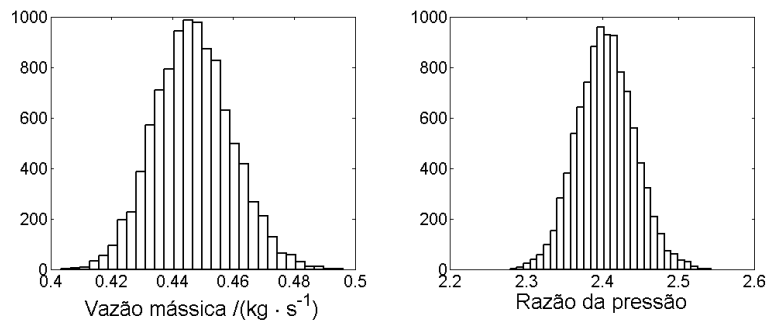


Figura E.27: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 50 000 rpm.



E.1.6 Histogramas dos pontos de *stonewall*

Figura E.28: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 40 000 rpm.

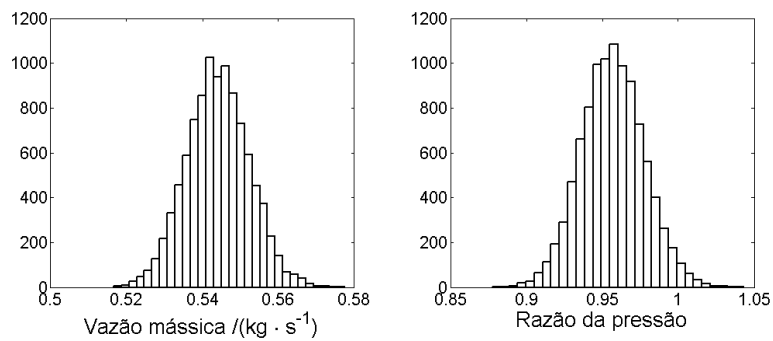


Figura E.29: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 45 000 rpm.

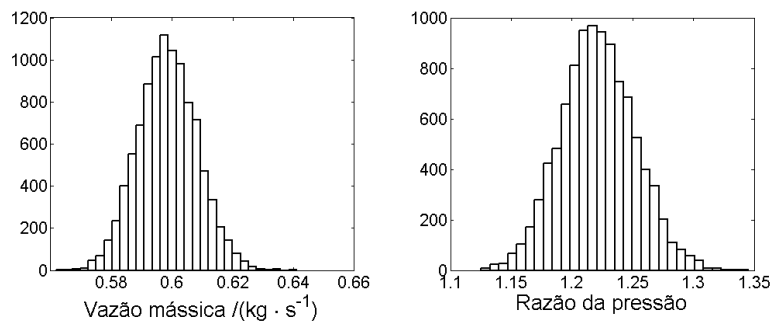
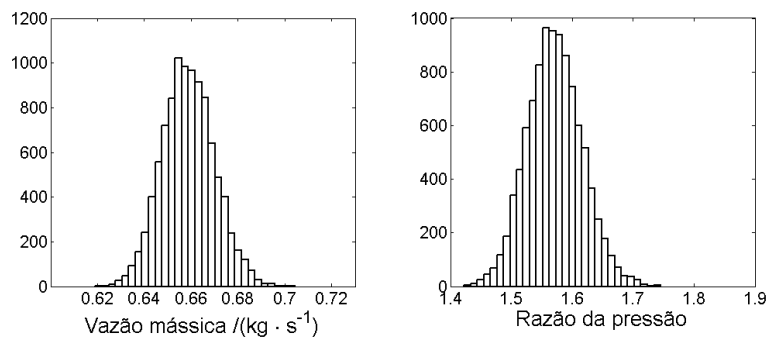


Figura E.30: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 50 000 rpm.



E.2 Compressão de gás natural

E.2.1 Histogramas dos pontos de *surge*

Figura E.31: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 20 000 rpm.

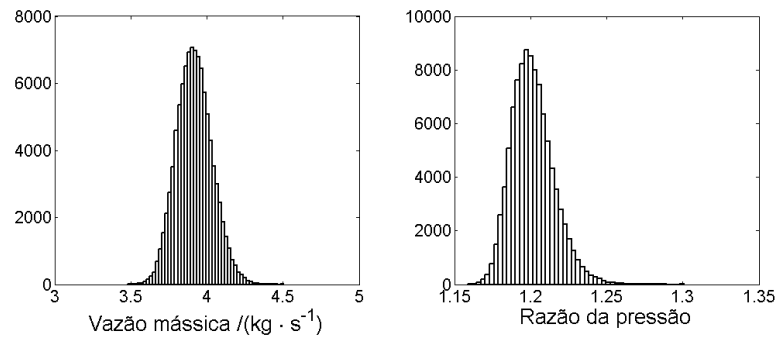


Figura E.32: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 25 000 rpm.

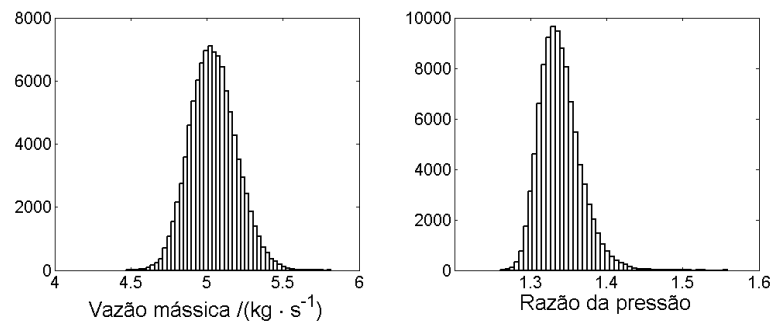
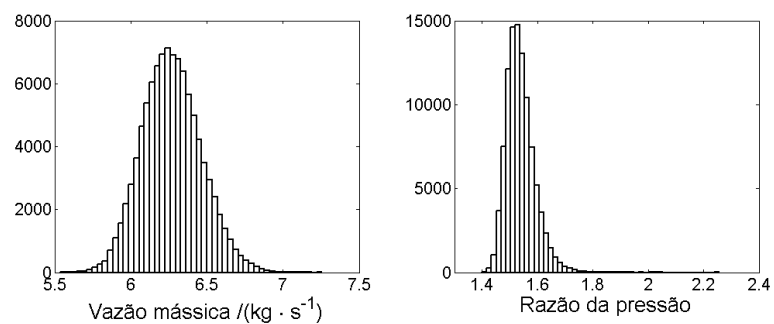


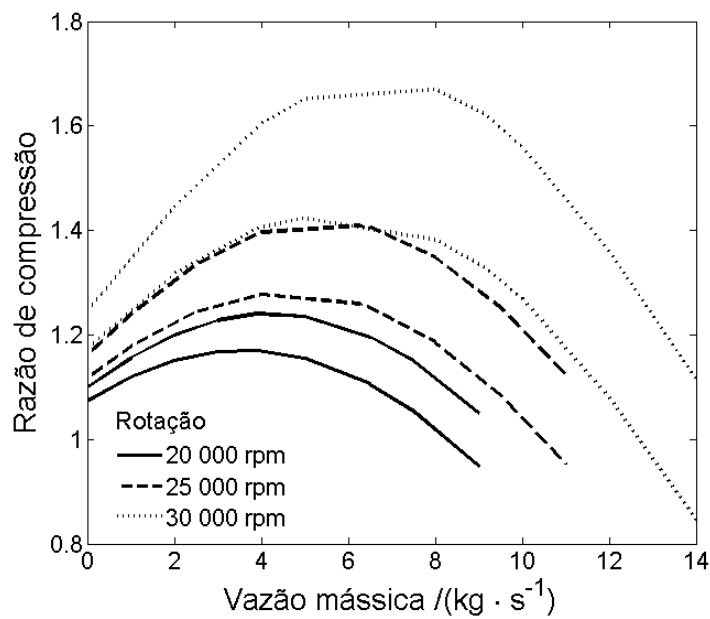
Figura E.33: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 30 000 rpm.



E.3 Compressão de gás de síntese

E.3.1 Avaliação da incerteza das curvas do compressor

Figura E.34: Região de abrangência das curvas características do compressor de gás natural.



E.3.2 Teste de normalidade para os pontos de *surge*

Figura E.35: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 30 000 rpm.

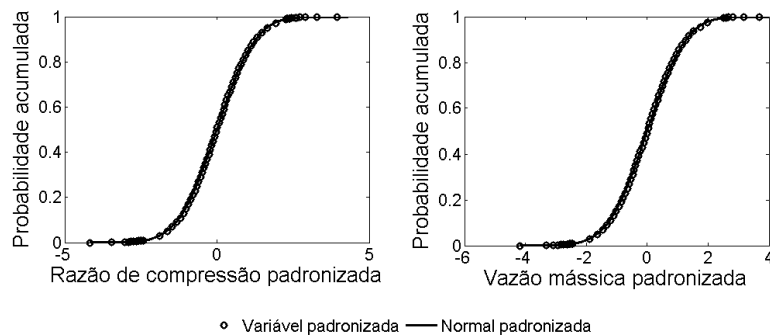


Figura E.36: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 40 000 rpm.

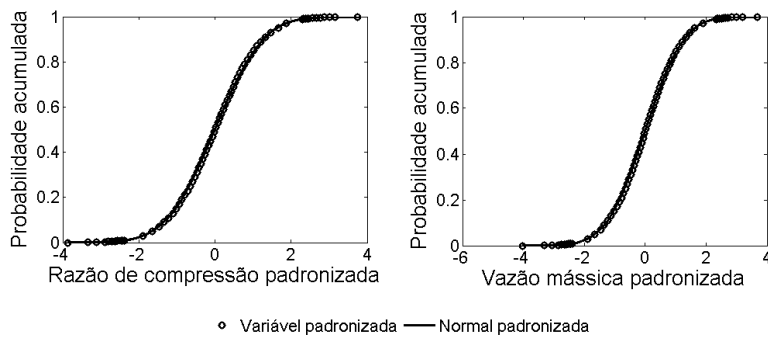


Figura E.37: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 50 000 rpm.

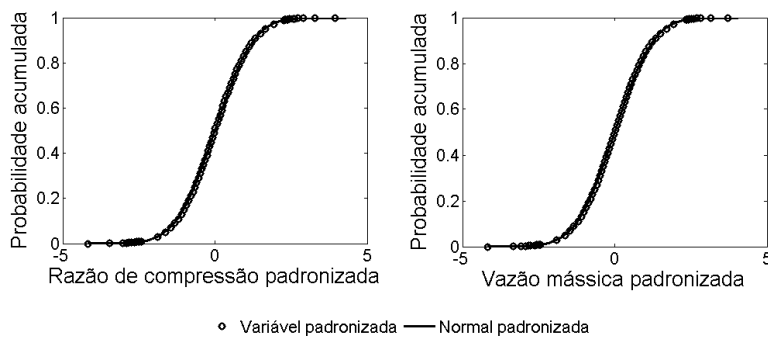


Figura E.38: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 60 000 rpm.

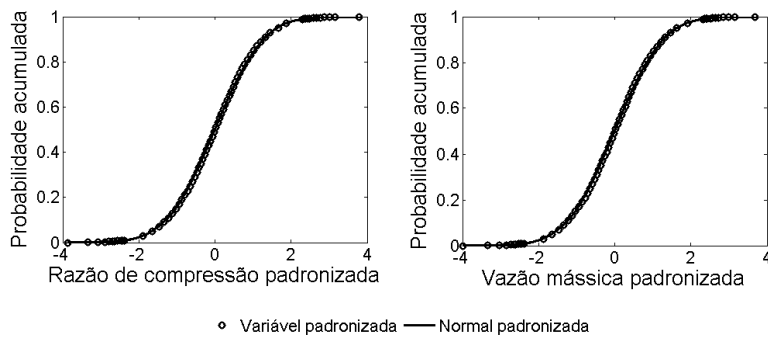
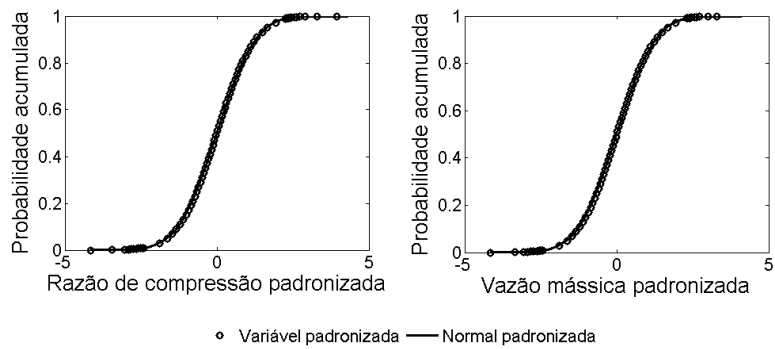


Figura E.39: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 70 000 rpm.



E.3.3 Teste de normalidade para os pontos de *stonewall*

Figura E.40: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 60 000 rpm.

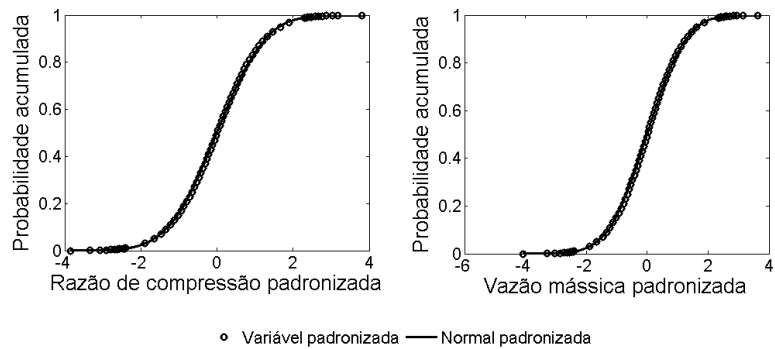
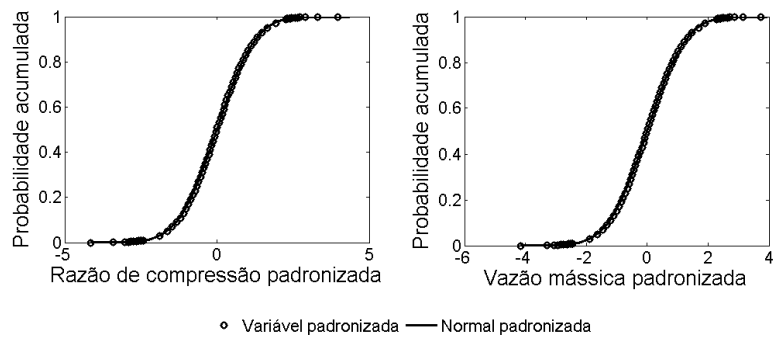


Figura E.41: *CDF* da normal padronizada e *CDF* dos dados normalizados para a rotação de 70 000 rpm.



E.3.4 Regiões de abrangência dos pontos de *surge*

Figura E.42: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 30 000 rpm.

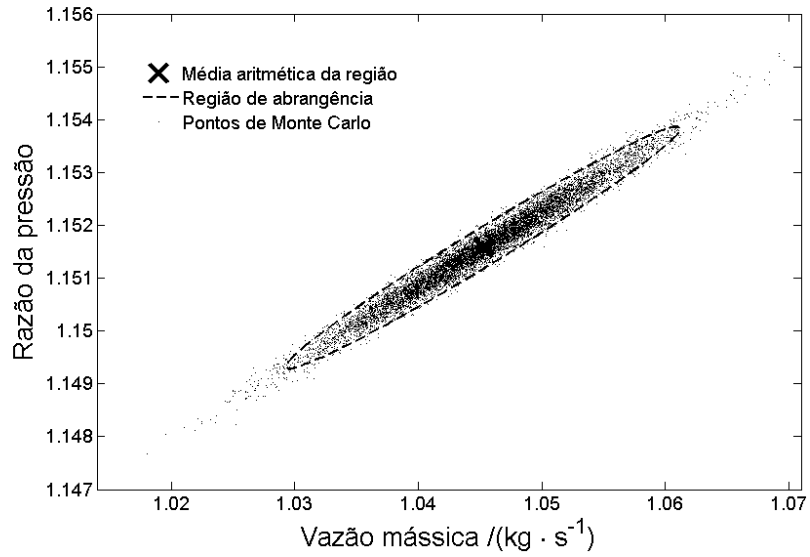


Figura E.43: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 40 000 rpm.

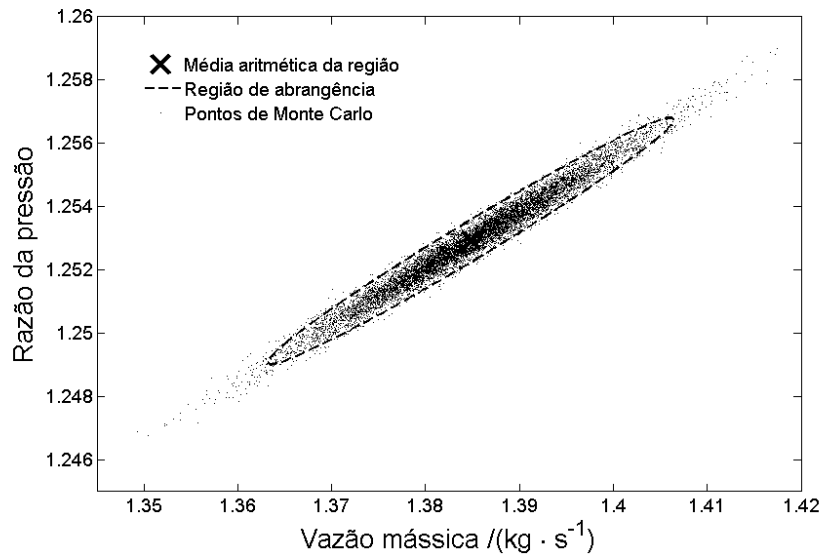


Figura E.44: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 50 000 rpm.

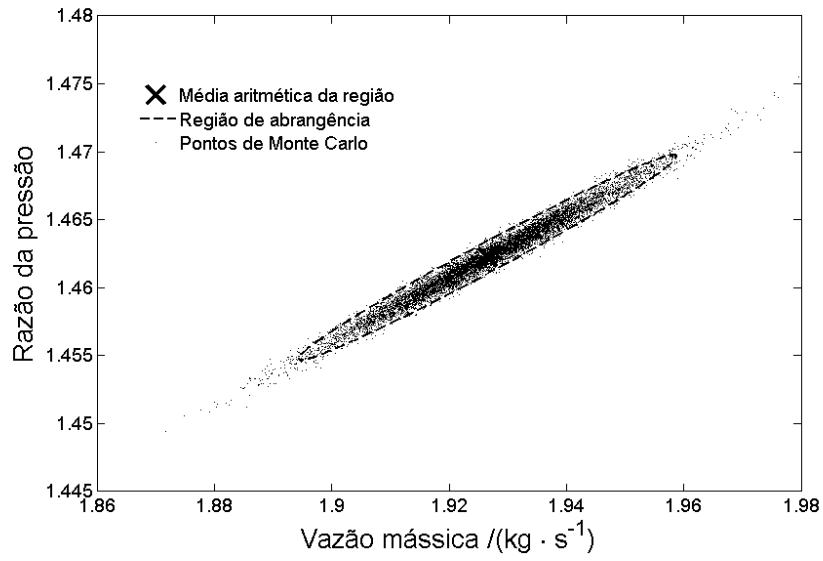


Figura E.45: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 60 000 rpm.

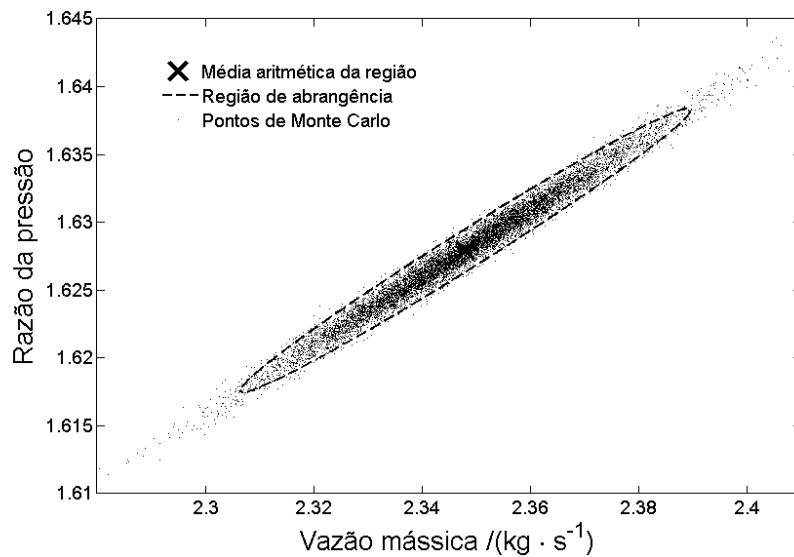
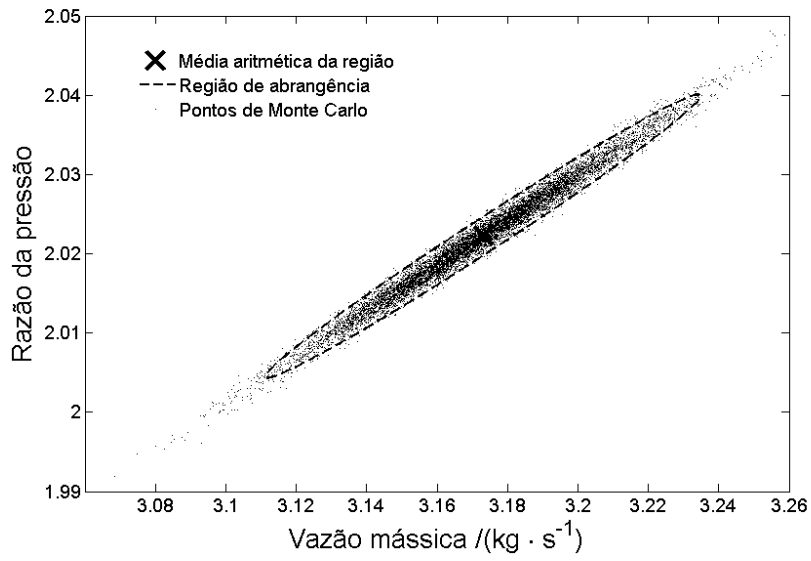


Figura E.46: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 70 000 rpm.



E.3.5 Regiões de abrangência dos pontos de *stonewall*

Figura E.47: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 60 000 rpm.

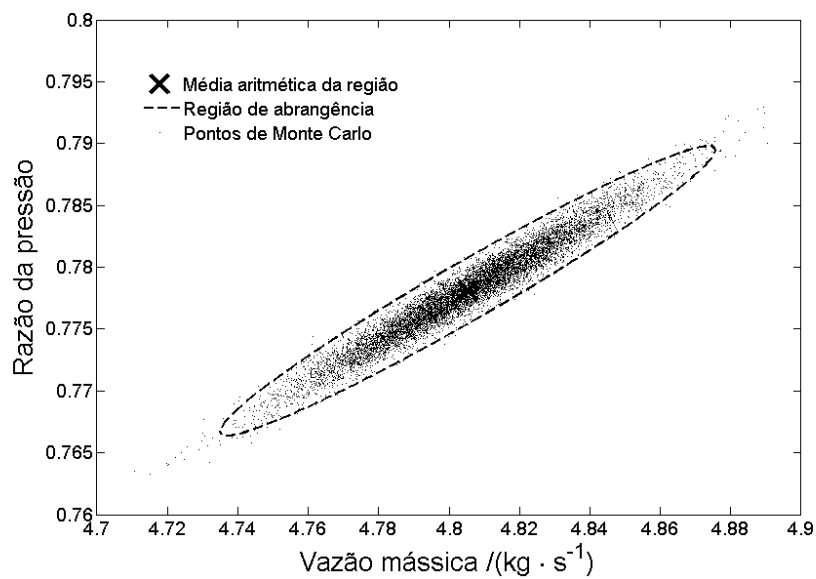
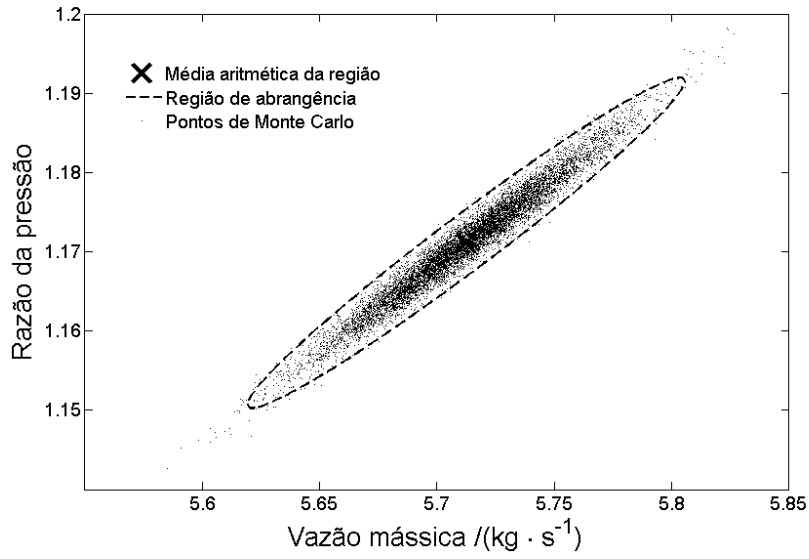


Figura E.48: Região de abrangência com probabilidade de 95 % para a rotação de 70 000 rpm.



E.3.6 Histogramas dos pontos de *surge*

Figura E.49: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 30 000 rpm.

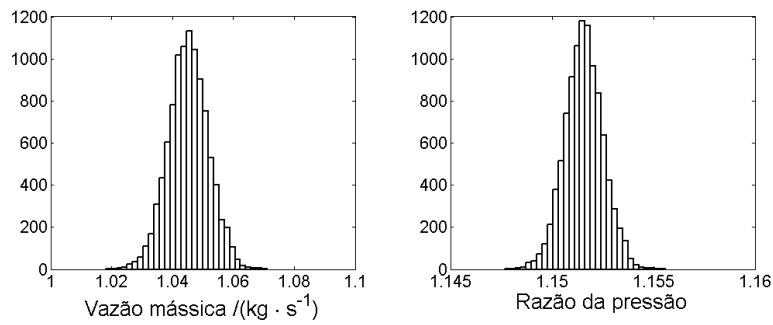


Figura E.50: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 40 000 rpm.

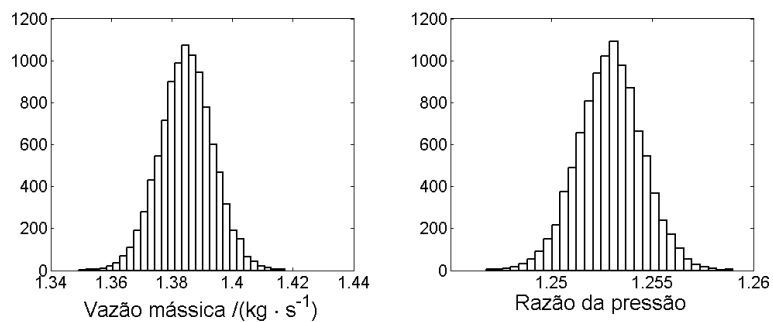


Figura E.51: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 50 000 rpm.

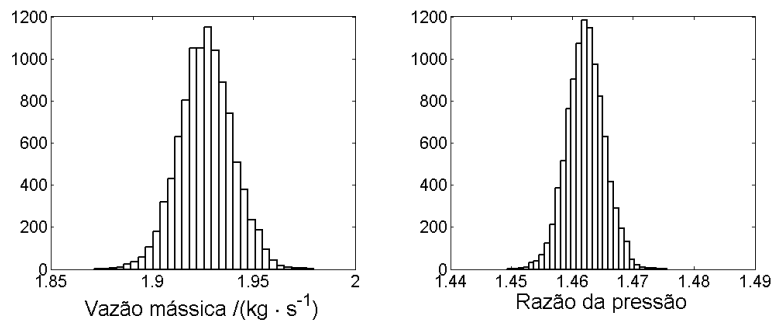


Figura E.52: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 60 000 rpm.

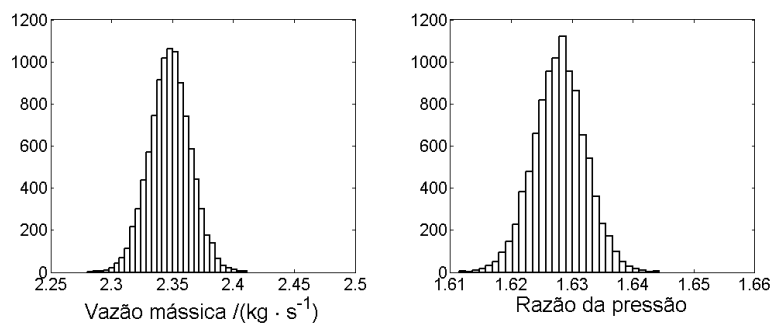
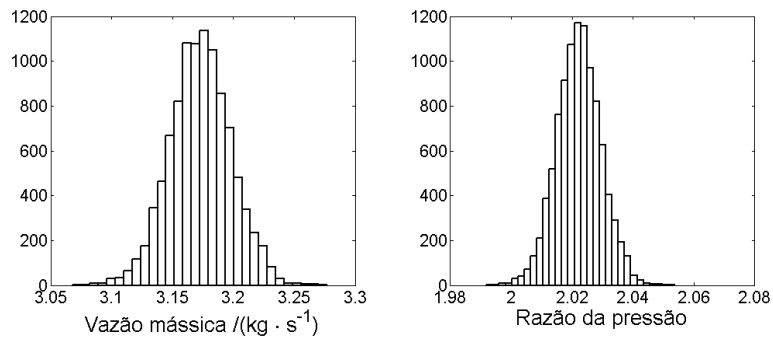


Figura E.53: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 70 000 rpm.



E.3.7 Histogramas dos pontos de *stonewall*

Figura E.54: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 60 000 rpm.

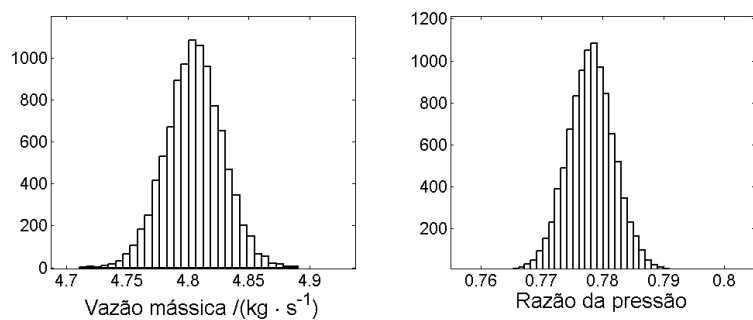
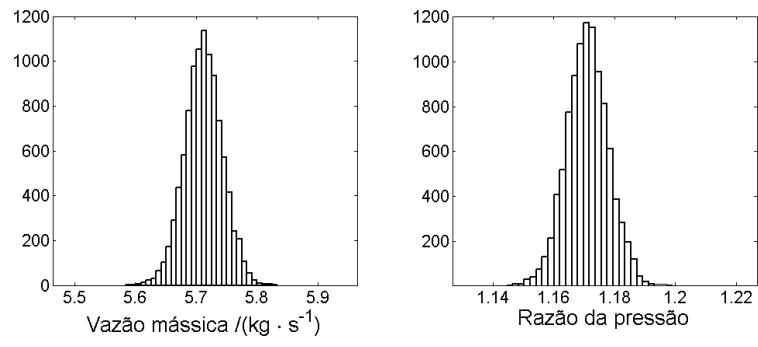


Figura E.55: Histogramas da razão de pressão e da vazão mássica para a rotação de 70 000 rpm.



Anexo A

Equações de estado cúbicas

A.1 Soave-Redlich-Kwong

A equação cúbica de Soave-Redlich-Kwong (SRK) é dada pela Eq. A.1 (SOAVE, 1972),

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a(T)}{V(V + b)} \quad (\text{A.1})$$

onde, P , T e V são os valores de pressão, temperatura e volume molar respectivamente, e os valores dos parâmetros de a e b para misturas são dadas pela regra de mistura de van-der-Waals descritas pelas equações Eq. A.2 à Eq. A.9.

$$a = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j \sqrt{a_i a_j} (1 - m_{ij}) \quad (\text{A.2})$$

$$b = \sum_{i=1}^n x_i b_i \quad (\text{A.3})$$

onde os parâmetros a_i e b_i designam os parâmetros para componentes puros e os parâmetros m_{ij} representam a correção da média geométrica de interação binário.

$$b_i = 0,08664 \frac{RT_{C_i}}{P_{C_i}} \quad (\text{A.4})$$

$$a_i = a_{C_i} \cdot \alpha_i \quad (\text{A.5})$$

$$a_{C_i} = 0,42747 \frac{(RT_{C_i})^2}{P_{C_i}} \quad (\text{A.6})$$

$$\alpha_i = \left[1 + k_i \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_{C_i}}} \right) \right]^2 \quad (\text{A.7})$$

$$k_i = 0,48508 + 1,55171\omega_i - 0,15613\omega_i^2 \quad (\text{A.8})$$

onde T_{Ci} e P_{Ci} são a temperatura crítica e pressão crítica do componente i e ω_i é o fator acêntrico da molécula i .

No entanto, pelo fato da molécula do hidrogênio ser muito pequena, necessita de uma correção adicional detalhada por Graboski e Daubert (1979) em função da temperatura reduzida, $T_r = T/T_{CH_2}$, maior que 2,5, sendo T_{CH_2} a temperatura crítica do hidrogênio.

$$\alpha_{H_2} = 1.202 \times \exp(-0.30288 \times T_r) \quad (\text{A.9})$$

A.2 Peng-Robinson

Para a equação de estado de Peng-Robinson (PR), a pressão é dada por A.10 (PENG; ROBINSON, 1976),

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a(T)}{V(V + b) + b(V - b)} \quad (\text{A.10})$$

onde, P , T e V são os valores de pressão, temperatura e volume molar respectivamente, e os valores dos parâmetros de a e b para misturas são dadas pela regra de mistura de van-der-Walls descritas pelas equações Eq. A.11 à Eq. A.17.

$$a = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j \sqrt{a_i a_j} (1 - m_{ij}) \quad (\text{A.11})$$

$$b = \sum_{i=1}^n x_i b_i \quad (\text{A.12})$$

onde os parâmetros a_i e b_i designam os parâmetros para os componentes puros e os parâmetros m_{ij} representam a correção da média geométrica de iteração binária.

$$b_i = 0,07780 \frac{RT_{Ci}}{P_{Ci}} \quad (\text{A.13})$$

$$a_i = a_{Ci} \cdot \alpha_i \quad (\text{A.14})$$

$$a_{Ci} = 0,45724 \frac{(RT_{Ci})^2}{P_{Ci}} \quad (\text{A.15})$$

$$\alpha_i = \left[1 + k_i \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_{Ci}}} \right) \right]^2 \quad (\text{A.16})$$

$$k_i = 0,37464 + 1,54226\omega - 0,26992\omega^2 \quad (\text{A.17})$$

onde T_{Ci} e P_{Ci} são a temperatura crítica e pressão crítica do componente i e ω_i é o fator acêntrico da molécula i .

A.3 Propriedades termodinâmicas obtidas através de equação de estado

No Quadro A.1 se encontra as equações que descrevem as propriedades de uma gás para cada equação de estado, nas quais são utilizadas neste trabalho.

A derivada do parâmetro a da equação de estado para a regra de mistura de van-der-Walls é dada pelas equações representadas por Eq. A.18 à Eq. A.23.

$$\left(\frac{\partial a}{\partial T}\right)_x = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j \left(\sqrt{a_i} \frac{\partial(\sqrt{a_j})}{\partial T} + \sqrt{a_j} \frac{\partial(\sqrt{a_i})}{\partial T} \right) (1 - m_{ij}) \quad (\text{A.18})$$

$$\left(\frac{\partial^2 a}{\partial T^2}\right)_x = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j \left(\sqrt{a_i} \frac{\partial^2(\sqrt{a_j})}{\partial T^2} + 2 \frac{\partial(\sqrt{a_j})}{\partial T} \frac{\partial(\sqrt{a_i})}{\partial T} + \sqrt{a_j} \frac{\partial^2(\sqrt{a_i})}{\partial T^2} \right) (1 - m_{ij}) \quad (\text{A.19})$$

$$\frac{\partial(\sqrt{a_i})}{\partial T} = \sqrt{a_{Ci}} \left(-k_i \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{TT_{Ci}}} \right) \quad (\text{A.20})$$

$$\frac{\partial^2(\sqrt{a_i})}{\partial T^2} = \sqrt{a_{Ci}} \left(k_i \frac{1}{4} \sqrt{\frac{1}{T^3 T_{Ci}}} \right) \quad (\text{A.21})$$

No entanto para casos de mistura contendo hidrogênio para a equação de SRK, sendo T_r maior que 2,5, têm-se:

$$\frac{\partial(\sqrt{a_{H_2}})}{\partial T} = \sqrt{a_{CH_2}} \left(-0,166032 \frac{1}{T_{CH_2}} \exp(-0,15144Tr) \right) \quad (\text{A.22})$$

$$\frac{\partial^2(\sqrt{a_{H_2}})}{\partial T^2} = \sqrt{a_{CH_2}} \left(0,02514 \frac{1}{T_{CH_2}^2} \exp(-0,15144Tr) \right) \quad (\text{A.23})$$

As integrais da Eq. 4.24 para a equação de SRK é calculada conforme exibido

Quadro A.1: Quadro da propriedades dependentes das equações de estado

Propriedade	SRK	PR
$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V,x}$	$\frac{R}{V-b} - \left(\frac{\partial^2 a}{\partial T^2}\right)_x \frac{1}{V^2 + Vb}$	$\frac{R}{V-b} - \left(\frac{\partial^2 a}{\partial T^2}\right)_x \frac{1}{V^2 + 2Vb - b^2}$
$\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T,x}$	$-\frac{RT}{(V-b)^2} + a(T) \frac{2V+b}{(V^2+Vb)^2}$	$-\frac{RT}{(V-b)^2} + a(T) \frac{2(V+b)}{(V^2+2Vb-b^2)^2}$
h^R	$PV - RT - \frac{1}{b} \left[a(T) - T \left(\frac{\partial a}{\partial T}\right)_x \right] \cdot \ln \left(1 + \frac{b}{V}\right)$	$PV - RT - \frac{1}{2b\sqrt{2}} \left[a(T) - T \left(\frac{\partial a}{\partial T}\right)_x \right] \cdot \ln \left(\frac{V+b(1+\sqrt{2})}{V+b(1-\sqrt{2})}\right)$
s^R	$R \cdot \ln \left(\frac{P(V-b)}{RT}\right) - T \left(\frac{\partial^2 a}{\partial T^2}\right)_x \frac{1}{b} \cdot \ln \left(1 + \frac{b}{V}\right)$	$R \cdot \ln \left(\frac{P(V-b)}{RT}\right) - T \left(\frac{\partial^2 a}{\partial T^2}\right)_x \frac{1}{2b\sqrt{2}} \cdot \ln \left(\frac{V+b(1+\sqrt{2})}{V+b(1-\sqrt{2})}\right)$
C_V	$C_V^IG + T \left(\frac{\partial^2 a}{\partial T^2}\right)_x \frac{1}{b} \cdot \ln \left(1 + \frac{b}{V}\right)$	$C_V^IG + T \left(\frac{\partial^2 a}{\partial T^2}\right)_x \frac{1}{2b\sqrt{2}} \cdot \ln \left(\frac{V+b(1+\sqrt{2})}{V+b(1-\sqrt{2})}\right)$
$\left(\frac{\partial h^R}{\partial T}\right)_{V,x}$	$V \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V,x} - R + \left(\frac{\partial^2 a}{\partial T^2}\right)_x \frac{1}{b} \cdot \ln \left(1 + \frac{b}{V}\right)$	$V \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V,x} - R + \left(\frac{\partial^2 a}{\partial T^2}\right)_x \frac{1}{2\sqrt{2}b} \cdot \ln \left(\frac{V+b(1+\sqrt{2})}{V+b(1-\sqrt{2})}\right)$
$\left(\frac{\partial h^R}{\partial V}\right)_{T,x}$	$V \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T,x} + P + \left[a(T) - T \left(\frac{\partial a}{\partial T}\right)_x \right] \cdot \frac{1}{V(V+b)}$	$V \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T,x} + P + \left[a(T) - T \left(\frac{\partial a}{\partial T}\right)_x \right] \cdot \frac{1}{V^2 + 2Vb - b^2}$

abaixo:

$$\int_{V_1}^V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \frac{dV}{V} = \frac{RT}{b^2} \left[\left(\frac{b}{V-b} - \frac{b}{V_1-b} \right) + \ln \left(\frac{1-b/V}{1-b/V_1} \right) \right] + \quad (\text{A.24})$$

$$-\frac{a}{2b^3} \left[b^2 \left(\frac{1}{V^2} - \frac{1}{V_1^2} \right) + 2b \left(\frac{1}{V+b} - \frac{1}{V_1+b} \right) - \ln \left(\frac{1+b/V}{1+b/V_1} \right) \right]$$

$$\int_{T_1}^T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_T \frac{dT}{V} = \frac{P(T,V) - P(T_1,V)}{V} \quad (\text{A.25})$$

Como para a equação de PR não foi necessário esta abordagem, por esta razão não será detalhada a integral de dP/V .

Anexo B

Equações de estado

Benedict-Webb-Rubin

A equação de estado de Benedict-Webb-Rubin (BWR) é descrita pela Eq. B.1 (BENEDICT; WEBB; RUBIN, 1940),

$$P = \frac{RT}{V} + \frac{B_o RT - A_o - \frac{C_o}{T^2}}{V^2} + \frac{bRT - a}{V^3} + \frac{a\alpha}{V^6} + \frac{c}{V^3 T^2} \left(1 + \frac{\gamma}{V^2}\right) \exp\left(-\frac{\gamma}{V^2}\right) \quad (\text{B.1})$$

onde os parâmetros, A_o , B_o , C_o , a , b , c , α e γ desta equação são tabelados para cada gás, conforme mostrados na Tabela B.1 (REID; PRAUSNITZ; SHERWOOD, 1977)

B.1 Propriedades termodinâmicas obtidas através de equação de estado

No Quadro B.1 se encontram as equações que relacionam as propriedades de um gás aplicadas para a equação de estado BWR.

As regras de mistura da BWR são detalhadas pelas Eq. B.2 à Eq. B.17, (REID; PRAUSNITZ; SHERWOOD, 1977).

$$B_o = \sum \sum x_i x_j B_{o_{ij}} \quad (\text{B.2})$$

$$B_{o_{ij}} = \sqrt{B_{o_i} B_{o_j}} \quad (\text{B.3})$$

$$A_o = \sum \sum x_i x_j A_{o_{ij}} \quad (\text{B.4})$$

Tabela B.1: Parâmetros da BWR

Componente	a	A_o	b	B_o	c	C_o	α	γ
CH ₄	$4,940 \times 10^{-2}$	1,855	$3,380 \times 10^{-3}$	$4,260 \times 10^{-2}$	$2,525 \times 10^3$	$2,226 \times 10^4$	$1,244 \times 10^{-4}$	$6,000 \times 10^{-3}$
N ₂	$2,510 \times 10^{-2}$	1,054	$2,328 \times 10^{-3}$	$4,074 \times 10^{-2}$	$7,284 \times 10^2$	$8,059 \times 10^3$	$1,272 \times 10^{-4}$	$5,300 \times 10^{-3}$
CO ₂	$1,368 \times 10^{-1}$	2,737	$4,1239 \times 10^{-3}$	$4,991 \times 10^{-2}$	$1,492 \times 10^4$	$1,386 \times 10^5$	$8,470 \times 10^{-5}$	$5,394 \times 10^{-3}$
C ₂ H ₆	$3,452 \times 10^{-1}$	4,156	$1,112 \times 10^{-2}$	$6,277 \times 10^{-2}$	$3,277 \times 10^4$	$1,796 \times 10^5$	$2,434 \times 10^{-4}$	$1,180 \times 10^{-2}$
C ₃ H ₈	$9,470 \times 10^{-1}$	6,872	$2,250 \times 10^{-2}$	$9,731 \times 10^{-2}$	$1,290 \times 10^5$	$5,083 \times 10^5$	$6,072 \times 10^{-4}$	$2,200 \times 10^{-2}$
nC ₄ H ₁₀	1,882	$1,008 \times 10$	$3,999 \times 10^{-2}$	$1,244 \times 10^{-1}$	$3,164 \times 10^5$	$9,928 \times 10^5$	$1,101 \times 10^{-3}$	$3,4 \times 10^{-2}$
iC ₄ H ₁₀	1,938	$1,023 \times 10$	$4,243 \times 10^{-2}$	$1,375 \times 10^{-1}$	$2,860 \times 10^5$	$8,499 \times 10^5$	$1,074 \times 10^{-3}$	$3,400 \times 10^{-2}$

Fonte: (REID; PRAUSNITZ; SHERWOOD, 1977).

Quadro B.1: Quadro da propriedades dependentes das equações de estado

Propriedade	BWR
$\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T,x}$	$-\frac{RT}{V^2} + 2\frac{A_o}{V^3} - 2\frac{B_oRT}{V^3} + 2\frac{C_o}{T^2V^3} - 3\frac{bRT-a}{V^4} - 6\frac{a\alpha}{V^7} + \frac{c}{V^8T^2} \exp\left(-\frac{\gamma}{V^2}\right) (2\gamma^2 - 3V^4 - 3\gamma V^2)$
$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V,x}$	$\frac{R}{V} + \frac{B_oR}{V^2} + 2\frac{C_o}{V^2T^3} + \frac{bR}{V^3} - 2\frac{c}{V^3T^3} \left(1 + \frac{\gamma}{V^2}\right) \exp\left(-\frac{\gamma}{V^2}\right)$
h^R	$PV - RT + \frac{A_o}{V} + 3\frac{C_o}{VT^2} + \frac{a}{2V^2} - \frac{a\alpha}{5V^5} + 3\frac{c}{RT^2} \left[\exp\left(-\frac{\gamma}{V^2}\right) \left(\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{2V^2}\right) - \frac{1}{\gamma} \right]$
s^R	$R \ln(Z) + R \left(-\frac{B_o}{V} + \frac{2A_o}{VRT}\right) + \frac{4C_o}{VRT^3} - \frac{b}{2V^2} + \frac{a}{V^2RT} - \frac{2a\alpha}{5V^5RT} + \frac{4c}{RT^3} \left[e^{-\gamma/V^2} \left(\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{2V^2}\right) - \frac{1}{\gamma} \right]$
C_V	$C_V^{IG} + 6\frac{C_o}{T^3V} + 6\frac{c}{T^3} \left[\exp\left(-\frac{\gamma}{V^2}\right) \left(\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{2V^2}\right) - \frac{1}{\gamma} \right]$
$\left(\frac{\partial h^R}{\partial T}\right)_{V,x}$	$V \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_{V,x} - R - 6\frac{C_o}{VT^3} - 6\frac{c}{RT^3} \left[\exp\left(-\frac{\gamma}{V^2}\right) \left(\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{2V^2}\right) - \frac{1}{\gamma} \right]$
$\left(\frac{\partial h^R}{\partial V}\right)_{T,x}$	$V \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T,x} + P - \frac{A_o}{V^2} - 3\frac{C_o}{V^2T^2} - \frac{a}{V^3} + \frac{a\alpha}{V^6} + 3\frac{c}{RV^3T^2} \left[\exp\left(-\frac{\gamma}{V^2}\right) \left(1 + \frac{\gamma}{V^2}\right) \right]$

$$A_{oij} = \sqrt{A_{oi}A_{oj}(1 - k_{ij})} \quad (B.5)$$

$$C_o = \sum \sum x_i x_j C_{oij} \quad (B.6)$$

$$C_{oij} = \sqrt{C_{oi}C_{oj}(1 - k_{ij})} \quad (B.7)$$

$$a = \sum \sum x_i x_j x_k (a_{ij}a_{ik}a_{jk})^{1/3} \quad (B.8)$$

$$a_{ij} = \sqrt{a_i a_j} (1 - k_{ij}) \quad (B.9)$$

$$b = \sum \sum x_i x_j x_k (b_{ij}b_{ik}b_{jk})^{1/3} \quad (B.10)$$

$$b_{ij} = \sqrt{b_i b_j} (1 - k_{ij}) \quad (B.11)$$

$$c = \sum \sum x_i x_j x_k (c_{ij}c_{ik}c_{jk})^{1/3} \quad (B.12)$$

$$c_{ij} = \sqrt{c_i c_j} (1 - k_{ij}) \quad (B.13)$$

$$\alpha = \sum \sum x_i x_j x_k (\alpha_{ij}\alpha_{ik}\alpha_{jk})^{1/3} \quad (B.14)$$

$$\alpha_{ij} = \sqrt{\alpha_i \alpha_j} \quad (B.15)$$

$$\gamma = \sum \sum x_i x_j \gamma_{ij} \quad (B.16)$$

$$\gamma_{ij} = \sqrt{\gamma_i \gamma_j} \quad (B.17)$$

As integrais de dP/V da Eq. 4.24 para a equação de BWR é calculada conforme listado abaixo:

$$\int_{V_1}^V \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T \frac{\partial V}{V} = F_{BWR}(T,V) - F_{BWR}(T,V_1) \quad (B.18)$$

$$\int_{T_1}^T \left(\frac{dP}{\partial T}\right)_T \frac{dT}{V} = \frac{P(T,V) - P(T_1,V)}{V} \quad (B.19)$$

onde F_{BWR} é dada por:

$$F_{BWR}(T,V) = \frac{RT}{2V^2} + 2\frac{B_oRT - A_o - C_o/T^2}{3V^3} + 3\frac{bRT - a}{4V^4} + \quad (\text{B.20})$$
$$+ 6\frac{a\alpha}{7V^7} + \frac{c}{2T^2} \left[\exp\left(-\frac{\gamma}{V^2}\right) \left(\frac{3}{\gamma^2} + \frac{2\gamma}{V^6} + \frac{3}{\gamma V^2} + \frac{3}{V^4} \right) \right]$$

Anexo C

Propriedade críticas e de Capacidade calorífica

As propriedades críticas dos gases foram obtidas em Poling, Prausnitz e O'Connell (2001), exceto para o hidrogênio que foi utilizada o recomendado por Graboski e Daubert (1979), exibidos a Tabela C.1.

Tabela C.1: Propriedades dos fluidos.

Componente	$M / (\text{kg} \cdot \text{kmol}^{-1})$	P_C / kPa	T_C / K	$V_C / (\text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1})$	Z_C	ω_a	η_{dip}
CH ₄	16,04	4599	190,60	68,6	0,286	0,012	0
N ₂	2,02	2103	41,67	64,2	0,292	-0,216	0
H ₂	28,01	3400	126,20	90,1	0,274	0,038	0
CO ₂	44,01	7383	304,20	94,1	0,303	0,224	0
CO	28,01	3499	132,90	93,1	0,289	0,048	0,1
O ₂	32,00	5043	154,58	73,4	0,289	0,022	0
C ₂ H ₆	30,07	4872	305,32	145,5	0,279	0,099	0
C ₃ H ₈	44,10	4249	369,83	200,0	0,276	0,152	0
nC ₄ H ₁₀	58,12	3796	425,12	255,0	0,274	0,200	0
iC ₄ H ₁₀	72,15	3370	469,70	311,0	0,268	0,252	0
C ₅ H ₁₂	58,12	3640	407,85	262,7	0,278	0,186	0,1

A capacidade calorífica a pressão constante foi calculada conforme a Eq. C.1, sendo que os parâmetros estão dispostos na Tabela C.2. Os valores destes parâmetros foram obtidos de várias referências, de modo que se ajustasse melhor às propriedades dos componentes puros tabelados em Green e Perry (2007).

$$C_P^{IG} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 - \frac{a_6}{T^2} \quad (\text{C.1})$$

A pressão de vapor necessária, para o cálculos da viscosidade e cálculos para o estado líquido, foi obtida com base na Eq. C.2, cujos parâmetros foram sugeridos

Tabela C.2: Parâmetros da capacidade calorífica a pressão constante para gás ideal para a Eq. C.1.

Componente	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	Fonte
CH ₄	19,25	0,0521	1,20E-05	-1,13E-08	0	0	REID ET AL, 1977
N ₂	27,14	0,0093	-1,38E-05	7,65E-09	0	0	REID ET AL, 1977
H ₂	27,27	0,0049	0	0	0	3,33E+04	SMITH ET AL, 2005
CO ₂	27,20	0,0426	-1,97E-05	4,03E-09	-3,01E-13	0	Hysys®
CO	30,08	-0,0097	2,54E-05	-1,54E-08	2,81E-12	0	Hysys®
O ₂	30,18	-0,0149	5,47E-05	-5,00E-08	1,49E-11	0	POLING ET AL, 2001
C ₂ H ₆	9,40	0,1598	-4,62E-05	0	0	0	SMITH ET AL, 2005
C ₃ H ₈	10,09	0,2393	-7,34E-05	0	0	0	SMITH ET AL, 2005
nC ₄ H ₁₀	16,09	0,3069	-9,48E-05	0	0	0	SMITH ET AL, 2005
iC ₄ H ₁₀	20,49	0,3771	-0,00012	0	0	0	SMITH ET AL, 2005
C ₅ H ₁₂	13,94	0,3147	-9,93E-05	0	0	0	SMITH ET AL, 2005

Hysys® versão 2.2 1995-2000

por (GREEN; PERRY, 2007) e exibidos na Tabela C.3.

$$\ln(P^{vap}) = A + \frac{B}{T + C} + D \ln(T) + E \cdot T^F \quad (C.2)$$

Tabela C.3: Parâmetros para o cálculo da pressão de vapor pela Eq. C.2

Componente	A	B	C	D	E	F
CH ₄	39	-1324,4	0	-3,44	3,10E-05	2
N ₂	12,69	-94,9	0	1,00	3,29E-04	2
H ₂	58	-1084,1	0	-8,31	4,41E-02	1
CO ₂	140,54	-4735,0	0	-21,27	4,09E-02	1
CO	46	-1076,6	0	-4,88	7,57E-05	2
O ₂	51	-1200,2	0	-6,44	2,84E-02	1
C ₂ H ₆	52	-2598,7	0	-5,13	1,49E-05	2
C ₃ H ₈	59	-3492,6	0	-6,07	1,09E-05	2
nC ₄ H ₁₀	66	-4363,2	0	-7,05	9,45E-06	2
iC ₄ H ₁₀	79	-5420,3	0	-8,83	9,62E-06	2
C ₅ H ₁₂	78,01	-4634,1	0	-8,96	1,34E-05	2

Fonte: (GREEN; PERRY, 2007)

Anexo D

Cálculo de viscosidade e coeficiente de condutividade térmica

Neste apêndice são apresentados dois métodos de cálculo da viscosidade de gases, o de Lucas e o de Chung (POLING; PRAUSNITZ; O'CONNELL, 2001). No entanto, a viscosidade utilizada nos cálculos de perda de carga foi a calculada pelo método de Lucas. A viscosidade de Chung foi utilizada para o cálculo do coeficiente de condutividade térmica do fluido no escoamento de CO₂, que possui o mesmo autor. Portanto, é mostrado neste apêndice o cálculo da viscosidade de Lucas para substância pura e mistura, com correção da pressão. E a viscosidade e o coeficiente de condutividade térmica de Chung para substância pura com correção da pressão, visto que estes cálculos são usados apenas em transporte de CO₂ puro, mais detalhes sobre a regra de mistura e outros métodos estão disponíveis em Poling, Prausnitz e O'Connell (2001). A viscosidade do CO₂ no estado líquido também foi calculada pelo método de Lucas para líquidos e o coeficiente de condutividade térmica por uma correlação disposta em Green e Perry (2007).

D.1 Método de Lucas

A viscosidade do gás em função da temperatura é dado pelas Eq. D.1 à Eq. D.3.

$$\mu_r = \xi\mu = f(T_r) \tag{D.1}$$

$$\xi = \left[\frac{RT_C N_o^2}{M^3 P_C^4} \right]^{1/6} \tag{D.2}$$

$$\xi\mu = F_P^o F_Q^o [0,807T_r^{0,618} - 0,357 \exp(-0,449T_r) + 0,340 \exp(-4,058T_r) + 0,018] \quad (\text{D.3})$$

onde N_o é número de Avogrado, $6,028 \times 10^{-23}$, M é o peso molecular, T_C e P_C são a temperatura crítica e pressão crítica em Kelvin e Pascal respectivamente. T_r é a temperatura reduzida dada pela razão da temperatura pela temperatura crítica, T/T_C . F_P^o é o fator do momento dipolo dado pelas Eq. D.4 à Eq. D.6.

$$F_P^o = 1 \quad 0 \leq \eta_r < 0,022 \quad (\text{D.4})$$

$$F_P^o = 1 + 30,55(0,292 - Z_C)^{1,72} \quad 0,022 \leq \eta_r < 0,075 \quad (\text{D.5})$$

$$F_P^o = 1 + 30,55(0,292 - Z_C)^{1,72} \|0,96 + 0,1(T_r - 0,7)\| \quad \eta_r \geq 0,075 \quad (\text{D.6})$$

onde η_r é o momento dipolo relativo dado pela Eq. D.7. Z_C é o fator de compressibilidade crítico.

$$\eta_r = 52,46 \frac{\eta_{dip} P_C}{T_C^2} \quad (\text{D.7})$$

onde η_{dip} é o momento dipolo da molécula do fluido apresentado na Tabela C.1.

F_Q^o é uma correção para gases atômicos como o hidrogênio e o hélio. Para ps demais gases o seu valor é 1.

$$F_Q^o = 1,22Q^{0,15} (1 + 0,00385(T_r - 12)^{2/M} \text{sign}(T - 12)) \quad (\text{D.8})$$

onde Q para o hidrogênio 0,76, $\text{sign}(x)$ é -1 para x menor que zero e 1 para x maior que zero.

D.1.1 Viscosidade a altas pressões

A correção da viscosidade em função da pressão pode ser calculada pela Eq. D.9

$$\mu = \frac{Z_2 F_P F_Q}{\xi} \quad (\text{D.9})$$

onde Z_2 é um fator de correção dado pela Eq. D.10 ou Eq. D.13.

Se $T_r \leq 1,0$ e $P_r < P^{vap}/P_C$:

$$Z_2 = 0,600 + 0,760P_r^\alpha + (6,990P_r^\beta - 0,6)(1 - T_r) \quad (D.10)$$

onde P_r é a pressão residual dada pela razão da pressão pela pressão crítica, P/P_C , P^{vap} é a pressão de valor na temperatura T . E os parâmetros α e β são calculados por:

$$\alpha = 3,262 + 14,98P_r^{5,508} \quad (D.11)$$

$$\beta = 1,390 + 5,746P_r \quad (D.12)$$

Se $(1 < T_r < 40)$ e $(0 < P_r \leq 100)$:

$$Z_2 = \mu^\circ \xi \left[1 + \frac{aP_r^e}{bP_r^f + (1 + cP_r^d)^{-1}} \right] \quad (D.13)$$

onde os parâmetros a , b , c , d , e e f são calculados pelas Eq. D.14 à Eq. D.19 com o auxílio da Tabela D.1.

$$a = \frac{a_1}{T_r} \exp(\alpha_2 T_r^\gamma) \quad (D.14)$$

$$b = a(b_1 T_r - b_2) \quad (D.15)$$

$$c = \frac{c_1}{T_r} \exp(c_2 T_r^\delta) \quad (D.16)$$

$$d = \frac{d_1}{T_r} \exp(d_2 T_r^\epsilon) \quad (D.17)$$

$$e = 1,3088 \quad (D.18)$$

$$f = f_1 \exp(f_2 T_r^\zeta) \quad (D.19)$$

Os valores de F_P e F_Q da Eq. D.9, são valores corrigidos do F_P° e F_Q° a baixas pressões, como está apresentado nas Eq. D.20 e Eq. D.21, respectivamente.

$$F_P = \frac{1 + (F_P^\circ - 1)Y^{-3}}{F_P^\circ} \quad (D.20)$$

Tabela D.1: Parâmetros do método de Lucas

Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
a_1	$1,245 \times 10^{-3}$	a_2	5,1726
b_1	1,6553	b_2	1,2723
c_1	0,4489	c_2	3,0578
d_1	1,7368	d_2	2,2310
f_1	0,9425	f_2	-0,1853
γ	0,9425	δ	-37,7332
ϵ	-7,6351	ζ	0,4489

$$F_Q = \frac{1 + (F_Q^o - 1)[Y^{-1} + 0,007(\ln(Y))^4]}{F_Q^o} \quad (\text{D.21})$$

onde Y é dado pela Eq. D.22 e Z_1 está relacionado com a viscosidade a baixa pressão como apresentado na Eq. D.23.

$$Y = \frac{Z_2}{Z_1} \quad (\text{D.22})$$

$$Z_1 = \mu^o \xi \quad (\text{D.23})$$

D.1.2 Regra de mistura

Para misturas o método de Lucas sugere apenas calcular as propriedade críticas da mistura, o volume molar e os fatores F_P^o e F_Q^o a baixas pressões pelas Eq. D.24 à Eq. D.28. A etapa seguinte consiste em utilizar as equações já descritas.

$$T_{Cm} = \sum_i^n y_i T_{Ci} \quad (\text{D.24})$$

$$M = \sum_i^n y_i M_i \quad (\text{D.25})$$

$$P_{Cm} = RT_{Cm} \frac{\sum_i^n y_i Z_{Ci}}{\sum_i^n y_i V_{Ci}} \quad (\text{D.26})$$

$$F_{Pm}^o = \sum_i^n y_i F_{Pi}^o \quad (\text{D.27})$$

$$F_{Qm}^o = \sum_i^n y_i F_{Qi}^o \quad (\text{D.28})$$

D.2 Viscosidade pelo método de Chung

Este é um método bem mais simples que o método de Lucas, onde a viscosidade de um gás puro em função da temperatura pode ser calculado também pela Eq. D.29:

$$\mu = 40,785 \frac{F_C(MT)^{1/2}}{V_C^{2/3}\Omega_v} \quad (\text{D.29})$$

onde os fatores F_C e Ω_v são calculados pelas Eq. D.30 e Eq. D.31.

$$F_C = 1 - 0,275\omega + 0,059035\eta_r^4 \quad (\text{D.30})$$

$$\Omega = A(T^*)^{-B} + C \exp(-DT^*) + E \cdot \exp(-FT^*) \quad (\text{D.31})$$

onde os parâmetros da Eq. D.30 são: $A = 1,16145$, $B = 0,14874$, $C = 0,52487$, $D = 0,77320$, $E = 2,16178$ e $F = 2,43787$. E a temperatura $T^* = 1,2593T_r$, sendo T_r a temperatura reduzida.

D.2.1 Influência da pressão

Para sistemas a altas pressões, a viscosidade pelo método de Chung é calculada conforma a Eq. D.32

$$\mu = \mu^* \frac{36,344(MT_C)^{1/2}}{V_C^{2/3}} \quad (\text{D.32})$$

$$(\text{D.33})$$

onde a viscosidade relativa μ^* é calculada pelas Eq. D.34 à Eq. D.38.

$$\mu^* = \frac{(T^*)^{1/2}}{\Omega_v} [F_C(G_2^{-1} + E_6y)] + \mu^{**} \quad (\text{D.34})$$

$$y = \frac{V_c}{6V} \quad (\text{D.35})$$

$$G_1 = \frac{1 - 0,5y}{(1 - y)^3} \quad (\text{D.36})$$

$$G_2 = \frac{E_1[1 - \exp(-E_4y)/y] + E_2G_1 \exp(E_5y) + E_3G_1}{E_1E_4 + E_2 + E_3} \quad (\text{D.37})$$

$$\mu^{**} = E_7y^2G_2 \exp(E_8 + E_9(T^*)^{-1} + E_{10}(T^*)^{-2}) \quad (\text{D.38})$$

onde E_i pela Eq. D.39 com o auxílio da Tabela D.2.

$$E_i = a_i + b_i\omega + c_1\eta_{dip}^4 \quad (D.39)$$

onde ω é o fator acêntrico do gás e η_{dip} é o momento dipolo da molécula.

D.3 Condutividade térmica pelo método de Chung

Pelo método de Chung condutividade térmica de um gás pode ser calculada conforme a Eq. D.40. Esta propriedade é apresentada com uma função da viscosidade, μ e da capacidade calorífica a volume constante, C_V .

$$\frac{\kappa M'}{\mu C_V} = \frac{3,75\Phi}{C_V/R} \quad (D.40)$$

onde Φ e Z podem ser calculadas pelas Eq. D.41 à Eq. D.44 são funções da capacidade calorífica do gás, do fator acêntrico, ω e da temperatura relativa, T_r .

$$\Phi = 1 + \alpha \frac{0,215 + 0,28288\alpha - 1,06\beta + 0,26665Z}{0,6366 + \beta Z + 1,061\alpha\beta} \quad (D.41)$$

$$\alpha = (C_V/R)^{-3/2} \quad (D.42)$$

$$\beta = 0,7862 - 0,7109\omega + 1,3168\omega^2 \quad (D.43)$$

$$Z = 2,0 + 10,5T_r^2 \quad (D.44)$$

onde R é a constante universal dos gases.

Tabela D.2: Parâmetros para o cálculo de E_i

i	a_i	b_i	c_i
1	6,324	50,412	-51,680
2	$1,21 \times 10^{-3}$	$-1,154 \times 10^{-4}$	$-6,257 \times 10^{-3}$
3	5,283	254,209	-168,48
4	6,623	38,096	-8,464
5	19,745	7,630	-14,354
6	-1,900	-12,537	4,985
7	24,275	3,450	-11,291
8	0,7972	1,117	0,01235
9	-0,2382	0,0677	-0,8163
10	0,006863	0,3479	0,5926

Note que a viscosidade utilizada na Eq. D.40 deve ser a mesma calculada pela Eq. D.29.

D.3.1 Influência da pressão

A correção da condutividade térmica pela pressão pelo método de Chung está apresentada na Eq. D.45, em função da viscosidade a baixas pressões μ^o , e da temperatura reduzida.

$$\kappa = \frac{31,2\mu^o\Phi}{M'}(G_3^{-1} + B_6y) + qB_7y^2T_r^{1/2}G_3 \quad (\text{D.45})$$

onde o parâmetro q é calculado pela Eq. D.46, G_3 é calculado pela Eq. D.47, e y é calculado pela Eq. D.35, na qual é uma função do volume molar do fluido.

$$q = 3,586 \times 10^{-3} \frac{(T_C/M')^{1/2}}{V_C^{2/3}} \quad (\text{D.46})$$

$$G_3 = \frac{(B_1/y)(1 - \exp(-B_4y)) + B_2G_1 \exp(B_5y) + B_3G_1}{B_1B_4 + B_2 + B_3} \quad (\text{D.47})$$

Os parâmetros B_i são calculados conforme a Eq. D.48 e assim como os parâmetros E_i da correção da pressão na viscosidade, este parâmetro é uma função do fator acêntrico, do momento dipolo. Os parâmetros necessários para o cálculo de B_i estão dispostos na Tabela D.3

$$B_i = a_i + b_i\omega + c_1\eta_{dip}^4 \quad (\text{D.48})$$

Tabela D.3: Parâmetros para o cálculo de B_i

i	a_i	b_i	c_i
1	2,4166	0,74824	-0,91858
2	-0,50924	-1,5094	-49,991
3	6,6107	5,6207	6,4760
4	14,543	-8,9139	-5,6379
5	0,79274	0,82019	-0,69369
6	-5,8634	12,801	9,5893
7	91,089	128,11	-54,217

D.4 Cálculos da viscosidade e condutividade térmica para líquidos puros

Lucas(1981) sugere para cálculos de líquidos puros a alta pressão a Eq. D.49:

$$\frac{\mu}{\mu_{sat}} = \frac{1 + D(\Delta P_r/2,118)^A}{1 + C\omega\Delta P_r} \quad (D.49)$$

onde μ é a viscosidade do líquido, μ_{sat} é a viscosidade do líquido saturado, ω é o fator acêntrico ΔP_r é a variação da pressão residual dada pela Eq. D.50 e A , C e D são funções da temperatura reduzida conforme as Eq.D.51 à Eq. D.53.

$$\Delta P_r = \frac{(P - P^{vap})}{P_C} \quad (D.50)$$

$$A = 0,9991 - \frac{4,674 \times 10^{-4}}{1,0523T_r^{-0,03877} - 1,0513} \quad (D.51)$$

$$D = \frac{0,3257}{(1,0039 - T_r^{2,573})^{0,2906}} - 0,2086 \quad (D.52)$$

$$C = -0,07921 + 2,1616T_r - 13,4040T_r^2 + 44,1706T_r^3 - 84,8291T_r^4 + 96,1209T_r^5 - 59,8127T_r^6 + 15,6719T_r^7 \quad (D.53)$$

A viscosidade do CO₂ líquido saturado foi calculada pela equação polinomial sugerida por Green e Perry (2007), conforme apresentado na Eq. D.54.

$$\ln(\mu_{sat}) = -16,953 + \frac{973,404}{T} + 0,7838\ln(T) - 9,705 \times 10^{-26}T^{10} \quad (D.54)$$

Para o cálculo do coeficiente de condutividade térmica do líquido Poling, Prausnitz e O'Connell (2001) recomendam que se estiver em uma região longe do ponto crítico, onde as simulações se enquadram, a condutividade não tem correlação forte com a pressão. Assim, como a correlação proposta por Green e Perry (2007) da condutividade com a temperatura representa melhor os dados experimentais para o CO₂, a Eq. D.55 foi utilizada.

$$\kappa = 0,4406 - 0,0012175T \quad (D.55)$$

Anexo E

Parâmetros do compressor

Os parâmetros do compressor utilizado nos estudos de caso foram retirados do trabalho de Grong (2009). Na Tabela E.1 estão apresentadas as dimensões do compressor.

Tabela E.1: Tabela com as dimensões do compressor.

Dimensão	Unidade	Valor
D_R	m	0,02
l_i	m	0,053
l_d	m	0,053
D_{t1}	m	0,074
D_{h1}	m	0,032
D_2	m	0,128
β_{1b}	rad	0,61
β_{2b}	rad	$\pi/2$
N_b	adm	20

Fonte: (GRONG, 2009).

Anexo F

Certificado de calibração para tacômetro

A Tabela F.1 apresenta a calibração de um tacômetro digital, na qual foi considerada para as rotações do compressor aplicado neste trabalho. Este certificado foi obtido por dados de um fabricante de equipamentos industriais.

Tabela F.1: Tabela do relatório de calibração do tacômetro

Valor medi- do/rpm	Valor cor- rigido pelo padrão /rpm	Incerteza ex- pandida /rpm	fator de ab- rangência	grau de liber- dade
20000,0	19999,82	0,25	2	inf
30000,0	29999,67	0,39	2	inf
50000,0	49999,48	0,64	2	inf
70000,0	69999,34	0,89	2	inf

Fonte: <http://www.instrutemp.com.br/instrutemp/paginainstitucional/padrees>

Os valores das rotações que não se encontram na Tabela F.1 foram corrigidos através de interpolação, conforme apresentado na Eq. F.1. Por ser um modelo linear a incerteza das rotações corrigidas foi obtida por meio da propagação da incerteza, apresentada no Capítulo 3, como apresentado na Eq. F.2, onde as variáveis de entrada que possuem incerteza são as rotações medidas da Tabela F.1.

$$N_i^c = a \cdot N_i^m + b \quad (\text{F.1})$$

$$u_{N_i^c}^2 = u_a^2 \cdot (N_i^m)^2 + u_b^2 \quad (\text{F.2})$$

onde as constantes da interpolação linear a e b são dadas por:

$$a = \frac{N_{i+1}^c - N_{i-1}^c}{N_{i+1}^m - N_{i-1}^m} \quad (\text{F.3})$$

$$b = N_{i+1}^c - a \cdot N_{i+1}^m \quad (\text{F.4})$$

E a incerteza dos parâmetros a e b são dados por:

$$u_a^2 = \left(\frac{1}{N_{i+1}^m - N_{i-1}^m} \right)^2 u_{N_{i+1}}^2 + \left(-\frac{1}{N_{i+1}^m - N_{i-1}^m} \right)^2 u_{N_{i-1}}^2 \quad (\text{F.5})$$

$$u_b^2 = u_{N_{i+1}}^2 + (N_{i+1}^m)^2 \cdot u_a^2 \quad (\text{F.6})$$

onde N_i^c é a rotação corrigida da qual será calculada pela a rotação medida, N_i^m . N_{i+1}^m e N_{i-1}^m são as rotações medidas mais próximas de N_i^m e N_{i+1}^c e N_{i-1}^c são as rotações corrigidas do relatório de calibração. Um exemplo pode ser apresentado pelas Eq. F.8 à Eq. F.13.

$$a = \frac{29999,67 - 19999,82}{30000 - 20000} = 0,99998 \quad (\text{F.7})$$

$$b = 29999,67 - 0,99998 \times 30000 = 0,12 \quad (\text{F.8})$$

$$N_{25000}^c = 25000 \times 0,99998 + 0,12 = 24999,74 \quad (\text{F.9})$$

$$u_a^2 = \left(\frac{0,39}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{30000 - 20000} \right)^2 + \left(\frac{0,25}{2} \right)^2 \left(-\frac{1}{30000 - 20000} \right)^2 = 5,35 \times 10^{-10} \quad (\text{F.10})$$

$$u_b^2 = \left(\frac{0,39}{2} \right)^2 + 5,35 \times 10^{-10} \times 30000^2 = 0,520 \quad (\text{F.11})$$

$$u_{25000}^2 = 25000^2 \times 5,35 \times 10^{-10} + 0,520 = 0,856 \quad (\text{F.12})$$

$$u_{25000} = 0,92 \quad (\text{F.13})$$

Para a simulação de Monte foi considerada para a rotação apenas a incerteza da correção da rotação e da resolução, sendo que a incerteza da correção é dada pela Eq. F.2. O medidor consegue ler até a primeira casa decimal, dessa forma a foi considerada para a resolução, R_N uma *PDF* uniforme com mínimo de -0,05 rpm e máximo de 0,05 rpm. Dessa forma a função de medição para calculara rotação para o método de Monte Carlo foi dada pela Eq. F.14.

$$M_N = N^c + R_N \quad (\text{F.14})$$