

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA POLITÉCNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

JÚLIA SILVA DE MATOS

**Modelagem e Simulação de Escoamento Turbulento em Compressor de CO₂
Supercrítico**

São Paulo
2021

JÚLIA SILVA DE MATOS

**Modelagem e Simulação de Escoamento Turbulento em Compressor de CO₂
Supercrítico**

Versão corrigida

Dissertação apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica.

Área de Concentração: Engenharia Mecânica de Energia e Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Jurandir Itizo Yanagihara

São Paulo
2021

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, _____ de _____ de _____

Assinatura do autor: _____

Assinatura do orientador: _____

Catálogo-na-publicação

Matos, Julia Silva

Modelagem e Simulação de Escoamento Turbulento em Compressor de CO₂ Supercrítico / J. S. Matos -- versão corr. -- São Paulo, 2021.

71 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecânica.

1.Compressor centrífugo 2.CO₂ supercrítico 3.CFD 4.Turbulência
5.E escoamento compressível I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Mecânica II.t.

Dissertação da autoria de Júlia Silva de Matos, sob o título "**Modelagem e Simulação de Escoamento Turbulento em Compressor de CO₂ Supercrítico**", apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, na área de concentração Engenharia Mecânica de Energia e Fluidos, aprovada em ____ de _____ de _____ pela comissão julgadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. _____
Instituição: _____
Presidente

Prof. Dr. _____
Instituição: _____

Prof. Dr. _____
Instituição: _____

Dedico este trabalho a todos aqueles que buscam no conhecimento o caminho para o crescimento pessoal e desta forma contribuir para uma sociedade melhor.

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço à minha família pelo apoio, carinho, paciência, incentivo e cobrança nessa etapa da minha carreira. À minha mãe agradeço os conselhos, zelo e compreensão constantes. Ao meu pai agradeço por sempre contribuir em momentos de dificuldade e por me proporcionar as melhores condições para que pudesse desenvolver minha pós graduação, principalmente por me ter presenteado Sophie, minha “cãopanheira” de todas as horas e melhor companhia que eu poderia ter. Agradeço a meu irmão que mesmo distante se faz tão presente e interessado me apoiando incondicionalmente, sendo meu porto seguro nos momentos de dificuldade.

À minha amiga Layse Boere, pessoa responsável por me fazer ingressar na vida acadêmica. Sou grata pelo companheirismo incondicional, torcedora e incentivadora dedicada principalmente nos períodos mais difíceis ao decorrer desse mestrado, sendo a representação da palavra “amizade”. Ao meu primo Rafael Chaves que me recebeu em São Paulo no início dessa jornada tornando o processo de adaptação mais leve e agradável, por ter sido a minha referência familiar. Aos amigos que conheci nesta cidade e que tornaram São Paulo minha nova casa e minha vida mais colorida.

Agradeço aos integrantes do Research Centre of Gas Innovation, em especial à equipe do Projeto 37, cujas discussões proporcionaram imensurável crescimento profissional. Aos colegas do Projeto, Allan Moreira e Bruno Nagy, que ao longo da jornada se tornaram amigos e companheiros nos estudos de CFD. Ao Professor Dr. Paulo Eduardo Mello que esteve sempre solícito em preencher as lacunas ocasionadas pela minha falta de conhecimento.

Ao meu orientador Prof. Dr. Jurandir Itizo Yanagihara sou imensamente grata por ter me confiado a realização deste trabalho e por ser referência profissional e de humanidade. Agradeço por ter me conduzido aos limites do meu conhecimento, incentivando meu senso crítico e minha capacidade de crescimento profissional.

Agradeço à Universidade de São Paulo que desde o início da minha vida acadêmica despertou em mim um interesse maior por ser uma instituição exemplar onde se respira conhecimento e se inspira inovação.

E por fim, agradeço a todos que contribuíram direta ou indiretamente para a realização desse trabalho.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Fundação de Apoio à Universidade de São Paulo.

*“All that man ignores does not exist for him.
Therefore the universe of each, is summed up to the size of his knowledge”
(Albert Einstein).*

Resumo

MATOS, Julia. **Modelagem e Simulação de Escoamento Turbulento em Compressor de CO₂ Supercrítico**. 2021. 70p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2021.

A dinâmica de fluidos computacional (CFD) tem sido amplamente utilizada como ferramenta para projetar, avaliar e melhorar dispositivos de turbo máquinas e neste contexto os ciclos supercríticos tem ganhado cada vez mais atenção da comunidade científica. Este estudo propõe-se a modelar, simular e avaliar o comportamento de um compressor operando com CO₂ na região termodinâmica acima do ponto crítico líquido-vapor, em CFD. O *Sandia National Laboratories* divulgou em 2010 um relatório com informações à respeito de seu *loop* de ciclo Brayton em pequena escala operando com CO₂ supercrítico (S-CO₂) que tem sido amplamente utilizado para validação e análises de modelos numéricos. Para obter resultados precisos em termos de eficiência prevista e desempenho do compressor os aspectos fundamentais dos fluxos que evoluem perto do ponto crítico devem ser investigados. Assim, um modelo de simulação em um *Software* comercial baseado no método de volumes finitos foi desenvolvido a partir do projeto experimental do *Sandia*. O escoamento foi modelado numericamente e assumido como estado estacionário, turbulento e tridimensional. Apenas o impelidor foi considerado para a modelagem. Adotou-se o modelo de turbulência *k- ω -SST* e foram geradas três malhas com graus diferentes de refino da camada limite com posterior estudo de independência realizado pelo método do Índice de Convergência de Malha (GCI), indicando baixas incertezas numéricas. A definição das propriedades termodinâmicas foi feita pela geração de tabelas específicas para a região de trabalho empregada por um *software* comercial que engloba as equações estado de Span & Wagner para o S-CO₂. Os resultados foram validados em termos de razão de pressão para diferentes casos, variando as condições iniciais, comparando seus valores com os valores experimentais, apontando erro relativo médio de 1,264%, com valor máximo de 3,012% e mínimo de 0,145% para a razão de pressão. 93,65% dos elementos da malha apresentam valores de *Y+* menores que 10 e apenas 1,38% dos elementos da malha apresentam valores de *Y+* maiores que 15. Na simulação 3D, foram estudados aspectos fenomenológicos e termodinâmicos, a fim de elucidar um maior grau de relevância das variáveis relacionadas ao problema.

Palavras-chave: Compressor centrífugo; CO₂ supercrítico; CFD; Turbulência; Escoamento compressível.

Abstract

MATOS, Julia. **Modeling and Simulation of Turbulent Flow of Supercritical CO₂ in Centrifugal Compressor**. 2021. 70p. Dissertation (Master of Mechanical Engineering) – Polytechnic School, University of São Paulo, São Paulo, 2021.

Computational Fluid Dynamics (CFD) has been widely used as a tool for designing, evaluating and improving turbocharger devices and in this context, supercritical cycles have gained more attention from the scientific community. This study proposes to model, simulate and evaluate the behavior of a compressor operating with CO₂ in the thermodynamic region above the vapor-liquid critical point in CFD. In 2010, Sandia National Laboratories released a report with information regarding its small-scale Brayton cycle operating with CO₂ supercritical (S-CO₂), which was mainly used for validation and analysis of numerical models. To obtain accurate results in terms of predicted efficiency and compressor performance, fundamental aspects of flows that evolve near the critical point should be investigated. Thus, a simulation model in commercial software based on a finite volume method was developed from Sandia's experimental project. The flow was numerically modeled and assumed as steady-state, turbulent and three-dimensional. Only the impeller was considered for modeling. The *k- ω* -SST turbulence model was adopted and three meshes with different degrees of boundary layer refinement were generated with later study of the mesh independence carried out by the Grid Convergence Index (GCI) method, in which low numerical uncertainties were observed. The definition of thermodynamic properties was made by the generation of specific tables for the work region, used by commercial software that includes equations of state from Span & Wagner for S-CO₂. The results were validated in terms of pressure ratios for different cases, varying as conditions, comparing their values with experimental ones, pointing an average mean error of 1.264%, with a maximum value of 3.012% and a minimum of 0.145% for a pressure ratio. 93.65% of the mesh elements exhibit *Y+* values less than 10 and only 1.38% of the mesh elements exhibit *Y+* values greater than 15. In 3D simulation, phenomenological and thermodynamic aspects were studied, in order to elucidate a greater degree of relevance of the variables related to the problem.

Keywords: Centrifugal compressor; Supercritical CO₂; CFD; Turbulence; Compressible flow.

Lista de Figuras

Figura 1.1- Região tabelada usada para geração das tabelas de propriedades usadas nas simulações de escoamento do S-CO ₂ em compressor centrífugo.....	18
Figura 1.2 - Diagrama de temperatura-entropia de um ciclo supercrítico de Brayton.....	19
Figura 1.3 - Impelidor de compressor de CO ₂ supercrítico projetado e fabricado pela Barber Nichols Inc. para instalações do Sandia National Laboratories.....	20
Figura 2.1 – Soluções de produtos para compressão de CO ₂	25
Figura 2.2 - Coeficiente principal ideal versus coeficiente de fluxo: dados experimentais (quadrados) com curva de ajuste (linha tracejada), dados numéricos (círculos) e simulação atual (triângulo).	30
Figura 2.3 – Esquema do <i>loop</i> de compressão supercrítico usando um motor de 50 kWe acionando um compressor radial a 75.000 rpm com vazão de 3,51 kg / s.	33
Figura 3.1 - Forma tridimensional do impelidor do compressor centrífugo de CO ₂ (a) e do domínio computacional periódico (b).....	39
Figura 3.2 - Domínios de entrada em verde e saída em vermelho definidos para o problema do escoamento.	40
Figura 3.3 – Prévia do escoamento.....	42
Figura 3.4 - Região coberta pela tabela gerada para simulações de S-CO ₂	45
Figura 3.5 - Vista meridional com linhas <i>Hub</i> e <i>Shroud</i> e canal do impelidor feito pelas curvas de Bezier	46
Figura 3.6 - Ângulo de curvatura em vista superior.	48
Figura 3.7 - Ângulos β de entrada (1) e saída (2) no <i>Hub</i> (em azul) e <i>Shroud</i> (cinza), bordos de ataque (verde) e de fuga (vermelho) e folga no <i>Shroud</i>	49
Figura 3.8 – Comparativo entre impelidor com difusor <i>Sandia</i> e geometria do impelidor gerada em 3D.....	50
Figura 3.9 – Domínio da malha com uma vista detalhada do refinamento na borda de ataque da lâmina secundária no <i>Shroud</i>	52
Figura 4.1 – Evolução dos resíduos em função do número de interações.....	54
Figura 4.2 – Valores de Y^+ ao longo das lâminas principal e secundária.....	57
Figura 4.3 - Visualização em escala da velocidade e seus vetores no impelidor para 20%, 50% e 80% de <i>Span</i> ao longo da envergadura.	58
Figura 4.4 – Linhas de corrente da velocidade em vista superior.	59

Figura 4.5 – Visualização em escala do número Mach relativo no impelidor para 20%, 50% e 80% de <i>Span</i> ao longo da envergadura.....	60
Figura 4.6 – Visualização em escala da entropia estática no impelidor para 20%, 50% e 80% de <i>Span</i> ao longo da envergadura.....	62
Figura 4.7 – Variação de entropia estática ao longo do escoamento.....	63

Lista de Tabelas

Tabela 2.1 – Principais características das séries de Compressores.....	26
Tabela 2.2 - Resumo dos principais trabalhos a cerca de compressão de S-CO ₂ apresentados no trabalho.	31
Tabela 3.1– Condições de contorno e de operação do compressor aplicadas ao escoamento.	41
Tabela 3.2 - Tabelas de superaquecimento na seção de dados de um arquivo RGP.	44
Tabela 3.3 – Parâmetros geométricos utilizados para construção da geometria do impelidor <i>Sandia</i>	47
Tabela 3.4 – Dados das Malhas geradas.....	52
Tabela 4.1 – Resultados para o método GCI.....	53
Tabela 4.2 - Resultados da validação do CO ₂ em termos de valores da razão de pressão e seu erro relativo.....	55

Lista de símbolos

B_{thk}	Espessuras das lâminas
c	Velocidade do som
c_p	Calor específico a pressão constante
c_v	Calor específico a volume constante
h	Entalpia específica
h_{stat}	Entalpia específica estática
I	Rotalpia
k	Energia cinética turbulenta
L_b	Comprimento da corda da lâmina principal
L_s	Comprimento da corda da lâmina secundária
L_1	Comprimento axial do impelidor
L_2	Largura da lâmina na saída
M	Número de Mach relativo
N_b	Número de lâminas principais
N_s	Número de lâminas secundárias
P	Pressão
p	Pressão estática
R	Raio de rotação segundo referencial rotacional
r	Vetor de localização
r_{1h}	Raio de entrada no <i>Hub</i>
r_{1s}	Raio de entrada no <i>Shroud</i>
r_2	Raio de saída
s	Entropia específica
$S_{cf g}$	Geração quantidade de movimento devido a forças centrífugas
S_{Cor}	Geração quantidade de movimento devido a aceleração de Coriolis
S_E	Geração de energia
S_M	Geração de quantidade de movimento
$S_{M.rot}$	Geração de quantidade de movimento rotacional
T	Temperatura
U	Velocidade relativa
$Y+$	Distância normalizada da região próxima à parede
Z	Fator de compressibilidade

Letras gregas

β_{1h}	Ângulo de entrada do fluxo no <i>Hub</i>
β_{1s}	Ângulo de entrada do fluxo no <i>Shroud</i>
β_{2h}	Ângulo de saída do fluxo no <i>Hub</i>
β_{2s}	Ângulo de saída do fluxo no <i>Shroud</i>
ε	Taxa de dissipação turbulenta (modelo $k - \varepsilon$)
ϵ	Folga no <i>Shroud</i>
λ	Condutividade térmica
μ	Viscosidade dinâmica
μ_t	Viscosidade turbulenta
ν	Volume específico
ν_{real}	Volume específico do gás real
ν_{ideal}	Volume específico do gás ideal
ρ	Densidade
τ	Tensor de tensão
φ	Coefficiente de fluxo (<i>Flow coefficient</i>) do compressor centrífugo
Ψ	Coefficiente principal (<i>Head coefficient</i>) do compressor centrífugo
Ω	Ângulo de curvatura
ω	Velocidade angular; Taxa de dissipação turbulenta (modelo $k - \omega$)

Sumário

1	Introdução.....	16
1.1	<i>O CO₂ Supercrítico</i>	<i>17</i>
1.2	<i>Ciclos usando S-CO₂ como fluido de trabalho</i>	<i>19</i>
1.3	<i>Dinâmica de Fluidos Computacional</i>	<i>21</i>
1.4	<i>Justificativa</i>	<i>23</i>
1.5	<i>Objetivo</i>	<i>23</i>
1.6	<i>Estrutura da Dissertação</i>	<i>24</i>
2	Revisão da Literatura	25
2.1	<i>Interesse comercial na tecnologia S-CO₂</i>	<i>25</i>
2.1.1.	<i>Equipamentos comerciais utilizados para compressão de S-CO₂</i>	<i>26</i>
2.1.2.	<i>Pesquisas e tecnologias desenvolvidas</i>	<i>28</i>
2.2.	<i>O projeto desenvolvido no Sandia National Laboratories</i>	<i>32</i>
3.	Materiais e Métodos.....	34
3.1.	<i>Modelagem CFD.....</i>	<i>34</i>
3.2.	<i>Método de Volumes Finitos.....</i>	<i>35</i>
3.3.	<i>Equações Governantes.....</i>	<i>36</i>
3.4.	<i>Modelo de Turbulência</i>	<i>37</i>
3.5.	<i>Domínio computacional e condições de contorno</i>	<i>38</i>
3.5.1.	<i>Domínios de entrada e saída.....</i>	<i>39</i>
3.5.2.	<i>Condições de Contorno</i>	<i>40</i>
3.5.3.	<i>Considerações numéricas do modelo</i>	<i>41</i>
3.6.	<i>Propriedades termodinâmicas do fluido.....</i>	<i>42</i>
3.7.	<i>Geração da Geometria.....</i>	<i>45</i>
3.8.	<i>Geração de Malhas</i>	<i>50</i>
4	Resultados e Discussões	53
4.1.	<i>Estudo de independência de malha.....</i>	<i>53</i>
4.2.	<i>Convergência</i>	<i>54</i>
4.3.	<i>Validação no modelo numérico</i>	<i>55</i>
4.4.	<i>Resultados do escoamento em 3D.....</i>	<i>56</i>

5. Considerações Finais.....	64
5.1. <i>Conclusões</i>	64
5.2. <i>Futuros Desenvolvimentos</i>	65

1 Introdução

Apesar dos esforços para utilizar fontes de energia reutilizáveis, como a energia eólica e solar, os combustíveis fósseis continuam a ser a principal fonte de energia em todo o mundo. Portanto, alternativas para o uso de subprodutos de processo e controle de emissão de carbono combinadas com o recente aumento da exploração e produção de bacias do pré-sal na produção de petróleo e gás no Brasil despertaram interesse especial nos últimos anos. De fato, mais de 45% dos recursos petrolíferos conhecidos estão no fundo do mar e um quarto corresponde a águas profundas e cerca de 33% da produção mundial de petróleo é fornecida por usinas *off-shore* (Barrera et al., 2015).

Como subproduto da extração, existe uma associação de gases compreendendo uma mistura de hidrocarbonetos, gases inertes e água. Esta mistura requer um sistema robusto de tratamento e compressão, no qual, uma vez tratada, os gases ricos em hidrocarbonetos e CO₂ devem ser exportados através de tubulações ou reinjetados em reservatórios. Sendo assim, algumas alternativas que visam reduzir o impacto negativo das usinas geradoras de carvão no meio ambiente bem como aplicações do gás na indústria petrolífera veem sido cogitadas:

- Ciclos de Potência: O Ciclo de Potência Supercrítico, através da combustão de oxicombustível (combustão na qual se utiliza puro oxigênio ao invés de ar), está entre os mais eficientes ciclos de potência dos combustíveis fósseis. Ele usa CO₂ supercrítico (S-CO₂) como fluido de trabalho e opera acima do ponto/região supercrítica. O S-CO₂ sofre mudanças drásticas de densidade ao longo de pequenos gradientes de temperatura e pressão, permitindo uma recuperação significativa de energia em equipamentos comparativamente pequenos. Ele combina as vantagens dos ciclos Rankine e Brayton (Friedman & Anderson, 2017), além disso, como o S-CO₂ é menos corrosivo comparado ao vapor na mesma temperatura, o ciclo S-CO₂ pode aumentar potencialmente a temperatura de entrada da turbina.
- Captura e sequestro de carbono (*Carbon Capture and Sequestration - CCS*): Capturar e armazenar CO₂ liberado da queima de combustíveis fósseis surgiu como uma tecnologia promissora. Uma forma madura de CCS é a captura pós-combustão, ou seja, antes de ser liberado na atmosfera, onde o CO₂ é removido

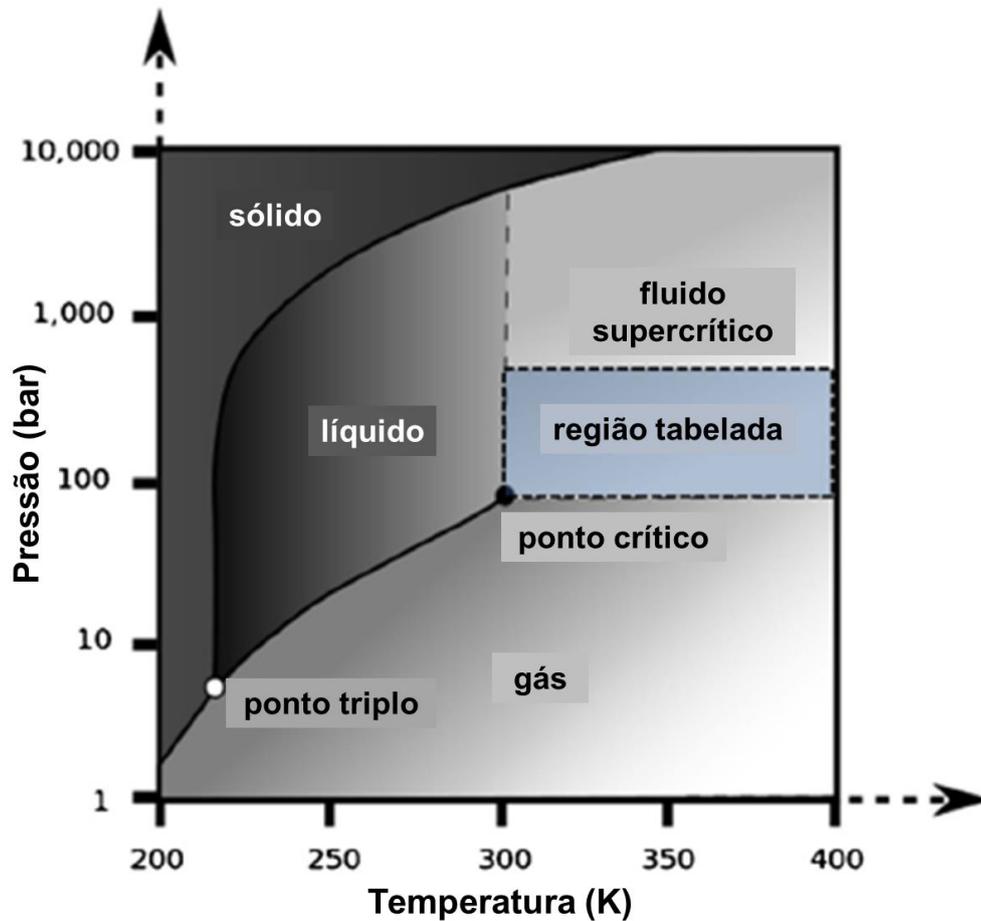
após a combustão de combustível fóssil usando um solvente químico após ter sido comprimido a pressões muito altas, atingindo o estado supercrítico. Neste estado, o fluido tem a densidade de um líquido e a viscosidade de um gás. Ele também se expande para aumentar de volume como um gás, portanto, esses líquidos são, às vezes, chamados de gases densos (Ameli et al., 2017). Contudo, se não houver uso imediato para o CO₂, ele precisa ser armazenado. Sendo necessária a compressão de alta pressão para injetá-lo em reservatórios subterrâneos adequados.

- Recuperação reforçada de petróleo (*Enhanced Oil Recovery – EOR*): Trata-se de uma resposta para poços de petróleo de baixo desempenho com uso do CO₂ produzindo 50% a mais de petróleo do que os métodos padrão usando ar e água. O CO₂ de alta pressão é injetado em um poço de petróleo para aumentar a produção. Um princípio chamado de miscibilidade parcial permite que o CO₂, a uma pressão e temperatura supercríticas se misture completamente com o petróleo, permitindo que ele flua livremente para a coleta. Sob pressões mais baixas, os dois separam-se facilmente. No entanto, as instalações retroativas com sistemas CCS podem ser muito dispendiosas e os requisitos de energia podem atingir até 20% da produção bruta da planta. Só nos EUA mais de 5 bilhões de toneladas de CO₂ por ano são liberados na atmosfera (Aungier, 2000). Dada a enorme escala dessas aplicações, os níveis de eficiência podem ter um impacto dramático nos custos e lucros operacionais.

1.1 O CO₂ Supercrítico

O dióxido de carbono supercrítico tem seu ponto crítico ao redor da temperatura ambiente, com temperatura e pressão crítica de, respectivamente, 304,2 K e 7,4 MPa, condição esta fácil de alcançar, o que torna o S-CO₂ seguro e barato para uso industrial (Wang et al., 2017). A Figura 1.1 apresenta a região tabelada para geração de tabelas das propriedades do CO₂.

Figura 1.1 - Região tabelada usada para geração das tabelas de propriedades usadas nas simulações de escoamento do S-CO₂ em compressor centrífugo



Fonte: Kim et al. (2014)

As principais vantagens do uso do S-CO₂ são a sua alta densidade, baixa viscosidade e grande aumento de pressão com um pequeno aumento de entalpia, o que resulta em alta eficiência, estrutura mecânica compacta e uma relação de pressão maior com menor potência de entrada no compressor centrífugo.

Quando se trata de um *design* adequado a um compressor inserido no ciclo que usa o S-CO₂ como fluido de trabalho algumas questões surgem em pauta, como por exemplo: como este fluido se comportará? teria ele comportamento de gás ideal? e, conseqüentemente, o compressor pode ser projetado de acordo com as diretrizes bem estabelecidas para bombas ou compressores de gás ideais ou, ao contrário, esta máquina está em algum ponto intermediário e, portanto, requer o desenvolvimento de uma nova teoria? o parâmetro comumente empregado para discutir essa questão é o fator de compressibilidade (Z), igual à unidade para gases ideais. Na maioria dos trabalhos de

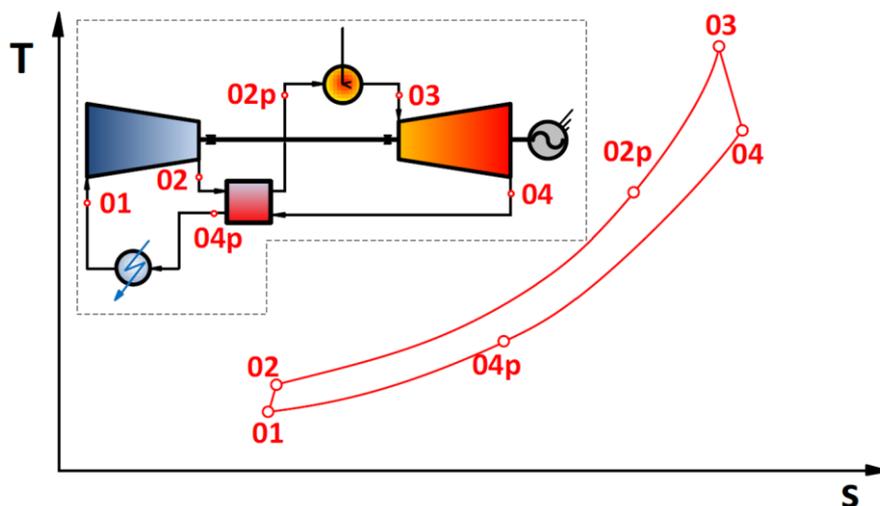
engenharia o fator de compressibilidade é usado como fator de correção do comportamento ideal ($v_{\text{real}} = Z v_{\text{ideal}}$). Assim, um valor do fator de compressibilidade próximo à unidade significa o comportamento ideal do gás, tornando-se os efeitos reais de gás cada vez mais importantes quando Z diminui para aproximadamente 0,2 perto do ponto crítico.

Num escoamento no qual a massa específica se aproxima do seu valor crítico, as interações moleculares se tornam mais fortes e por isso assumir o comportamento de um gás ideal não é mais apropriado, uma vez que este se torna muito sensível às variações de temperatura e pressão. Variações das propriedades do fluido na região supercrítica, especialmente na vizinhança do ponto crítico, tornam as simulações instáveis. Negligenciar o comportamento real do gás na região supercrítica, também não é uma opção aceitável, pois diminui a precisão da simulação e afeta fortemente o resultado do cálculo já que pequenas mudanças nas condições de contorno podem ter um efeito significativo no desempenho da turbo máquina (Ameli et al., 2017).

1.2 Ciclos usando S-CO₂ como fluido de trabalho

Fluidos não convencionais em ciclos supercríticos ou transcíticos são geralmente ligados a configurações fechadas ou aquecidas externamente, como mostrado na Figura 1.2, fazendo necessário um sistema de resfriamento.

Figura 1.2 – Diagrama de temperatura-entropia de um ciclo supercrítico de Brayton.

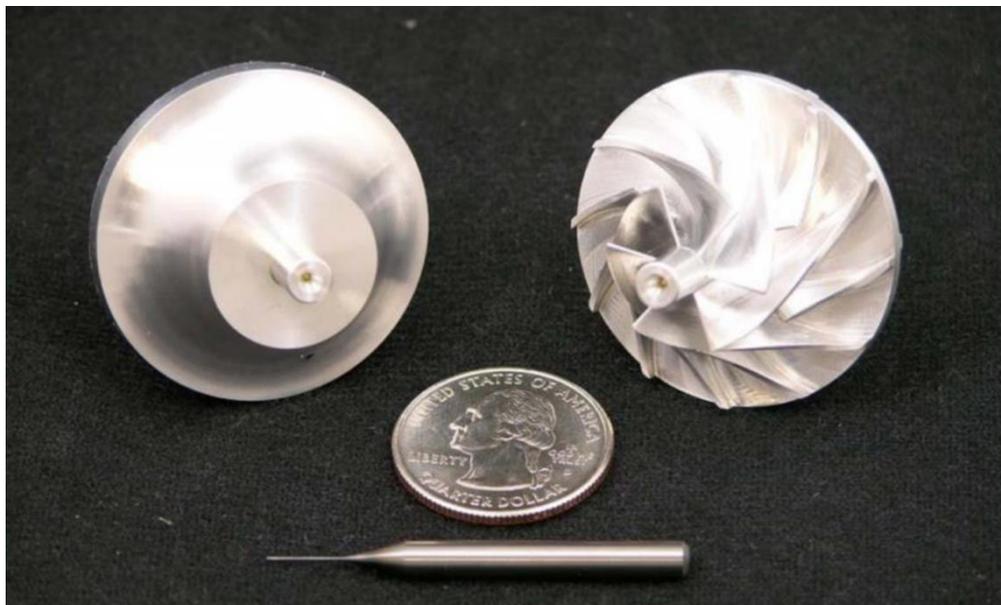


Fonte: Monje (2014).

No entanto, a motivação de usar ciclos supercríticos é principalmente dupla. Por um lado, o comportamento real do gás fornece ao fluido um menor fator de compressibilidade, diminuindo a potência requerida no processo de compressão. De fato, mesmo com um trabalho de expansão menor na turbina, a potência líquida ainda é alta, pois é compensada pela redução no trabalho de compressão. Por outro lado, as condições altamente pressurizadas no sistema reduzem o tamanho alcançável com a turbo máquina supercrítica de CO₂ em comparação com as turbinas de ar (Brayton) e vapor d'água (Rankine)(Monje, 2014).

O primeiro projeto supercrítico de turbo máquina de CO₂ ilustrado na Figura 1.3 veio demonstrar a surpreendente redução de tamanho que as tecnologias supercríticas podem tornar possíveis em relação aos sistemas convencionais. Este é um aspecto muito importante, pois deve trazer reduções de custo em um cenário futuro de maturidade técnica e, ao mesmo tempo, a compactação esperada pode torná-lo muito adequado para aplicações modulares.

Figura 1.3 - Impelidor de compressor de CO₂ supercrítico projetado e fabricado pela Barber Nichols Inc. para instalações do Sandia National Laboratories



Fonte: Wright et al. (2010).

Um dos primeiros indivíduos a pesquisar o ciclo supercrítico foi Feher (1967). Este autor demonstrou a necessidade de adoção de configurações recuperativas para alcançar altas eficiências, uma vez que a recuperação de calor entre correntes de alta e baixa pressão pode ser realizada com alta efetividade.

Há um segundo aspecto que precisa ser estudado além da seleção do fluido de trabalho. Dependendo da faixa de pressão, (Brayton) os ciclos de potência podem ser diferenciados em transcrito, quando a pressão crítica do fluido de trabalho é encontrada em algum ponto no processo de compressão e supercrítica, quando o processo de compressão inicia a uma pressão acima do ponto crítico.

O primeiro caso é geralmente chamado de ciclo de condensação supercrítica, que foi extensamente estudado por Angelino (1968), onde através de uma avaliação completa de vários layouts, este autor apresentou quais configurações de ciclo são mais eficientes e onde as ineficiências estão localizadas. O presente estudo aborda, contudo o caso (compressão supercrítica, no qual o fluido entra e sai do compressor na condição supercrítica).

A tecnologia supercrítica de dióxido de carbono ainda não está desenvolvida devido à sua maturidade incipiente. Embora avanços notáveis tenham sido feitos com o trocador de calor compacto, existente atualmente a turbo máquina que ainda precisa ser reinventada. Um novo desenvolvimento baseado na turbo maquinaria existente para fluidos convencionais precisa ser desenvolvido para o CO₂ (Ulizar & Pilidis, 2000), dadas as diferenças substanciais que são esperadas da substituição do fluido de trabalho (Monje et al., 2012). Considerando-se estas incertezas, o case mais simples foi selecionado para o desenvolvimento do presente trabalho: o ciclo S-CO₂ recuperativo simples, oferecendo alta eficiência (em torno de 40%) na faixa de temperatura modesta selecionada e a possibilidade de resfriamento do ar ambiente. Além disso, a existência de apenas um compressor em configurações simples evita compressores menores e menos eficientes como a de recompressão, onde as perdas secundárias associadas à seção reduzida podem se tornar dominantes.

1.3 *Dinâmica de Fluidos Computacional*

A Dinâmica de Fluidos Computacional (*Computational Fluid Dynamics – CFD*) é uma técnica de análise de sistemas que envolvem escoamento de fluidos, transferência de calor e fenômenos associados (ex. reações químicas) por meio de simulação em computador. A técnica é muito poderosa e abrange uma ampla gama de áreas de aplicação industrial e não industrial. Alguns exemplos são aerodinâmica de aeronaves e veículos, hidrodinâmica de navios, *design* de turbo máquinas: fluido dentro de máquinas

rotativas, cargas em estruturas *off-shore* entre outros (Versteeg & Malalasekera, 2016). Trata-se técnica matemática para obter soluções mais ou menos realistas para problemas reais envolvendo fenômenos físico-químicos de fluidos. O realismo da solução depende não somente da validade dos modelos empregados, mas também das habilidades do usuário, adquiridas unicamente pela experiência em simulação.

Embora os experimentos devam ser vistos como o método mais confiável para obtenção de dados, cada vez mais a abordagem do CFD está se tornando um componente vital no *design* de produtos e processos industriais, pois exhibe vantagens em relação às instalações físicas de alta qualidade. De fato, o custo de investimento de uma instalação de computação de alto desempenho (tanto para aquisição de *software* de CFD e *hardware* de computação), é bastante reduzido, mesmo que não desprezíveis, quando comparado aos equipamentos de teste. Além disso, uma redução considerável de ordem física das instalações necessárias deve ser esperada para sistemas grandes (por exemplo, motores de turbina a gás).

Os códigos numéricos atualmente utilizados são versáteis e permitem a implementação de múltiplos fenômenos físicos (aerodinâmicos, hidrodinâmicos, reações químicas, transferência de calor, etc.), recriando assim as condições reais de operação da instalação experimental, mas em um ambiente virtual. Testes do sistema em condições operacionais perigosas podem ser desenvolvidos sem perigo pessoal ou material. Além disso, devido ao grande nível de detalhes com os quais os resultados podem ser obtidos, o CFD permite obter dados onde, talvez, a instrumentação não possa ser instalada.

De fato, a abordagem CFD já foi usada em diversos estudos de compressão de S-CO₂. Pecnik et al. (2012) descreveram um estudo tridimensional de um compressor centrífugo que opera com CO₂ na região termodinâmica acima do ponto crítico do líquido-vapor. Um pouco mais tarde, Pecnik et al. (2013) realizaram um novo estudo da dinâmica de fluidos de turbo máquinas operando com fluidos caracterizados por um comportamento termodinâmico complexo. Neste caso, o objetivo era desenvolver uma metodologia completa para auxiliar o projeto aerodinâmico das turbo máquinas estendidas às plantas supercríticas de turbinas a gás. O Grupo de Minas e Motores Térmicos da Universidade de Sevilha (GMTS) desenvolveu a simulação do S-CO₂, para analisar ciclos simples e recuperáveis como estágios do compressor radial em *loops* independentes (Monje, 2014). Melhor detalhamento a cerca destes estudos está descrito na seção de revisão de literatura.

Ainda quando se fala em abordagem CFD para o S-CO₂, definições importantes que devem ser tomadas da melhor forma, a fim de modelar com fidelidade o comportamento real: definição da geometria da região de interesse, subdivisão do domínio em um número de subdomínios menores e não sobrepostos (malhas e volumes de controle), seleção dos fenômenos físicos e químicos que precisam ser modelados, definição de propriedades do fluido, especificação de condições de contorno apropriadas, definição e integração das equações governantes do escoamento sobre todos os volumes de controle do domínio, discretização: conversão das equações integrais resultantes em um sistema de equações algébricas e solução das mesmas.

1.4 Justificativa

Pesquisas sobre o CO₂ supercrítico vem aumentando gradualmente. O ciclo S-CO₂ foi proposto pela primeira vez por Feher (1967) e Angelino (1968) (Takagi et al., 2010). Nos últimos anos, as investigações sobre o ciclo Brayton de S-CO₂ ou sistema de ciclo solar de Rankine baseado em S-CO₂ foram desenvolvidas. Considerando o cenário atual, estudos sobre processos, o estudo sobre processos que envolvam compressão de CO₂ abrangendo a região supercrítica se mostra promissor.

Apesar de um progresso significativo no projeto de turbo máquinas operando com o fluido ideal, há poucas pesquisas sobre o comportamento e sensibilidade do desempenho de turbo máquinas para o modelo de gás real com precisão numérica. Isto se deve às dificuldades na simulação e nas medidas experimentais devido à variação não linear das propriedades termo físicas do fluido na região supercrítica.

1.5 Objetivo

Este estudo tem como objetivo principal a modelagem, simulação e análise do escoamento turbulento e compressível em compressor centrífugo operando com CO₂ na região termodinâmica acima do ponto crítico líquido-vapor.

1.6 Estrutura da Dissertação

O presente trabalho está organizado da seguinte forma: apresentação das informações introdutórias em termos de contextualização, particularidades e aplicações do S-CO₂ na indústria petrolífera, bem como os ciclos cujo fluido é empregado. A dinâmica de fluidos computacional é apresentada conjuntamente com suas vantagens e pontos que demandam atenção. Aqui também é exposto o objetivo da dissertação.

No capítulo seguinte, equipamentos, pesquisas e tecnologias desenvolvidas e em desenvolvimento no mundo são trazidas como forma de exemplificar a aplicabilidade e relevância do presente estudo. Neste ponto é introduzido o *Sandia National Laboratories*, cujo modelo será o objetivo de análise nesta dissertação e cujos dados e resultados são usados para gerar a análise e posterior validação do modelo em *Software* comercial de CFD, respectivamente. É realizada revisão das melhores práticas (modelos, condições de contorno, malha), modelos de turbulência indicados e o tratamento dado aos modelos de equações de estado.

Continuamente há o detalhamento de toda a metodologia realizada para obtenção do modelo numérico final (modelos escolhidos e considerações utilizadas). Também é apresentado com mais detalhamento o impelidor do compressor de S-CO₂ do laboratório *Sandia* bem como suas características geométricas e operacionais.

Posteriormente são apresentados os critérios para convergência, bem como os resultados para análise de independência de malha e os resultados da simulação. São feitas discursões a respeito assim como sua comparação com dados experimentais disponíveis como forma de validação. Os resultados em 3D do escoamento e aspectos fenomenológicos e termodinâmicos são estudados. Por fim, apresentam-se as conclusões obtidas com o presente estudo.

2 Revisão da Literatura

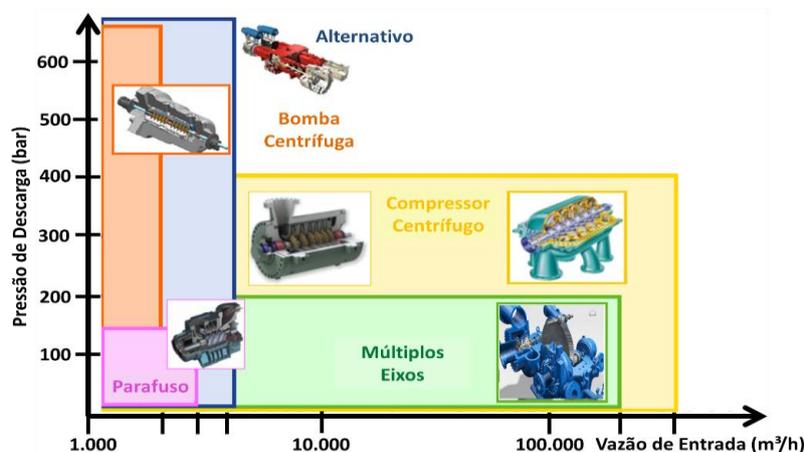
Em termos de divulgação de pesquisas, importantes conquistas devem ser destacadas, como o Simpósio Supercrítico de Ciclo de Energia de CO₂, organizado a cada dois anos pela comunidade de S-CO₂ e a criação do comitê técnico número 34: Energia Supercrítica de CO₂, dentro do Instituto Internacional de Turbinas a Gás (IGTI) da *American Society of Mechanical Engineers* (ASME). Atualmente, a investigação dos ciclos de S-CO₂ forneceu conhecimento suficiente e reuniu interesse suficiente para implantação comercial.

2.1 Interesse comercial na tecnologia S-CO₂

Como citado anteriormente, os ciclos S-CO₂ se destacam devido às suas vantagens, como alta eficiência, layout simples com turbo máquinas e trocadores de calor compactos. Várias fontes de calor, incluindo energia nuclear, combustível fóssil, calor residual e fontes renováveis de calor, como células solares ou de combustível são as potenciais áreas de aplicação do ciclo S-CO₂ (Ahn et al., 2015).

A escolha do equipamento certo depende da sua aplicação e condição operacional e algumas instruções dos fabricantes de compressores podem ajudar nessa decisão. Dependendo da vazão volumétrica e da pressão de descarga é possível decidir qual projeto de máquina é mais adequado. O mapa apresentado da Figura 2.1 traz um exemplo (Wadas, 2010).

Figura. 2.1 – Soluções de produtos para compressão de CO₂.



Fonte: (Wadas, 2010).

Para a indústria petrolífera são necessárias altas pressões de descarga e vazões, o que faz dos compressores centrífugos, tanto simples (*single shaft compressor*) como de múltiplos eixos (*integrally geared ou multi shaft compressor*), ambos de múltiplos estágios, uma possível solução.

Portanto, pesquisas foram feitas dentro da gama de fabricantes de compressores, levando a uma lista com alguns nomes que atendem aos seguintes requisitos: Aplicação na indústria de petróleo; Compressão de CO₂ e alta pressão de descarga (estado supercrítico).

2.1.1. Equipamentos comerciais utilizados para compressão de S-CO₂

Alguns dos fabricantes mais representativos são:

- **Atlas Copco:** Oito estágios de compressão com interresfriamento e pressão de descarga de até 200 bar. (ATLAS, 2018).
- **Siemens:** Um turbo compressor com *design* de caixa voluta verticalmente dividido. (SIEMENS, 2018)
- **GE Oil&Gas:** Estes compressores são usados para a compressão de CO₂ em aplicações de sequestro e captura de carbono (CCS) e enriquecimento aprimorado de óleo (EOR). (Wadas, 2010).

A Tabela 2.1 resume as principais características dos modelos de compressores que foram encontrados.

Tabela 2. 1 – Principais características das séries de Compressores.

Fabricante	Modelo	Estágios	Vazão (m ³ /h)	Pressão de descarga (bar)
Atlas Copco	Centrífugo	8 c/ interresfriamento	18.000	205
Siemens	Centrífugo	8 c/ interresfriamento	25.000 - 250.000	200
GE Oil & Gas	Centrífugo	8 c/ interresfriamento	200.000	200
GE Oil & Gas	Centrífugo	8 c/ interresfriamento	300.000	400

Fonte: A Autora (2020).

A empresa *Dresser-Rand*, braço da Siemens Energia e Gás, é um dos principais fornecedores de soluções de equipamentos rotativos de alta velocidade e de missão crítica para as indústrias de óleo, gás, petroquímica e de processo. A empresa tem projeto para desenvolver refrigeração avançada inter estágio para compressores centrífugos em linha de multi estágios tradicionais e um para desenvolver compressor S-CO₂ supersônico.

Este último, de novembro de 2015 a março de 2018, com objetivo principal de reduzir o custo de captura e compressão de CO₂ (aplicação em CCS). Quando comparado a soluções tradicionais de compressão subsônica este novo sistema apresenta menor área ocupada, menos equipamentos, menos tubulação e necessita de menos resfriadores. Esperava-se que tivesse taxas de compressão mais altas (11,5:1), menor necessidade de interresfriamento a gás, temperaturas de descarga superiores a 290 °C com a recuperação de calor residual que permita uma eficiência geral inigualável do sistema. Em um sistema tradicional que apresenta 85% de eficiência, 15% da energia total disponibilizada são perdidos e se manifestam, principalmente, como calor de baixa temperatura. Embora no sistema de compressão supersônica 20% da energia total se manifestem como calor de média temperatura, se 75% desse calor de grau médio pudessem ser recuperados na forma de trabalho, a perda de energia total seria reduzida para 5% (Saretto, 2016).

Como propostas de recuperação do calor disponível na saída do compressor têm-se:

- Regeneração solvente / amina - Transfere o calor do CO₂ comprimido reduzindo o desvio de vapor do ciclo de energia destinado a este fim;
- Secagem do solvente - Utiliza o calor residual para secar o solvente após a regeneração do vapor;
- Reaquecimento da amina - Utiliza o calor residual no reaquecedor de amina;
- Aquecedor da água de alimentação da caldeira - Utiliza o calor residual para aquecer a água de alimentação da caldeira reduzindo o desvio de vapor do ciclo de energia destinado a este fim;

Foi selecionada uma abordagem híbrida que fornece calor ao aquecedor de água de alimentação da caldeira e ao reaquecedor de amina, na qual o CO₂ é direcionado para o reaquecedor de amina e o calor residual é recuperado a cerca de 149 °C e o restante da energia térmica é usada no aquecedor de água de alimentação da caldeira. Segundo o

autor, a abordagem selecionada aumenta a potência líquida de saída da planta e sua eficiência, reduzindo o custo de capital.

2.1.2. Pesquisas e tecnologias desenvolvidas

Com o ressurgimento do interesse no ciclo S-CO₂ no início do século 21 institutos de pesquisa relevantes avançaram construindo diferentes instalações experimentais. Abaixo seguem alguns exemplos com aplicação em processos de compressão sendo experimentais ou com em CFD.

Desde maio de 2008, o *Sandia National Laboratories* tem um *loop* de teste de compressão S-CO₂ em pequena escala, destinado a validar modelos empregados no projeto de turbo máquinas e trocadores de calor para aplicações nucleares (Wright et al., 2010).

A instalação foi projetada pelo *Sandia* em conjunto com *Barber-Nichols Inc.* e originalmente compreendeu um compressor motorizado de 50 kWe (quilowatts de eletricidade), um resfriador a gás para evitar o aquecimento do fluido ao longo do circuito e uma válvula de orifício que expande o fluido até a pressão de entrada do compressor. Uma pequena turbina (1,2 polegadas de diâmetro) foi adicionada em uma revisão posterior em janeiro de 2009, a fim de obter dados experimentais do ciclo S-CO₂ com uma temperatura máxima de entrada da turbina de 537 °C. O presente estudo tem como objeto de análise o compressor utilizado no Laboratório *Sandia* e, por esta razão, maiores detalhes serão apresentados ao longo deste trabalho.

Pecnik et al. (2012) apresentaram um estudo CFD tridimensional de um compressor centrífugo que opera com CO₂ na região termodinâmica ligeiramente acima do ponto crítico vapor-líquido cuja geometria é baseada no compressor experimental existente. As simulações CFD foram realizadas com um código Navier-Stokes com médias de Reynolds, completamente implícito, baseadas em formulação de volume finitos, com posterior validação do código.

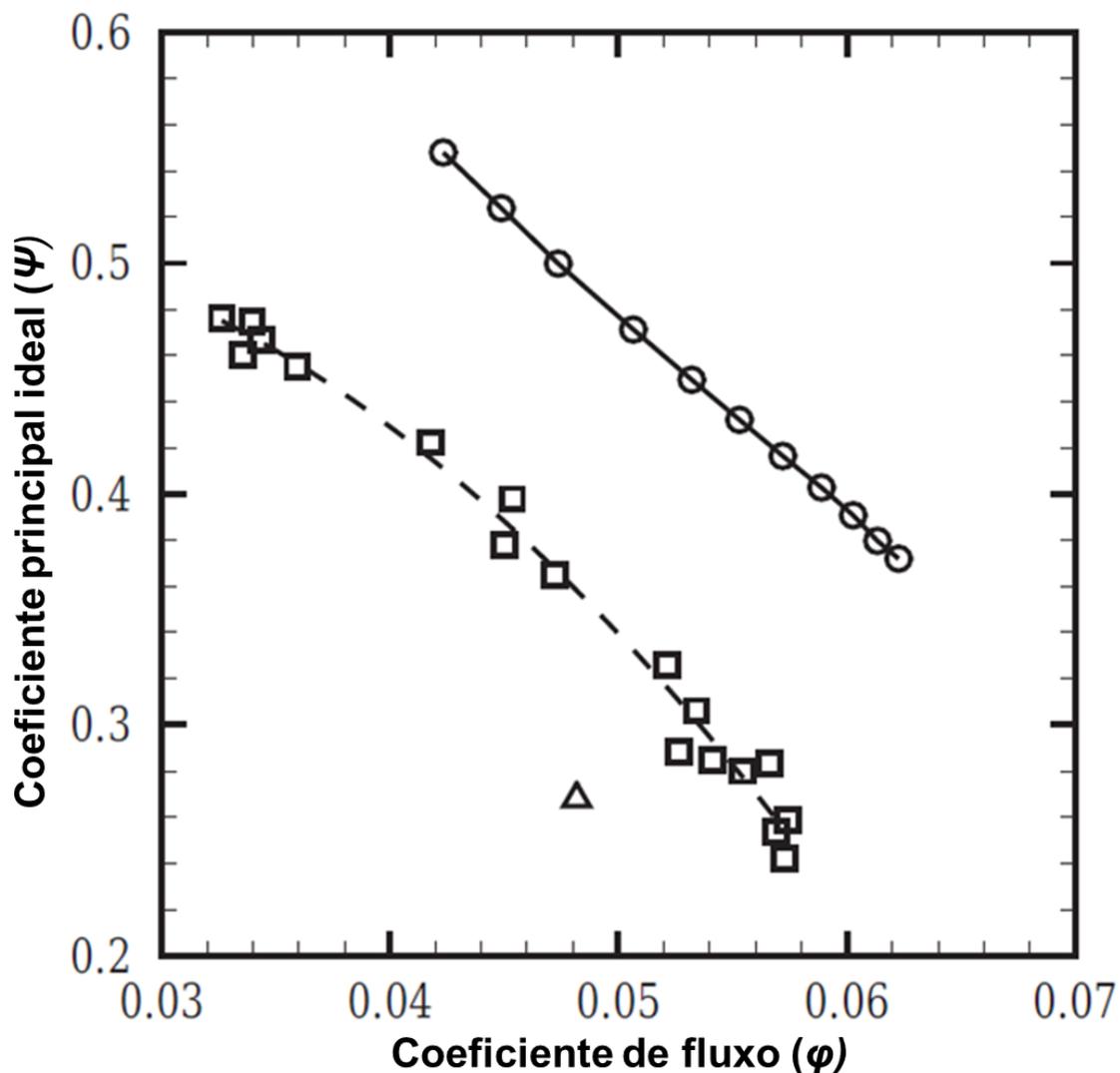
A equipe de pesquisa do Instituto de Tecnologia de Tóquio criou uma instalação de ciclo S-CO₂ de pequena escala que trabalha com temperaturas de entrada de turbinas de até 550 K, cujo conceito de *design* é apresentado em (Utamura et al., 2010). No entanto, devido aos efeitos de escala (instalação pequena para teste), a potência gerada na turbina é quase totalmente compensada pelas perdas mecânicas e elétricas, obtendo uma saída líquida de algumas centenas de quilowatts, longe do valor bruto de 18 kW.

Na linha deste trabalho, atenção especial é dada ao compressor desta instalação descrita na referência (Utamura et al., 2012), onde os autores concluíram que “o desempenho do compressor na fase líquida supercrítica alcançou o mais alto desempenho em ambos os experimentos e previsões do programa de simulação CFD”.

Um pouco depois, Pecnik et al. (2013) realizaram um novo estudo da dinâmica de fluidos de turbo máquinas operando com fluidos caracterizados por um comportamento termodinâmico complexo. Neste caso, o objetivo foi desenvolver uma metodologia completa para auxiliar o projeto aerodinâmico de turbo máquinas ampliadas para centrais de turbinas a gás supercríticas. Para validação foi feita uma comparação com dados experimentais do *Sandia*. A Figura 2.2 compara o desempenho simulado do compressor para a condição operacional considerada (triângulo), com dados experimentais (quadrados) e com uma análise anterior realizada pelos autores que considera apenas o impelidor (sem folga no *Shroud*) e um difusor (círculos).

O coeficiente principal (*Head coefficient* - Ψ) ideal é exibido versus o coeficiente de fluxo (*Flow coefficient* - ϕ). Para a condição simulada $\phi = 0,04817$, a diferença relativa entre ajuste de dados experimentais e resultados numéricos foi reduzida de 38% para 25%. Um coeficiente de cabeça muito menor foi calculado com relação aos resultados anteriores e uma possível explicação é que, nas simulações na qual não se considera a folga, a superfície do *Shroud* estava girando na mesma velocidade do *Hub* e das lâminas, portanto, foi adicionada mais quantidade de movimento ao fluxo através das paredes sólidas.

Figura 2.2 - Coeficiente principal ideal versus coeficiente de fluxo: dados experimentais (quadrados) com curva de ajuste (linha tracejada), dados numéricos (círculos) e simulação atual (triângulo).



Fonte Pecnik et al. (2013)

O Grupo de Máquinas e Motores Térmicos da Universidade de Sevilha (GMTS) está tentando contribuir para a comunidade de dióxido de carbono supercrítico, não apenas com estudos teóricos e numéricos, mas também participando de projetos experimentais como o desenvolvido em consórcio com a *Altran Technologies SA* e destinado a projetar um túnel de vento com CO_2 pressurizado e um *design* modular S-CO_2 , onde será possível analisar ciclos simples e recuperativos, bem como os estágios do compressor radial em *loops* independentes (Monje, 2014).

Recentemente, Wang et al. (2017) projetaram e investigaram numericamente o comportamento de um compressor centrífugo de S-CO₂ de grandes potência e vazão mássica de entrada. Uma análise numérica completa do campo de fluxo instável no compressor centrífugo foi realizada em um *Software* comercial. A força em uma única pá de rotor foi monitorada para investigar os componentes de frequência da força excitante, para posterior análise de vibração. Além disso, o torque, a potência de saída, a relação de pressão e a eficiência isentrópica na condição intermediária estável e instável são calculados e comparados com a condição de projeto para medir a validade do projeto.

A Tabela 2.2 sumariza as contribuições aqui apresentadas em ordem cronológica, apresentando a natureza do estudo e um breve resumo.

Tabela 2. 2 - Resumo dos principais trabalhos a cerca de compressão de S-CO₂ apresentados no trabalho.

Ano	Autor(es)	Tipo	Descrição
2008	Wright et al.	Experimental	Loop de teste de compressão S-CO ₂ em pequena escala, destinado a validar modelos empregados no projeto de turbo máquinas e trocadores de calor para aplicações nucleares.
2012	Pecnik et al.	Numérico	Simulações e validação com código CFD usando Navier-Stokes baseado em Reynolds, completamente implícito e formulação de volume finitos de compressor centrífugo com S-CO ₂ cuja geometria é baseada em compressor experimental existente.
2012	Utamura	Experimental e Numérico	Instalação de ciclo S-CO ₂ de pequena escala com expansão e compressão.
2013	Pecnik et al.	Numérico	Desenvolvimento de metodologia para auxiliar o projeto aerodinâmico de turbo máquinas para centrais de turbinas a gás supercríticas com validação comparando-se aos dados experimentais.
2014	Monje	Experimental e Numérico	Projeto de túnel de vento com CO ₂ pressurizado e um <i>design</i> modular S-CO ₂ para análise de ciclos simples, recuperativos e estágios do compressor radial em <i>loops</i> independentes.
2017	Wang, et al.	Numérico	Análise numérica completa do campo de fluxo instável no compressor centrífugo de S-CO ₂ de grande potência de entrada e fluxo de massa com método do volumes finitos. A força em uma única pá do rotor foi monitorada para investigar componentes de frequência da força excitante, para análise de vibração. Torque, potência de saída, razão de pressão e eficiência isentrópica são comparados às condições de projeto para validação.
2018	Dresser-Rand	Comercial	Desenvolvimento de refrigeração avançada inter-estágio para compressores centrífugos em linha de multi-estágios. Desenvolvimento de compressor com S-CO ₂ supersônico para reduzir custo de captura e compressão de CO ₂ .

Fonte: A Autora (2020)

2.2. O projeto desenvolvido no Sandia National Laboratories

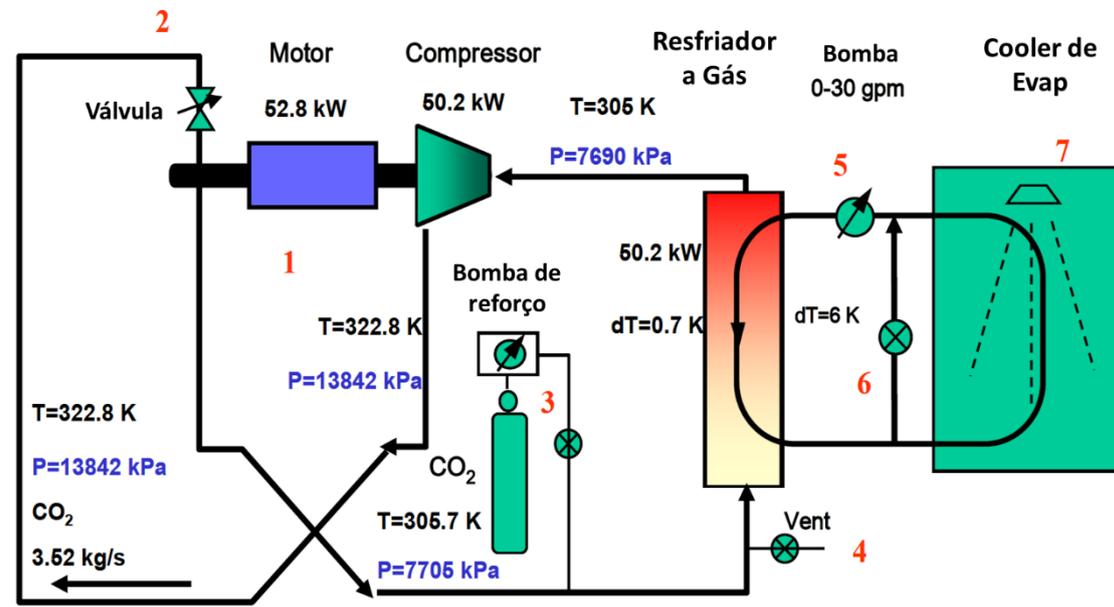
O *Sandia National Laboratories* tem investigando ciclos Brayton avançados com fluidos de trabalho supercrítico para uso com fontes de calor solar, nuclear ou fóssil. Em específico para o uso do ciclo supercrítico de CO₂ há o potencial de alta eficiência na faixa de temperatura de interesse para essas fontes de calor, além de ser muito compacto e com reduzido custo de capital.

O primeiro passo no desenvolvimento destes ciclos avançados foi a construção de um *loop* de ciclo Brayton de pequena escala, financiado pelo programa *Research & Development* Dirigido pelo Laboratório, para estudar a questão chave da compressão perto do ponto crítico de CO₂. O relatório divulgado por Wright et al. (2010) abrange o projeto do *loop* de pequena escala, descreve os principais componentes, apresenta modelos de desempenho do sistema, incluindo perdas, vazamentos, desempenho de compressor, previsão de mapa de fluxo e finalmente descreve os resultados experimentais que foram gerados.

As principais questões para o ciclo Brayton supercrítico incluem o comportamento do fluido no processo de compressão e o controle do sistema próximo ao ponto crítico. Perto do ponto crítico, observa-se um comportamento muito distante do modelo de gás ideal, o que muitas vezes significa que os modelos padrão para analisar o desempenho do compressor não podem ser usados. Assim, um dos objetivos do programa é desenvolver dados que possam ser usados para validar as ferramentas e modelos que são usados para projetar a turbo máquina. Outros problemas de tecnologia de suporte também foram investigados, incluindo o tipo de rolamento, resfriamento do rolamento, tecnologias de vedação e perdas de arraste do rotor.

Um layout esquemático do *loop* de compressão, incluindo o *loop* de resfriamento de água, é fornecido na Figura 2.3. As estimativas dos pontos de estado, com base na análise do ciclo termodinâmico, que mostra a temperatura, pressão, vazão e nível de potência dos componentes, também são fornecidas. O *loop* de compressão consiste em um compressor radial acionado por motor, um medidor de vazão (localizado após o compressor), um orifício de queda de pressão (no lugar da turbina) e um resfriador de gás. O compressor principal neste circuito é projetado para operar de 100 a 80.000 rpm, temperaturas e pressões de entrada variando de 307 a 313K e 7,6 a 9,2 MPa e vazões mássicas de 0,454 a 3,5 kg/s (Wright et al., 2010).

Figura 2.3 – Esquema do *loop* de compressão supercrítico usando um motor de 50 kW acionando um compressor radial a 75.000 rpm com vazão de 3,51 kg / s.



Fonte: Wright et. al, 2010.

3. Materiais e Métodos

A metodologia abordada começa com a modelagem CFD usando o método de volumes finitos (FVM) no *Software* ANSYS TurboSystem®, apresentando as equações governantes e modelo de turbulências abordado no estudo. A seguir são apresentadas as formas de construção do domínio computacional, com suas condições e considerações pertinentes para garantir a convergência do modelo. As tabelas de propriedades termodinâmicas para os casos foram geradas com o uso de um programa para propriedades reais do gás que possui uma biblioteca de código aberto para a determinação das propriedades termodinâmicas. Para a geração da geometria do impelidor criação dos domínios de malhas são utilizados pacotes específicos dentro o *Software*.

3.1. Modelagem CFD

Para entender melhor como funciona a simulação no *Software*, foi feita uma divisão do processo em três etapas: pré-processamento; solver; pós-processamento.

O pré-processamento compreende todas as etapas anteriores ao cálculo, definindo as entradas, os modelos e os métodos necessários para o solver:

- Geometria: criação do domínio computacional usando o *software* CAD;
- Geração de malha: discretização da geometria em células elementares;
- Seleção de modelos físico-químicos de acordo com os fenômenos de interesse;
- Material: especificação de propriedades;
- Definição das condições de contorno.

Deve-se tentar configurar o modelo numérico a ser usado pelo solver de forma que não afete a solução final, mas, ao contrário, apenas ajude a melhorar o processo computacional. No entanto, certo direcionamento pode se tornar crucial para atingir a convergência em problemas altamente complexos, como é o caso da maioria das simulações com dióxido de carbono supercrítico.

Uma vez que a solução tenha convergido, todas as magnitudes relevantes do campo de escoamento estarão disponíveis no pós-processamento: relatórios numéricos,

gráficos de contorno e vetoriais, gráficos 2D, linhas de fluxo e até mesmo animação quando o caso depende do tempo.

Em antagonismo à realidade de instalações experimentais que requerem instrumentação de alta qualidade específica para cada grandeza e apenas adquirem dados para um determinado local, o pós-processamento de uma solução de CFD permite obter qualquer dado em qualquer local dentro do domínio do escoamento.

Além disso isso é feito sem perturbar o fluxo como o instrumento faria. Contudo, deve-se notar que a fidelidade dos resultados é fortemente dependente de como o pré-processamento é feito, de modo que um pré-processamento incorreto produz saídas de pós-processamento irreais.

3.2. Método de Volumes Finitos

Existem três tipos distintos de técnicas de solução numérica: diferenças finitas, elementos finitos e métodos espectrais. O *Software* emprega o método de volumes finitos (FVM), parte das técnicas de diferenças finitas, que consiste em resolver as equações de conservação de fluxo nos volumes de controle diferenciais que compõem um todo contínuo (Ameli et al., 2017).

Este método foi introduzido na década de 1970 e historicamente tem sido preferido para problemas de mecânica de fluidos, envolvendo, de forma geral, os seguintes passos:

- Decomposição do domínio em volumes de controle;
- Formulação das equações integrais de conservação para cada volume de controle;
- Aproximação numérica das integrais aplicando-se às variáveis nas faces com as informações das variáveis nos nós;
- Montar e resolver o sistema algébrico obtido.

O ponto de partida do método de volumes finitos é a decomposição do domínio em pequenos volumes de controle (VCs), onde as variáveis são alojadas nos nós. Usualmente, os volumes de controle e os nós são definidos com uma grade numérica, a malha, que consiste uma representação discretizada do domínio geométrico no qual o problema irá ser resolvido.

3.3. Equações Governantes

Para definir um bom modelo de escoamento de um fluido e transferência de calor, parte-se dos princípios básicos de conservação de massa, quantidade de movimento e energia. Isso leva às equações governantes do fluxo de fluido e uma discussão das condições auxiliares necessárias - condições iniciais e de contorno.

As equações governantes do fluxo de fluidos representam demonstrações matemáticas das leis de conservação da física: A massa de um fluido é conservada; A taxa de mudança de quantidade de movimento é igual à soma das forças em um fluido (segunda lei de Newton); A taxa de mudança de energia é igual à soma da taxa de calor, além da taxa de trabalho em uma partícula fluida (primeira lei de termodinâmica)(Versteeg & Malalasekera, 2016).

Benini et al. (2006) sugerem o uso de um modelo de fluxo em estado estacionário para impelidores, uma vez que as flutuações no fluxo de um compressor centrífugo são importantes apenas na folga do difusor, o que não é verificado para o impelidor sem difusor aqui estudado. Assim, definindo-se o fluxo foi como tridimensional, turbulento e compressível, no estado estacionário, é possível utilizar as equações de Navier-Stokes com média de Reynolds (RANS), em sua forma de conservação instantânea, para continuidade, quantidade de movimento e energia total em uma estrutura estacionária:

$$\nabla \cdot (\rho U) = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\rho U \times U) = -\nabla p + \nabla \tau + S_M \quad (2)$$

$$\nabla \cdot (\rho UI) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot (U \tau) + U \cdot S_M + S_e \quad (3)$$

onde τ é o tensor de tensão. Na equação da energia o termo de advecção usa a rotalpia (I) ao invés de entalpia total (Ansys, 2013), pois se considera um quadro rotacional. Assim, termos de rotação das turbo máquinas como forças centrífugas (S_{cf}), aceleração de Coriolis (S_{Cor}) e velocidades relativas também devem ser considerados

$$S_M = S_{M.rot} = S_{Cor} + S_{cf} \quad (4)$$

$$S_{cor} = -2\rho\omega \times U \quad (5)$$

$$S_{cfs} = -\rho \omega \times (\omega \times r) \quad (6)$$

onde, r é o vetor de localização e U é a velocidade relativa (ou seja, a velocidade considerando-se um referencial rotativo).

$$I = h_{stat} + \frac{1}{2}U^2 - \frac{1}{2}\omega^2 R^2 \quad (7)$$

3.4. Modelo de Turbulência

Estudos confirmam que os modelos de duas equações são a escolha mais comum, uma vez que são, de fato, o modelo completo mais simples de turbulência (Wilcox, 1998). Os modelos de duas equações $k-\varepsilon$ e $k-\omega$ usam a hipótese do gradiente da difusão para relacionar as tensões de Reynolds com os gradientes de velocidade média e a viscosidade turbulenta. A viscosidade turbulenta é modelada como o produto entre escalas de velocidades e comprimentos turbulentos.

Nos modelos de duas equações, a escala de velocidade de turbulência é calculada a partir da energia cinética turbulenta, que é fornecida a partir da solução de sua equação de transporte. A escala de comprimento turbulento é estimada de duas propriedades do campo de turbulência, geralmente a energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação. A taxa de dissipação da energia cinética turbulenta é fornecida a partir da solução de sua equação de transporte.

O modelo $k-\omega$ pressupõe que a viscosidade da turbulência esteja ligada à energia cinética da turbulência e à frequência turbulenta através da relação:

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \quad (8)$$

resolve duas equações de transporte, uma para a energia cinética turbulenta (k) e outra para a taxa de dissipação turbulenta (ω).

O modelo de turbulência $k-\omega$ com transporte de tensão de cisalhamento (*shear stress transport*) ($k-\omega$ SST) aplica o modelo clássico de $k-\omega$ para a parte interna da camada limite e o padrão $k-\varepsilon$ para a parte externa da camada limite e o fluxo livre (Menter, 1994). Ele incorpora o transporte da tensão turbulenta de cisalhamento e fornece previsões altamente precisas do início e da quantidade de separação de fluxo de

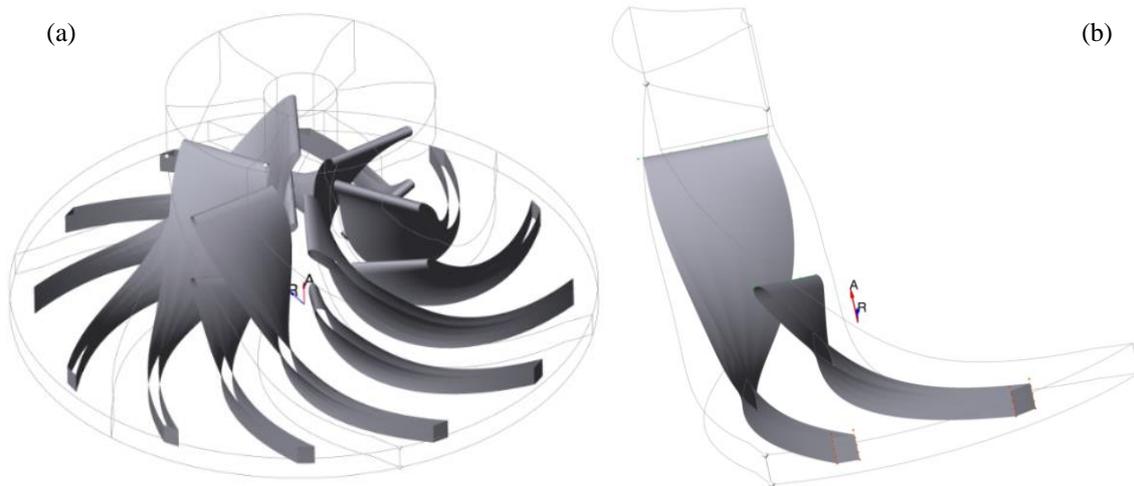
superfícies lisas em gradientes de pressão adversos. Isso resulta em uma melhor predição da viscosidade turbulenta (chamada de *Eddy viscosity* para este modelo de turbulência), com uma limitação do seu valor.

Essas características tornam esse modelo mais adequado para lidar com os fenômenos turbulentos no interior do compressor centrífugo (Casey et al., 2012). Considerando-se as tendências industriais em CFD, o modelo SST é considerado a opção mais adequada, desde que seja implementado um refinamento suficiente perto da parede. ($Y^+ < 2$). Contudo, o tratamento próximo à parede que utiliza funções de parede escaláveis é usado no *Software* e apresenta resultados consideravelmente bons mesmo para $Y^+ = 100$.

3.5. Domínio computacional e condições de contorno

Este estudo realizou uma análise de um compressor centrífugo em termos apenas de seu impelidor, uma vez que os efeitos benéficos da interação no desempenho geral do estágio advêm principalmente do bloqueio e escorregamento reduzidos no impelidor, não do próprio difusor (Shum et al., 2000). A geometria do compressor centrífugo de CO₂ da passagem de fluido através de todo o impelidor foi construída usando um pacote específico do *Software* (Fig. 3.1a). Devido às características periódicas e simetria geométrica, apenas uma parte periódica do impelidor foi calculada (Fig. 3.1b) e os resultados foram extrapolados para o restante da turbo máquina, diminuindo o número de elementos na grade total e, conseqüentemente, o custo computacional. O domínio periódico foi tratado como um quadro de referência rotacional, onde todas as propriedades foram calculadas por esse método e resolvidas com o *solver* (Ansys, 2013).

Figura 3.1 - Forma tridimensional do impelidor do compressor centrífugo de CO₂ (a) e do domínio computacional periódico (b).



Fonte: A Autora (2020).

3.5.1. Domínios de entrada e saída

O método para especificação da entrada escolhido foi o paramétrico, de forma que o domínio se estende até a lâmina, domínio principal, de forma independente. Desta forma garante-se que o primeiro permaneça parado enquanto o segundo efetua o movimento de rotação e evita, também, o problema de recirculação que ocorre na entrada do fluido através da lâmina.

O mesmo método de especificação foi escolhido para a saída, porém o menor valor possível foi escolhido para a localização deste domínio de forma a ficar o mais próximo do domínio principal possível, porém sem intersectá-lo, e manter uma distância tal que se evite fluxos muito perturbados que ocorrem no final das lâminas e não refletem precisamente o final do escoamento. A Figura 3.2 exhibe os limites de tais domínios onde a entrada é exibida em verde e a saída em vermelho.

Figura 3.2 - Domínios de entrada em verde e saída em vermelho definidos para o problema do escoamento.



Fonte: A Autora (2020)

3.5.2. Condições de Contorno

Um fluxo estacionário, tridimensional, compressível e turbulento de CO_2 real foi assumido usando uma abordagem de Navier-Stokes com média de Reynolds (RANS). A solução de estado estacionário das equações RANS é o resultado de um método de marcha numérica no tempo, então as condições iniciais tornam-se muito importantes na velocidade de convergência e estabilidade do método. Para todas as simulações, a intensidade turbulenta foi definida como 5%, segundo orientação do guia do usuário, para compressores.

A condição de não escorregamento foi imposta às superfícies sólidas no domínio, que também são consideradas adiabáticas e lisas. Um componente de velocidade normal à entrada foi ajustado para esta condição. A Tabela 3.1 resume as principais condições de contorno aplicadas à instalação de pré-processamento cujas informações de operação foram retiradas do relatório previamente apresentado pelo *Sandia* em (Wright et al., 2010).

Tabela 3. 1– Condições de contorno e de operação do compressor aplicadas ao escoamento.

Velocidade angular	55000 rpm (<i>backsweep</i>)
Pressão total na entrada	7,79 MPa
Temperatura total na entrada	306,4 K
Vazão mássica na saída	2,043 kg/s
Intensidade de turbulência	5%
Condição de parede	Sem escorregamento e adiabática
Rugosidade	lisa

Fonte: Wright et al. (2010)

3.5.3. Considerações numéricas do modelo

Existem dois aspectos que tornam as simulações do S-CO₂ menos estáveis: as grandes variações que as propriedades exibem perto do ponto crítico e o risco de condensação. Esses dois fatos exigem levar em consideração as seguintes recomendações para não falhar na convergência:

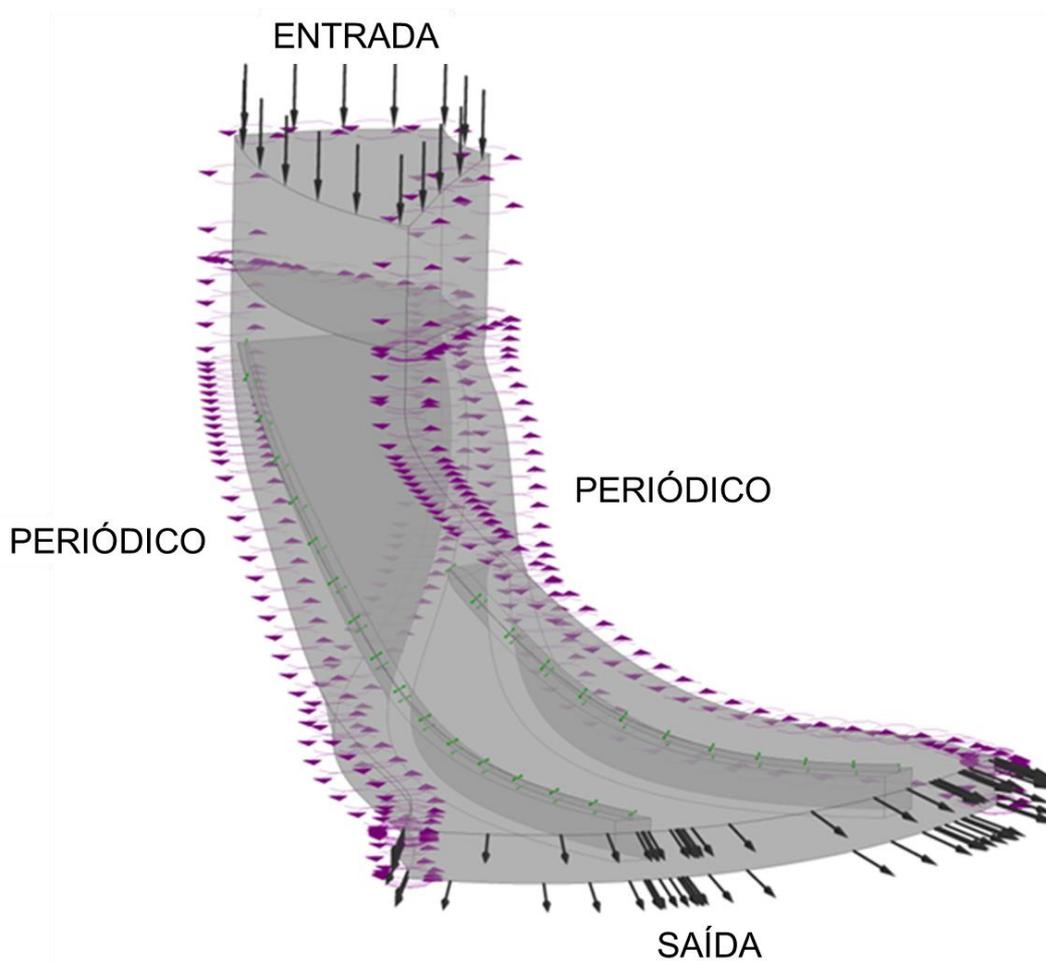
- Realizar o acoplamento pressão-velocidade ajustado com a interpolação de Rhie e Chow na qual os campos de pressão e velocidade são resolvidos ao mesmo tempo (método não iterativo), evitando o desacoplamento percebido em outros métodos (Ansys, 2013).
- Reduzir a fonte do erro da solução para se obter soluções numéricas mais precisas, evitando dispersões numéricas. Uma estratégia eficaz, indicada pelo guia do usuário para o *solver* é aumentar a precisão da ordem de aproximações discretas. Assim, para a discretização dos termos de advecção, utilizou-se um esquema de alta resolução que compreende uma mistura entre os esquemas de *upwind* de primeira ordem e diferenças centradas de segunda ordem (Yeoh & Tu, 2019). Um procedimento baseado no princípio de limite

de Barth & Jespersen (1989) foi aplicado para determinar a proporção necessária para a avaliação dos fluxos advectivos.

- Aplicar a relaxação da temperatura como forma de evitar picos de temperatura ao longo do escoamento.

Após ajustados todos os parâmetros, têm-se uma prévia do desenvolvimento do escoamento. A figura 3.3 ilustra tal cenário considerando os domínios de entrada, saída e periódicos.

Figura 3.3 – Prévia do escoamento.



Fonte: A Autora (2020)

3.6. Propriedades termodinâmicas do fluido

Como as propriedades de fluidos próximas ao ponto crítico se desviam fortemente da lei do gás ideal e, ainda, mais importante, exibem fortes variações, uma

descrição termodinâmica precisa do fluido deve ser feita para poder simular fluxos que evoluem nessa região e para ajudar o projeto de turbo máquinas não convencionais. Para explicar a variação não linear das propriedades termo físicas do S-CO₂ é interessante fazer isso de uma extensa biblioteca para o cálculo de propriedades de fluidos e misturas (Pecnik et al., 2012).

Para avaliar as propriedades termodinâmicas do CO₂ supercrítico como gás real, o *software* faz uso das equações de estado de Redlich-Kwong modificadas por Aungier (2000). Trata-se de uma versão modificada que inclui parâmetros de correção para melhorar a precisão da equação próxima ao ponto crítico. Este autor relata uma redução de cerca de 50% no erro quadrático médio para o cálculo das propriedades próximas ao ponto crítico.

As equações de estado para dióxido de carbono apresentadas por Span & Wagner (1996) são, contudo, as mais precisas até o momento e estão disponíveis na biblioteca de código aberto (Bell et al., 2013). No trabalho por eles desenvolvido foi feita a revisão dos dados disponíveis sobre propriedades termodinâmicas do dióxido de carbono e apresentada uma nova equação de estado na forma de uma equação fundamental explícita na energia livre de Helmholtz. Esta equação é geralmente dividida em uma parte associada ao comportamento que se assemelha ao gás ideal e outra associada ao seu comportamento assemelhando-se ao gás real (chamada comportamento residual). Um interesse especial foi dado à parcela residual com foco na descrição da região crítica e no comportamento de extrapolação da formulação (Span & Wagner, 1996). Essa biblioteca foi escolhida para a implementação da análise termodinâmica, vinculada a um programa escrito na linguagem C # (Mello, 2020).

O formato da tabela de propriedades reais do gás (*Real Gas Properties* - RGP) foi descrito em por Bell et al. (2013). O arquivo é composto por duas seções chamadas cabeçalho e dados. A primeira contém informações sobre o fluido (especificação de pontos críticos e triplos), faixas de pressão e temperatura e o número de pontos apresentados em uma tabela de duas dimensões.

Para a simulação do compressor de CO₂, é necessária uma especificação adequada das tabelas de superaquecimento. Um conjunto de nove tabelas de superaquecimento está presente na seção de dados na ordem mostrada na Tabela 3.2

Tabela 3. 2 - Tabelas de superaquecimento na seção de dados de um arquivo RGP.

Tabela de superaquecimento	Propriedade	Símbolo
1	Entalpia específica	$h (T,P)$
2	Velocidade do som	$c (T,P)$
3	Volume específico	$v (T,P)$
4	Calor específico a volume constante	$c_v (T,P)$
5	Calor específico a pressão constante	$c_p (T,P)$
6	Derivada parcial da pressão em relação ao volume específico a temperatura constante	$(\partial P/\partial v)_T (T,P)$
7	Entropia específica	$s (T,P)$
8	Viscosidade dinâmica	$\mu (T,P)$
9	Condutividade térmica	$k (T,P)$

Fonte: Mello (2020)

O programa recebe parâmetros de entrada exigidos, inseridos pelo usuário, na linha de comando e no formato adequado para gerar a tabela RGP que contém as nove tabelas necessárias, uma para cada propriedade.

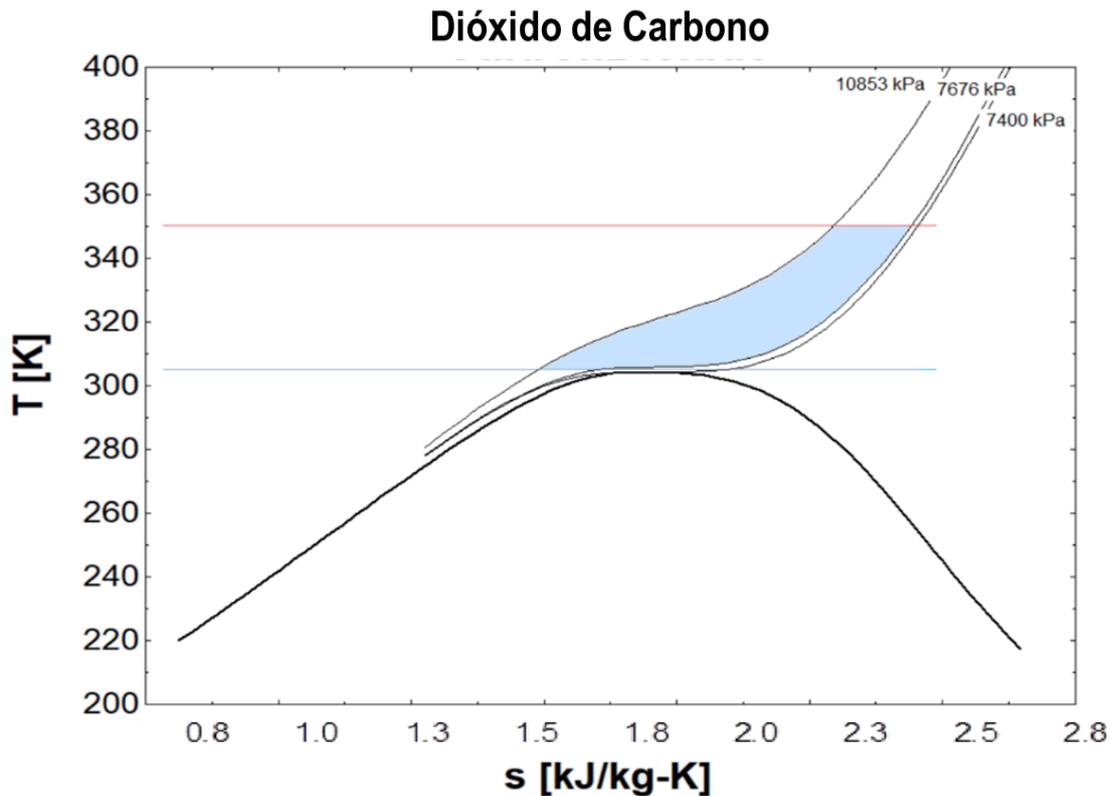
Deve-se informar o nome do fluido de acordo com especificações do programa; o número de divisões desejado para pressão e temperatura com relação aos intervalos fornecidos; valores mínimo e máximo de pressão e temperatura (em Pascal e Kelvin respectivamente); nome do arquivo que será gerado.

A primeira parte da tabela de superaquecimento apresenta os valores de temperatura e pressão para os quais a propriedade está disponível. A seguir, são fornecidos os valores da propriedade da referida tabela. Em seguida, é fornecida a temperatura de saturação correspondente a cada valor de pressão, seguida pela propriedade em condições de saturação.

Eventualmente, dependendo da faixa de temperatura e pressão para a qual a tabela foi gerada, a tabela de superaquecimento deve ser cortada devido à interseção com a linha de vapor de saturação.

Esta situação, no entanto, não ocorre para as faixas de pressão e temperatura simuladas (temperatura e pressão de entrada de 305,5 K e 7,676 MPa e temperatura e pressão de saída de 323K e 10,853 MPa). A Figura 3.4 apresenta a região coberta pela tabela gerada para simulações de CO₂ (em azul), com temperaturas superiores e inferiores limitadas por linhas em vermelho e azul, respectivamente.

Figura 3. 4 - Região coberta pela tabela gerada para simulações de S-CO₂.



Fonte: A Autora (2020)

O estado de referência adotado foi de 25 °C e 101,325 KPa (1atm) e o modelo de transferência de calor escolhido foi o da energia total, que modela o transporte de entalpia e inclui efeitos de energia cinética.

3.7. Geração da Geometria

Para a geração da geometria estudada foi usado um pacote especializado e fácil de usar para o rápido *design* 3D de componentes de máquinas rotativas.

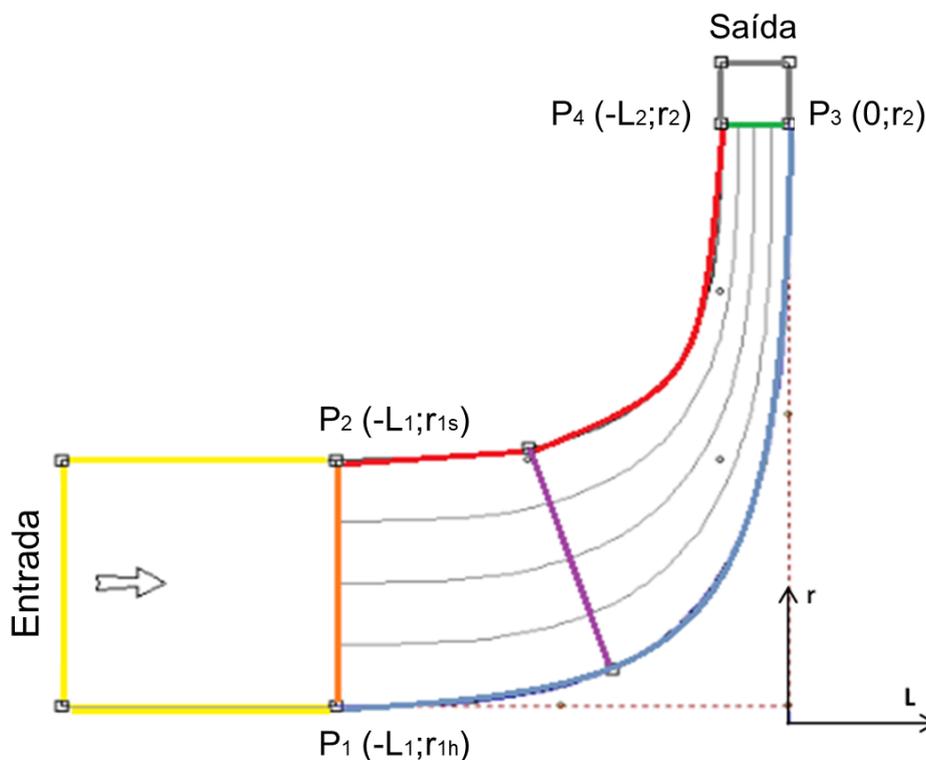
Este pacote possui um modo de operação ângulo / espessura, que fornece o ambiente de *design* para as lâminas radiais. Uma vista meridional é usada para definir a lâmina no espaço axial X radial. A partir dessa definição, as linhas de fluxo *Hub* e *Shroud* são geradas e serão necessárias para todas as outras visualizações. Ainda nesta

etapa, o número e a espessura das lâminas são inseridos, bem como o ângulo de curvatura.

Com esses dados geométricos iniciais, é possível ter um esboço inicial da geometria desejada. As curvas *Hub* e *Shroud* obtidas são então convertidas em curvas de Bezier, pois é a opção mais comum usada para definir esses contornos (Casey et al., 2014). O fluxo de entrada é assumido na direção axial, enquanto o fluxo de saída é contido em um plano normal ao eixo (máquina puramente radial).

A Figura 3.5 apresenta a vista meridional com as linhas *Hub* e *Shroud* e o desenho do canal do impulsor feito pelas curvas de Bezier em que as linhas amarela e cinza representam, respectivamente, a entrada do domínio de passagem de fluido e a saída; as linhas laranja e roxa representam a borda principal das lâminas principal e secundárias (*splitter*), respectivamente, e as linhas verdes são a borda posterior da lâmina, enquanto as linhas azul e vermelha representam o *Hub* e *Shroud*, respectivamente.

Figura 3.5 - Vista meridional com linhas *Hub* e *Shroud* e canal do impulsor feito pelas curvas de Bezier



Fonte: A Autora (2020)

Para adicionar as lâminas secundárias é definido um espaçamento de 50% entre as lâminas principais com a devida razão de comprimento (da corda) entre elas, no bordo de fuga (*Trailing Edge*) que é, por sua vez, considerado como *cut-off*, enquanto o bordo de ataque (*Leading Edge*) é considerado com formato elíptico.

A Tabela 3.3 apresenta os parâmetros geométricos que definem o compressor supercrítico de CO₂ do *Sandia*, que foi utilizado para validação. Os dados do impelidor são explicitamente indicados nos documentos de Wright et al. (2010); Meroni et al. (2018) e Pecnik et al. (2012). Dados experimentais adicionais, bem como condições de operação são encontrados em Vilim (2010) e Monje (2014). Devido à escassez de informações capazes de gerar uma geometria fidedigna do difusor, optou-se por não incluí-lo neste trabalho.

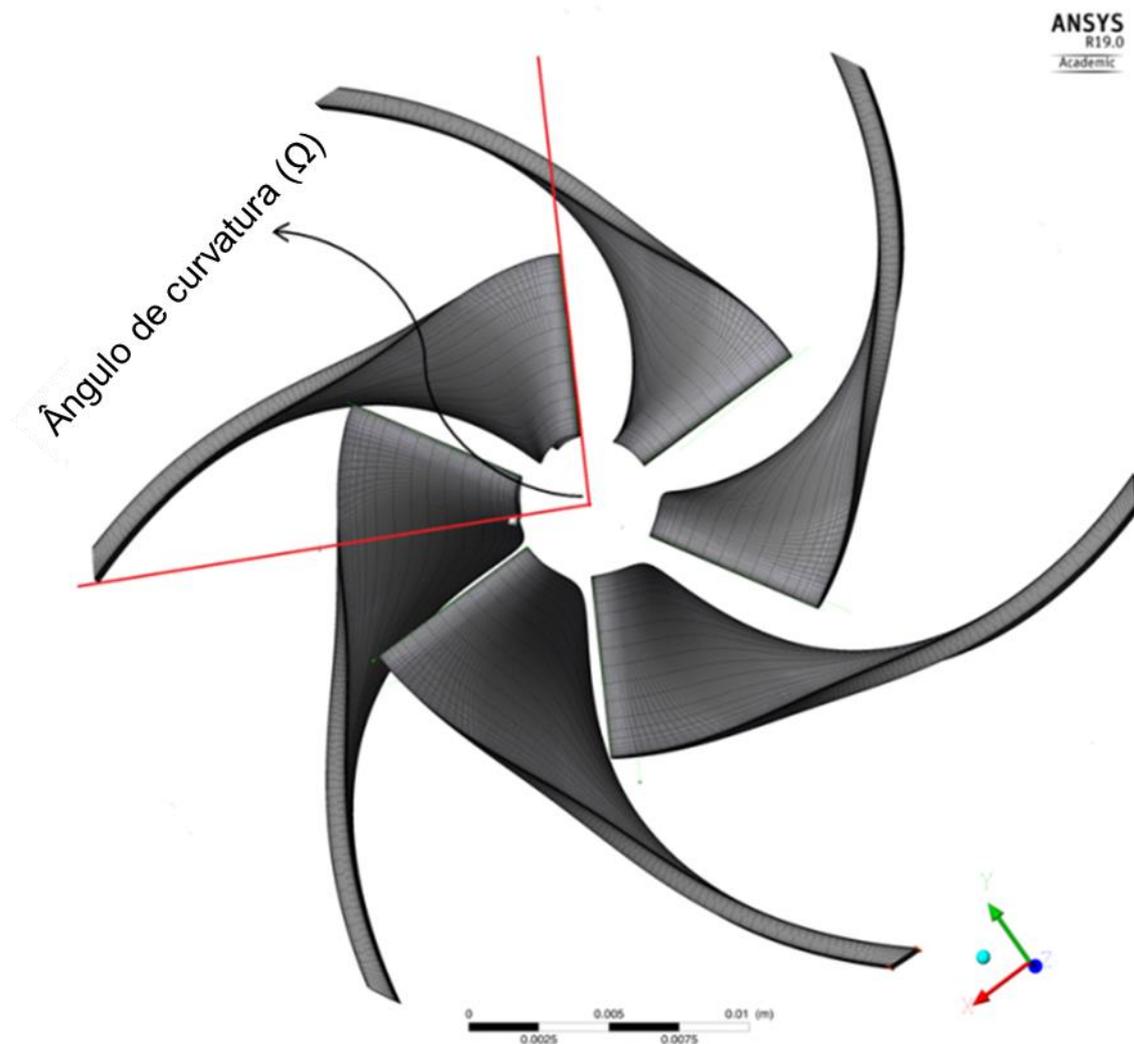
Tabela 3.3 – Parâmetros geométricos utilizados para construção da geometria do impelidor *Sandia*

Parâmetro	Valor	Símbolo
Raio de entrada do <i>Hub</i>	2,537585 mm	r_{1h}
Raio de entrada do <i>Shroud</i>	9,372047 mm	r_{1s}
Comprimento axial do impelidor	11,37 mm	L_l
Raio da saída	18,68170 mm	r_2
Largura da lâmina na saída	1,71 mm	L_2
Comprimento da corda da lâmina principal	25 mm	L_b
Razão entre cordas das lâminas secundárias e principal	0,3	L_s/L_b
Número de lâminas principais	6	N_b
Número de lâminas secundárias	6	N_s
Ângulo de curvatura	87,5°	Ω
Espessuras das lâminas	0,762 mm	B_{thk}
Folga no <i>Shroud</i>	0,254 mm	ϵ
Ângulo de entrada do fluxo no <i>Hub</i>	40°	β_{1h}
Ângulo de entrada do fluxo no <i>Shroud</i>	40°	β_{1s}
Ângulo de saída do fluxo no <i>Hub</i>	50°	β_{2h}
Ângulo de saída do fluxo no <i>Shroud</i>	50°	β_{2s}

Fonte: A Autora (2020)

São necessários quatro ângulos β para esta opção, tanto na entrada quanto na saída para definirem a distribuição de ângulo das lâminas que juntamente com o ângulo de curvatura (*wrap angle* - Ω) definem o perfil das lâminas. Para um melhor entendimento desses ângulos a Figura 3.6 traz a localização do ângulo de curvatura na geometria gerada.

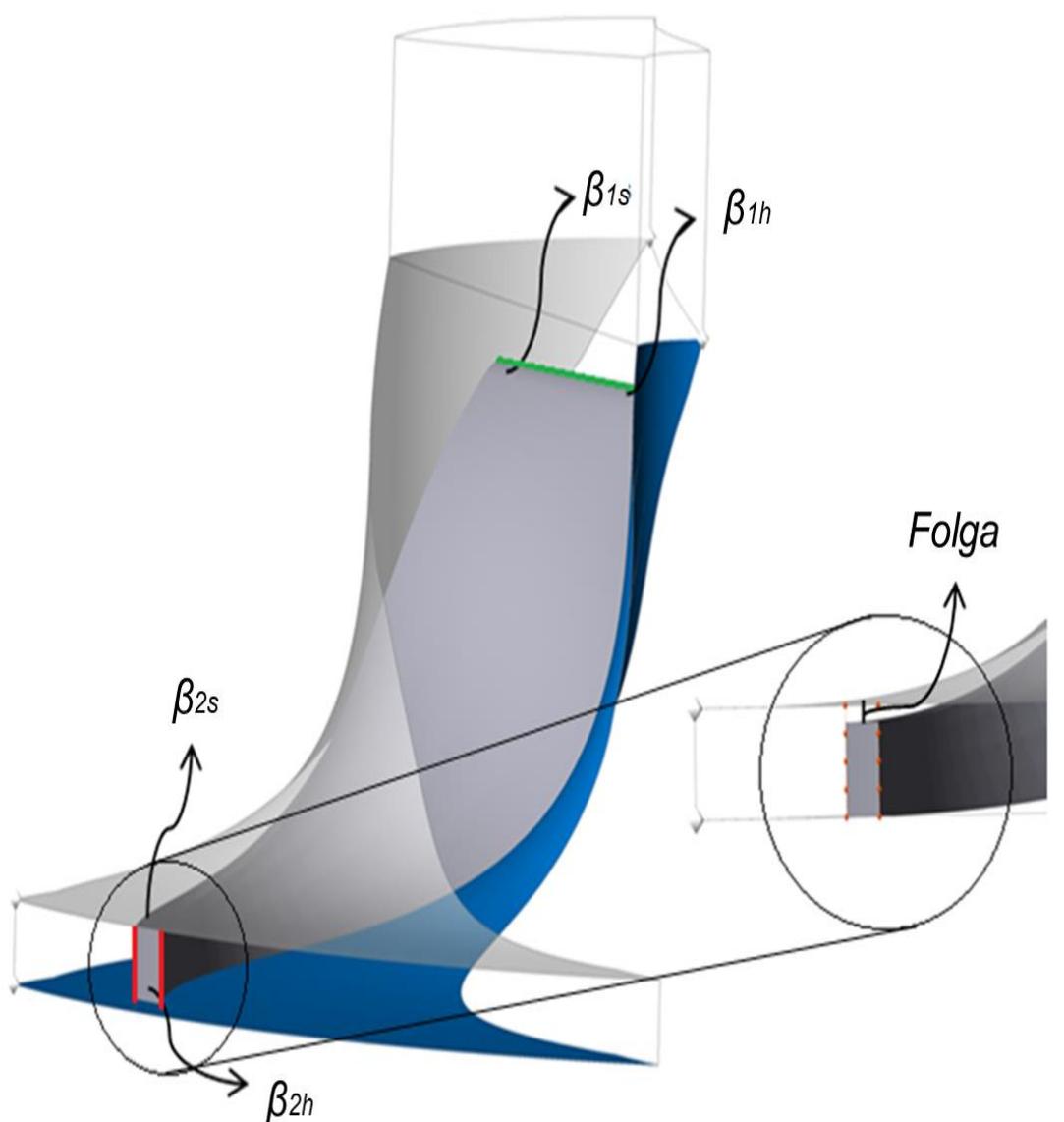
Figura 3. 6 - Ângulo de curvatura em vista superior.



Fonte: A Autora (2020)

Já a Figura 3.7 apresenta os ângulos β que definem as direções de entrada e saída do fluxo no *Hub* (azul) e *Shroud* (cinza). Além disso, é possível identificar os bordos de ataque (verde) e de fuga (vermelho) e a folga (*tip clearance*) no *Shroud*.

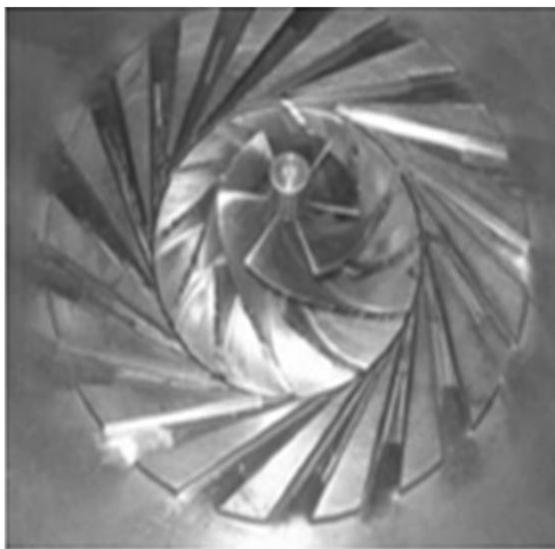
Figura 3.7 - Ângulos β de entrada (1) e saída (2) no *Hub* (em azul) e *Shroud* (cinza), bordos de ataque (verde) e de fuga (vermelho) e folga no *Shroud*.



Fonte: A Autora (2020)

Após esse processo a geometria padrão fornecida pelo *software* é considerada válida. A Figura 3.8 traz este comparativo obtido no relatório do *Sandia* (Wright et al., 2010).

Figura 3. 8 – Comparativo entre impelidor com difusor *Sandia* (a) e geometria do impelidor gerada em 3D (b).



Fonte (a): Wright et al. (2010)



Fonte (b): A Autora (2020)

3.8. Geração de Malhas

Malhas não estruturada baseada em células tetraédricas foram analisadas por Monje (2014) e foi verificado um alto risco de divergência numérica com seu uso. Devido à dissimilaridade entre a forma da célula e a geometria do domínio fluido, um número maior de elementos é necessário para malhas não estruturadas do que para as estruturadas, o que significa que as células hexaédricas podem ser adaptadas ao canal de fluxo tornando-as mais longas. Além disso, elas são adaptadas em passo e extensão às exigências físicas do problema, ou seja, perto das regiões da parede.

De fato, dos trabalhos já realizados no campo da análise numérica de turbo máquinas para S-CO₂, aponta-se que é possível utilizar malhas estruturadas como Munroe et al. (2009) ou híbridas como em Pecnik et al. (2012); Pecnik et al. (2013) e Pecnik et al. (2015) com resultados satisfatórios.

As malhas híbridas permitem variar a densidade da malha, combinando regiões com células hexa e tetraédricas no mesmo domínio computacional, de acordo com as necessidades do problema sem afetar outras regiões do domínio de fluido.

Quando se usa malhas estruturadas, projetar o refino da camada limite pode trazer um número desnecessariamente grande de elementos. Isto pode eventualmente gerar células com alta razão de aspecto implicando divergência numérica. Contudo, esta

questão pode ser superada através de uma solução final atingida pelo método passo a passo, isto é, simulações com malhas mais grosseiras servindo como um direcionamento inicial para as simulações com malhas mais refinadas, incluindo a camada limite. Assim, as malhas estruturadas hexaédricas são consideradas a seleção mais adequada. A malha foi criada com um pacote dedicado especializado em geração de malhas estruturadas para turbo máquinas, no qual é possível escolher especificamente a opção de compressor radial.

O número de Reynolds (baseado na altura da lâmina) é calculado como o valor médio entre a entrada e a saída. Este parâmetro é empregado pelo *software*, juntamente com uma parede desejada Y^+ , para calcular a distribuição de camadas prismáticas na malha da camada limite, de tal forma que quanto maior o número de Reynolds, menor a primeira camada será para um mesmo deslocamento Y^+ . Em resumo, uma vez definido o número de Reynolds, o refinamento da camada limite é controlado no pacote por meio *Offset* do Y^+ . Novamente o estudo apresentado por Monje (2014), demonstrou bons resultados para números de Reynolds por volta de 10^8 , sendo este valor o usado para as simulações.

O método fator de tamanho global da malha (*Global Size Factor*) define o tamanho geral da malha e foi aplicado para aumentar a resolução desta. Contudo, a alteração no tamanho geral da malha não é linear. Assim, pode-se alterar o tamanho da malha ou o refinamento da camada limite ou fazer algum refinamento de borda local na malha, sem que o fator de tamanho global se altere, contudo o tamanho geral da malha poderá ter sido alterado.

Diante desta situação um tratamento automático próximo à parede foi aplicado. Conforme recomendado em Ansys (2013), a seleção de uma topologia específica resulta de uma abordagem de tentativa e erro, no entanto, em seu estudo Monje (2014) apontou que a topologia automática otimizada geralmente apresenta os melhores resultados e foi, portanto, a escolhida. O controle do refino da camada limite foi aplicado usando o método de proporcionalidade ao tamanho da malha.

Esta opção controla o número de elementos na região da camada limite na proporção dos valores especificados para um fator base (*Factor Base*) e mantém taxas de expansão semelhantes quando o fator de tamanho global for alterado.

Assim, para a construção da topologia os parâmetros gerais da malha foram mantidos constantes para todas as malhas criadas, enquanto um delicado ajuste no fator de tamanho da malha e no fator base para a camada limite foi feito para atingir o

tamanho de malha desejado, de forma a atender os requisitos de qualidade apontados pelo *Software*. A tabela 3.4 traz os dados específicos de cada malha computacional gerada.

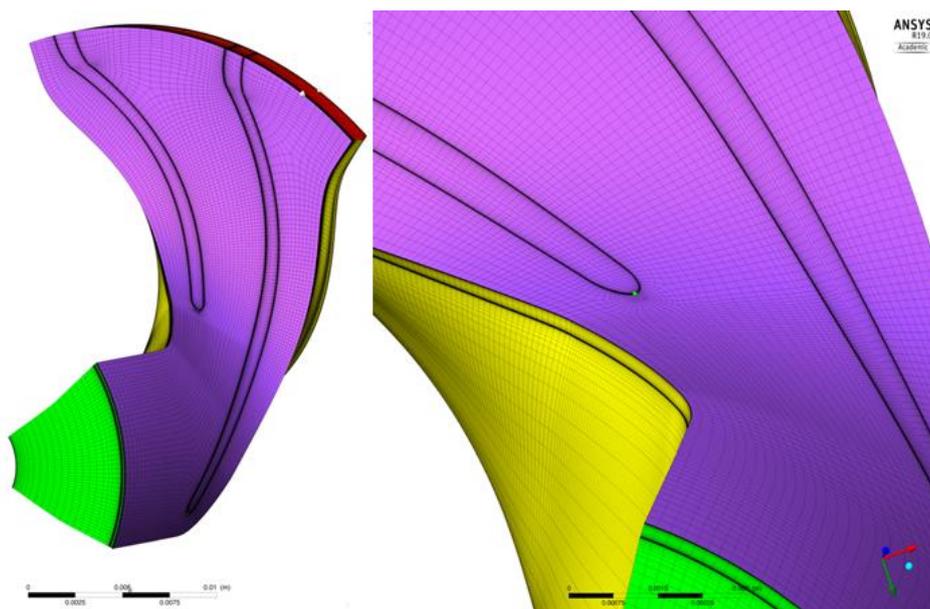
Tabela 3. 4 – Dados das Malhas geradas

Malha	Grosseira	Intermediária	Refinada
Nº de Elementos	886.440	2.032.950	4.846.402
Fator de tamanho global	1,168	1,4	1,83
Fator base	2,7	2,8	3,4

Fonte: A Autora (2020)

Em termos de qualidade da malha, segue-se a sugestão de Ansys (2013) e Ansys, (2012) que leva em consideração a ortogonalidade, a expansão e a proporcionalidade da malha. Valores de $Y+$ também são investigados. Apenas 5,8% dos elementos têm uma taxa de proporção (*aspect ratio*) acima de 1.000 (nível máximo sugerido rodando com dupla precisão) e o ângulo ortogonal atende às faixas sugeridas (entre 15° e 165°). A malha completa do impulsor é mostrada na Figura 3.9.

Figura 3. 9 – Domínio da malha com uma vista detalhada do refinamento na borda de ataque da lâmina secundária no *Shroud*.



Fonte: A Autora (2020)

4 Resultados e Discussões

O método de índice de convergência de malha (GCI) é aqui aplicado ao estudo de independência de malha. Os resultados em 3D do CFD para o impelidor *Sandia* foram validados por comparação com os resultados experimentais e são feitas discussões a respeito dos resultados do escoamento.

4.1. Estudo de independência de malha

Dentre todas as fontes de incertezas associadas à simulação de CFD com S-CO₂ que precisam ser mitigadas, aquela que se deve ao tamanho da malha, merece especial atenção de forma quantitativa.

O método de índice de convergência de malha (*Grid Convergence Index* - GCI) se baseia na extrapolação de Richardson (ER), estimando um valor da variável correspondente a uma malha infinitamente fina e calcula os desvios da solução obtida. A metodologia exige a simulação do mesmo caso em três malhas diferentes com taxa de refinamento mínimo de 1,3, às quais a ER é aplicada. Este método é escolhido uma vez que é considerado um robusto para o estudo da densidade da malha (Celik et al., 2008).

Assim, o caso cujas condições foram apresentadas na Tabela 2.1 foi simulado para as três malhas geradas e o método GCI foi aplicado para comparar a densidade das malhas. A Tabela 4.1 sumariza os resultados obtidos para o CGI aplicados às malhas ditas grosseiras, intermediária e refinada em termos de razões de pressão e temperatura, eficiência isentrópica e potência requerida.

Tabela 4. 1 – Resultados para o método GCI

Malha	Grosseira		Intermediária		Refinada
Nº de Elementos	886.440		2.032.950		4.846.402
Fator de refinamento (r)	-		1,32		1,34
Parâmetro	Razão de pressão	Razão de temperatura	Eficiência isentrópica	Potência requerida	
GCI (%)	0,00231	0,0147	0,017	0,0062	

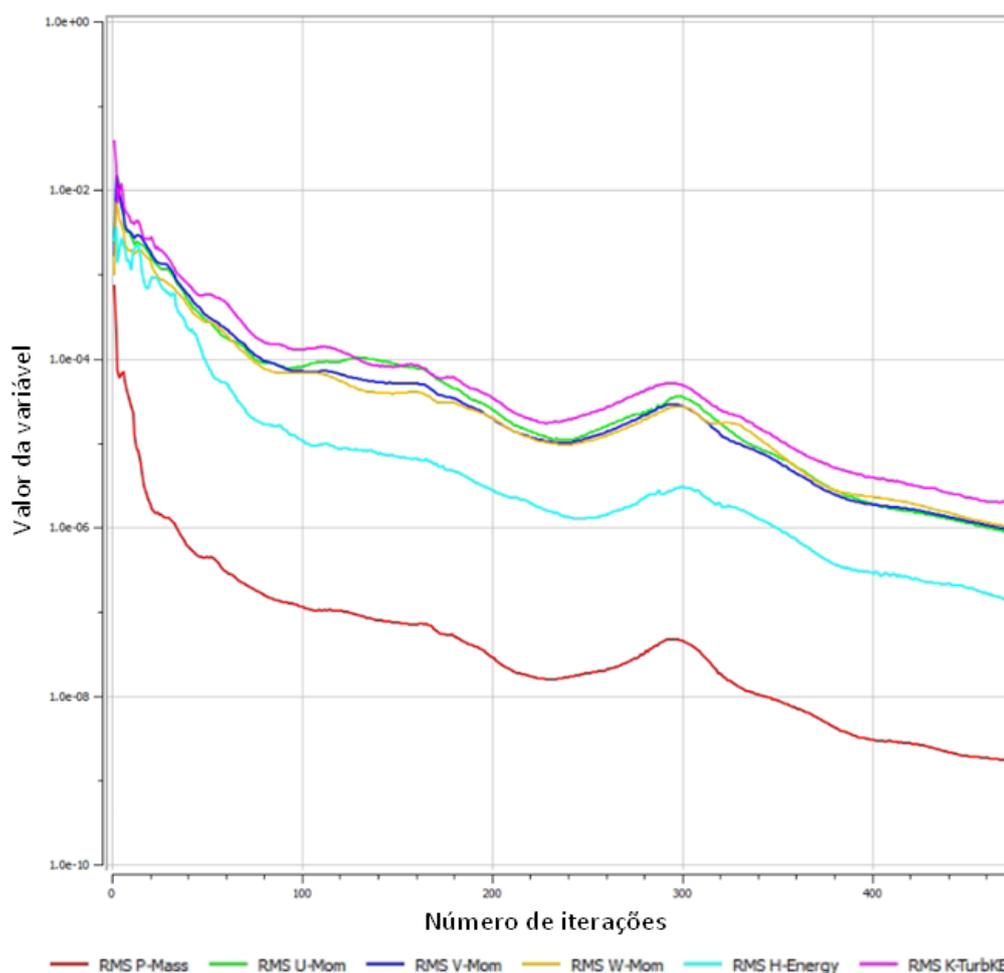
Fonte: A Autora (2020)

Observa-se que os fatores de refinamento, r , são maiores que 1,3. Pode-se concluir que as incertezas numéricas são baixas, portanto, a independência da grade foi alcançada e a grade intermediária foi utilizada nesta pesquisa.

4.2. Convergência

Como critérios de convergência foram definidos um número máximo de 1000 interações por caso rodado, bem como um resíduo do tipo RMS (*root mean square*) com valor alvo de 10^{-6} para as variáveis de massa e quantidade de movimento. A Figura 4.1 traz o gráfico com valores dos resíduos de massa (curva em vermelho); quantidade de movimento (em verde a curva em x; em azul escuro a curva em y e em amarelo a curva em z); energia (curva em azul claro) e turbulência (curva em rosa).

Figura 4. 1 – Evolução dos resíduos em função do número de interações.



Observa-se que os resíduos atingem o critério definido para convergência, havendo a conservação das variáveis. Assim, os resultados estão em concordância com as características definidas para o modelo numérico.

4.3. Validação no modelo numérico

Para a validação do modelo numérico apresentado ao longo do presente trabalho utilizou-se os resultados experimentais de nove casos diferentes para o mesmo impelidor como base comparativa para os resultados simulados com a malha intermediária. Todas as condições iniciais das velocidades do eixo, vazões mássicas, temperaturas e pressões de entrada, bem como os valores experimentais foram retiradas de Wright et al. (2010) e estão apresentadas na Tabela 4.2 juntamente com os valores obtidos para eficiências isentrópicas e os resultados da validação em termos de valores de razão de pressão para os experimentos e modelos numéricos e o erro relativo entre eles.

Tabela 4. 2 - Resultados da validação do CO₂ em termos de valores da razão de pressão e seu erro relativo.

Velocidade de rotação (rpm)	Temperatura total de entrada (K)	Pressão total de entrada (MPa)	Vazão mássica (kg/s)	Eficiência isentrópica (%)	Razão de pressão		Erro relativo (%)
					Exp.	Num.	
10000	305,5	7,676	0,454	76,67	1,039	1,015	2,339
20000	305,5	7,676	0,771	79,72	1,051	1,068	1,551
28000	305,5	7,676	1,134	77,05	1,112	1,125	1,156
39000	305,6	7,711	1,451	74,60	1,204	1,212	0,687
49000	306,3	7,854	1,816	76,89	1,355	1,346	0,612
55000	306,4	7,890	2,043	78,00	1,439	1,441	0,145
56000	306,6	7,826	2,088	76,48	1,469	1,449	1,385
60000	306,9	7,997	2,225	76,86	1,518	1,525	0,485
64900	307,9	8,211	2,406	77,72	1,574	1,621	3,012

Fonte: A Autora (2020)

Observa-se uma aproximação considerável dos valores obtidos com as simulações em relação aos valores experimentais. O erro relativo médio de 1,264% com um valor máximo de 3,012% e mínimo de 0,145% para a relação de pressão. De fato, os melhores resultados foram observados para o caso usado como base para a concepção

do modelo e suas redondezas. Contudo valores de 2,339% e 3,012% de erro relativo para os casos que mais se distanciam do primeiro caso rodado foram considerados satisfatórios.

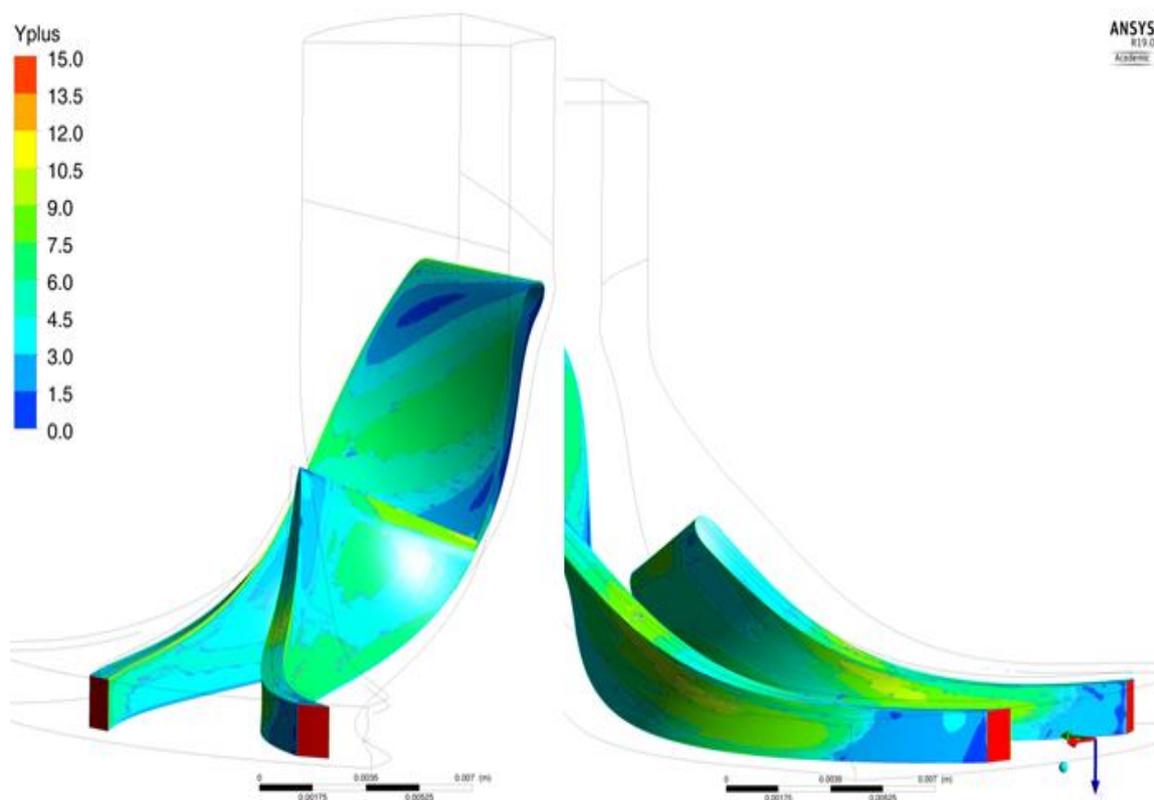
Valores de eficiência isentrópica variam entre 74,60% e 79,72% não apresentando uma tendência específica a medida que os parâmetros de entrada foram alterados. Supõe-se que devido às pequenas dimensões do equipamento os resultados foram bastante susceptíveis às alterações dos parâmetros de entrada de maneira combinada, uma vez que não se percebeu um parâmetro específico que dominou o efeito sob os valores da eficiência. Mas de modo geral aponta-se que um bom equilíbrio entre os aumentos de velocidade de rotação e vazão mássica geraram maior impacto nesta análise. De forma geral, dada a complexidade do modelo, pode-se considerar o mesmo adequado para sua implementação.

4.4. Resultados do escoamento em 3D

Os resultados das análises numéricas realizadas em três dimensões são apresentados a seguir.

Para os valores de Y^+ observa-se que a maioria foi inferior a 14 em todo o domínio. De fato, 93,65% dos elementos da malha apresentam valores de Y^+ menores que 10 e ocorrem ao longo das lâminas onde o fluxo é desenvolvido; apenas 1,38% dos elementos da malha apresentam valores de Y^+ maiores que 15 e ocorrem na face do bordo de fuga (paralela ao domínio de saída) das lâminas. A Figura 4.2 mostra os valores Y^+ dos elementos ao longo das lâminas principal e secundária.

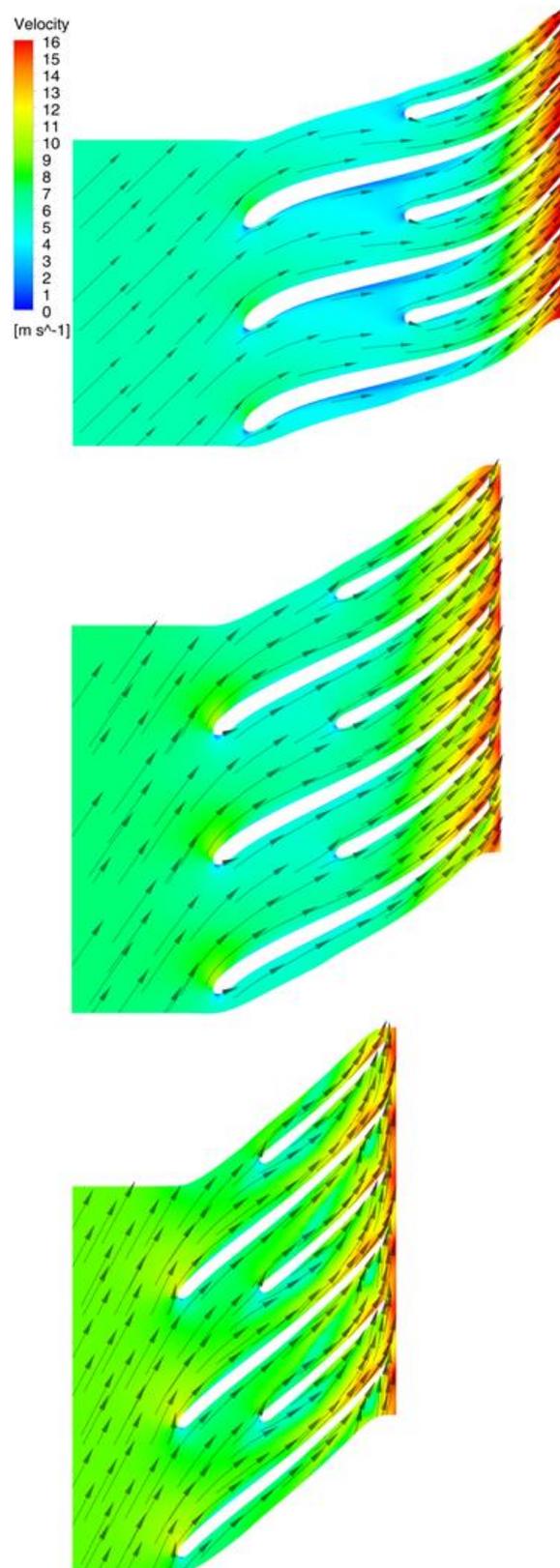
Figura 4. 2 – Valores de Y^+ ao longo das lâminas principal e secundária.



Fonte: A Autora (2020)

Quando se analisa os vetores de velocidade do escoamento bem como seus valores pode se ter uma noção de como este se desenvolve. A figura 4.3 traz tais informações e em 20%, 50% e 80% de ao longo da envergadura. É possível perceber a evolução nos valores a medida que o escoamento se desenvolve e que este perfil é ainda intensificado à medida que se aproxima da superfície *Shroud*, local onde se encontra o afastamento. Há pequenos pontos de desaceleração que ocorre a recirculação onde o fluido se choca com a lâmina no bordo de ataque até ser direcionado para o sentido correto do escoamento, local de maior velocidade. Há ainda ao longo da lâmina alguns pontos de desaceleração, mas que não chega a ocorrer bloqueio do fluxo. Esta desaceleração é tanto menor quanto mais próxima da superfície *Hub*. Por fim, na saída do fluido há um aumento considerável na velocidade (esta mais pronunciada quanto mais próxima da superfície *Hub*). De forma geral maiores gradientes de velocidade são observados nela, com certa perturbação nas linhas de corrente de velocidade (mais pronunciada quanto mais próxima da superfície *Shroud*).

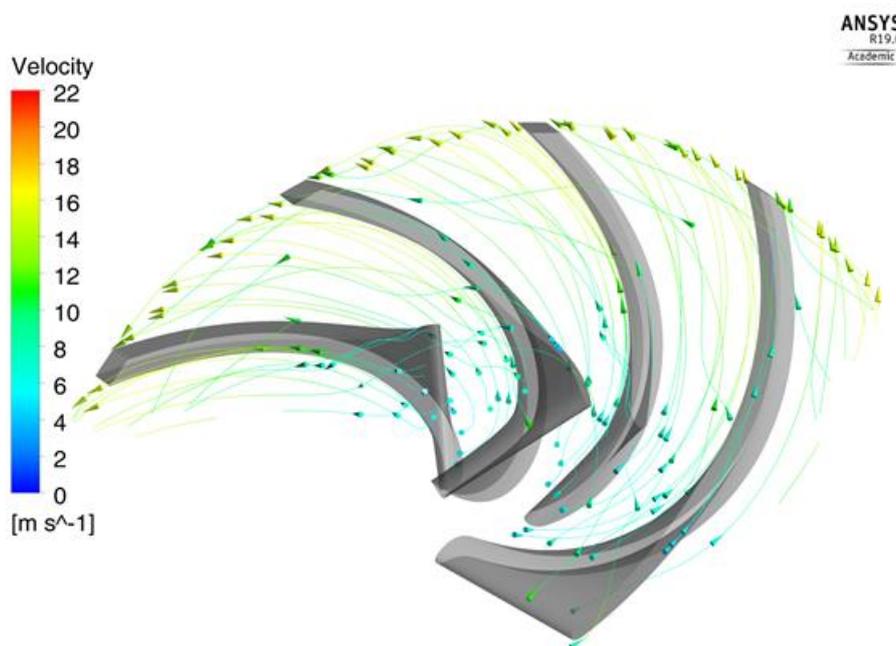
Figura 4. 3 - Visualização em escala da velocidade e seus vetores no impelidor para 20%, 50% e 80% de *Span* ao longo da envergadura.



Fonte: A Autora (2020)

Para uma análise mais detalhada dos fluxos de velocidade que se desenvolvem no escoamento a Figura 4.4 é apresentada. Nela é possível ver com detalhes os fluxos de velocidade numa vista superior. Pode-se perceber a ausência dos pontos de estagnação ou bloqueio ao longo das lâminas bem como de recirculação no bordo de fuga da saída do fluido. Nota-se, ainda a passagem do fluido através do afastamento na superfície do *Shroud*. De forma geral, é possível inferir que os ângulos aplicados às pás estão coerentes, favorecendo a qualidade do escoamento.

Figura 4.4 – Linhas de corrente da velocidade em vista superior.

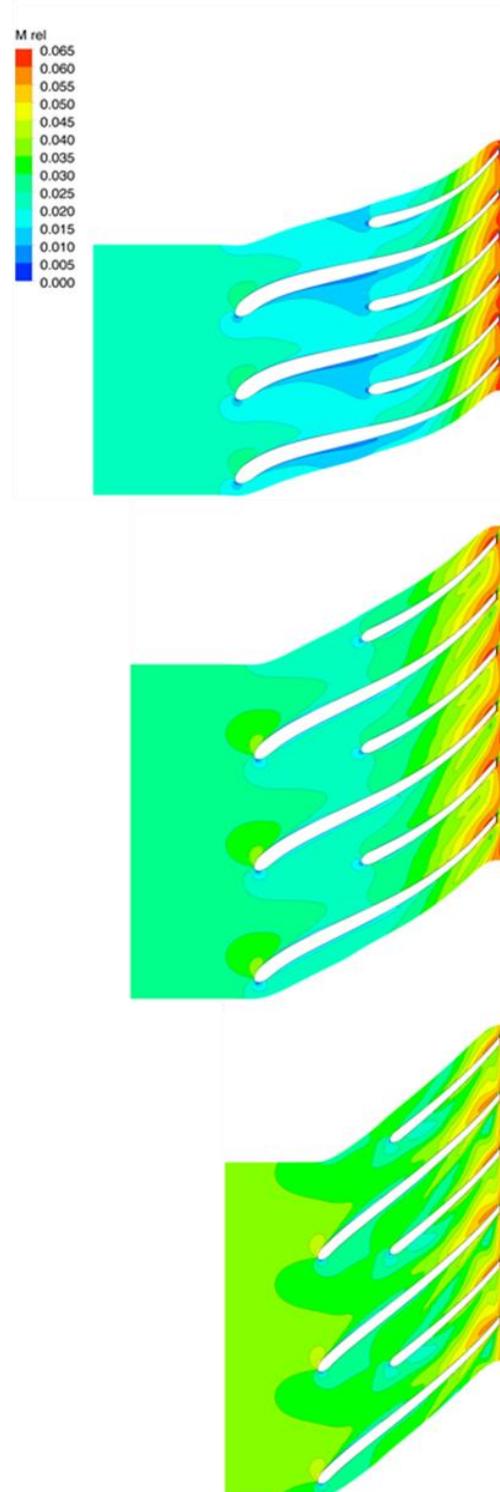


Fonte: A Autora (2020)

Como apontado anteriormente os dois fenômenos físicos principais que causam graves perdas em compressores centrífugos são ondas de choque no bordo de ataque causadas por altas velocidades na lâmina e bloqueio do fluxo causado pelo fluxo reverso próximo à folga no bordo de fuga. Estes fenômenos são influenciados pela geometria da lâmina. A figura 4.5 apresenta os valores de Mach relativos ao longo do escoamento em 20%, 50% e 80% de *Span* ao longo da envergadura. É possível perceber a evolução nos valores a medida que o escoamento se desenvolve e que isso este perfil é ainda intensificado à medida que se aproxima da superfície *Shroud*. Apesar de alguns pontos apresentarem maiores valores no bordo de fuga seu valor não ultrapassa 0,065 não havendo, portanto, ondas de choque. Há ainda, no bordo de ataque e ao longo da lâmina,

alguns pontos nos quais se observa os menores valores de Mach relativos, contudo não chegam a indicar pontos de estagnação ou bloqueio.

Figura 4. 5 – Visualização em escala do número Mach relativo no impelidor para 20%, 50% e 80% de *Span* ao longo da envergadura



Fonte: A Autora (2020)

De fato, o fluxo com maior perturbação encontrado no afastamento na superfície *Shroud* (Figura 4.3) foi uma fonte significativa de perda (uma vez que foi feita a consideração das paredes como sendo adiabáticas), o que pode ser verificado pela análise da Figura 4.6 de entropia estática ao longo do escoamento em 20%, 50% e 80% de *Span* ao longo da envergadura, cuja evolução pode ser notada pela representação gráfica da Figura 4.7 que traz a variação da entropia estática e sua posição ao longo do escoamento.

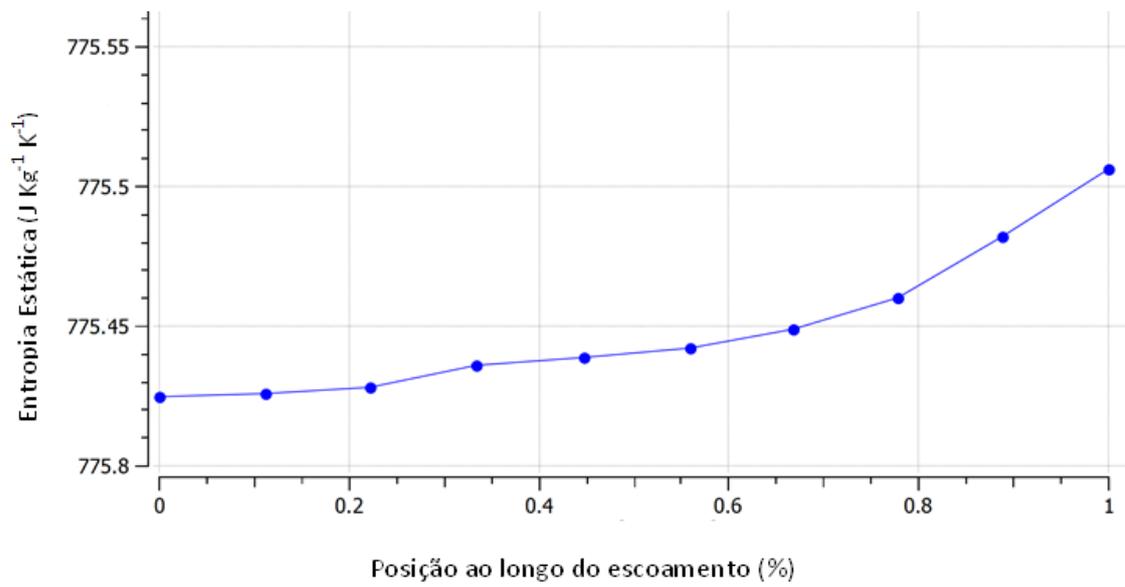
Na primeira metade do domínio quase não há variação de entropia, pois há apenas pequenas influências da folga. Já na segunda metade tem-se a maior variação de entropia, local onde foram percebidas as maiores velocidades bem como perturbações nas linhas de corrente na saída do bordo de fuga.

Figura 4.6 – Visualização em escala da entropia estática no impelidor para 20%, 50% e 80% de *Span* ao longo da envergadura



Fonte: A Autora (2020)

Figura 4. 7 – Variação de entropia estática ao longo do escoamento.



Fonte: A Autora (2020)

5. Considerações Finais

Intensa pesquisa e atividade industrial no campo de turbo máquinas produziram um grande número de diretrizes de projeto e recomendações de melhores práticas que estão disponíveis em uma grande variedade de manuais e códigos de computador. No entanto, algumas recomendações adicionais devem ser consideradas quando se trabalha com dióxido de carbono supercrítico devido a algumas características particulares do fluido.

Para ter em conta estas singularidades, o presente estudo propôs validar um modelo numérico para simulação a partir de um projeto experimental pré-existente desenvolvido para operar com S-CO₂ puro.

5.1. Conclusões

Todas as simulações foram feitas com um pacote comercial. Ajustes pertinentes foram feitos no modelo numérico e na definição das propriedades termodinâmicas usando uma tabela específica para a região de trabalho. Os principais destaques são:

O estudo de independência de malhas indicou baixas incertezas numéricas, ratificando a independência das malhas corroborando com a continuidade das análises. Os critérios definidos para convergência foram atingidos, havendo a conservação das variáveis de massa de quantidade de movimento.

A validação foi feita comparando-se valores da razão de pressão para os resultados da simulação e os valores experimentais. Observou-se uma aproximação considerável entre os valores com erro relativo médio de 1,264%, um valor máximo de 3,012% e mínimo de 0,145% para a relação de pressão. Assim, os resultados estão em concordância com as características definidas para o modelo numérico.

O escoamento foi analisado em termos dos valores Y^+ cuja maioria foi inferior a 14 em todo o domínio. 93,65% dos elementos da malha apresentam valores de Y^+ menores que 10 e apenas 1,38% dos elementos da malha apresentam valores de Y^+ maiores que 15. Também houve a análise do escoamento em termos dos números de

Mach relativos, velocidades (com respectivas linhas de corrente) em 20%, 50% e 80% de *Span* ao longo da envergadura. Foram observados pequenos pontos de desaceleração com recirculação, mas que não indicavam bloqueio do fluxo. Na saída do fluido há um aumento considerável na velocidade, com certa perturbação nas linhas de corrente de velocidade. Não foram observadas ondas de choque.

De fato, o fluxo com maior perturbação foi uma fonte significativa de perda que pode ser observada em termos da entropia estática ao longo do escoamento. De forma geral, dada a complexidade do modelo, este pode ser considerado adequado para implementação em uma ferramenta de projeto e otimização a ser utilizada na operação de dióxido de carbono supercrítico.

5.2. Futuros Desenvolvimentos

Como estudos futuros pretende-se expandir os conhecimentos adquiridos agora para abordagens que envolvam compressores maiores e que operam com misturas de CO₂ e CH₄, ainda na região termodinâmica acima do ponto crítico vapor-líquido. O uso da mistura se encaixa em um contexto de aplicações na re-injeção de poços de petróleo e também para separação em cavernas.

Para obter resultados precisos em termos de eficiência prevista e desempenho do compressor, aspectos fundamentais dos fluxos que evoluem perto do ponto crítico devem ser investigados. Assim especial atenção deverá ser dada às tabelas de propriedades termodinâmicas da mistura.

Pretende-se ainda estressar o compressor de análise de forma a simulá-lo para diferentes composições da mistura (diferentes proporções de CO₂ e CH₄), uma vez que no contexto de plataformas *off-shore* ocorrem variações na composição do material que é prospectado ao longo da vida útil do poço.

Referências

AHN, Yoonhan et al. Review of supercritical CO₂ power cycle technology and current status of research and development. *Nuclear Engineering and Technology*, v. 47, n. 6, p. 647-661, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.net.2015.06.009>

AMELI, Alireza et al. Numerical Sensitivity Analysis for Supercritical CO₂ Radial Turbine Performance and Flow Field. *Energy Procedia*, v. 129, p. 1117-1124, 2017.

ANGELINO, G. Carbon Dioxide Condensation Cycles For Power Production. *Journal of Engineering for Power*, 90(3), 287–295, 1968. <https://doi.org/10.1115/1.3609190>

ANSYS Inc. ANSYS TurboSystem User Guide. Knowledge Creation Diffusion Utilization, 15317(October), 724–746, 2012.

ANSYS Inc. ANSYS CFX-solver theory guide 12.0. ANSYS CFX Release, 15317(November), 724–746, 2013.

ATLAS C. Gas and process solutions, eight-stage, 200-BAR CO₂ COMPRESSOR, Brochure, 2018.

AUNGIER, R. H. Centrifugal Compressors: A Strategy for Aerodynamic Design and Analysis. ASME Press, 2000.

BARRERA, J. E., Bazzo, E., & Kami, E. Exergy analysis and energy improvement of a Brazilian floating oil platform using Organic Rankine Cycles. *Energy*, 88, 67–79, 2015.

BARTH, T., & Jespersen, D.. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes. In 27th Aerospace Sciences Meeting. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1989.

BELL, I., Quoillin, S., Wronski, J., & Lemort, V. Coolprop: An open-source referencequality thermophysical property library. Submitted Abstract to ASME- ..., 1, 110006, 2013.

BENINI, E., Toffolo, A., & Lazzaretto, A. Experimental and numerical analyses to enhance the performance of a microturbine diffuser. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 30, 427–440, 2006.

CASEY, M. Robinson, C., Hutchinson, B., & Steed, R. Impeller-diffuser

interaction in centrifugal compressors. Proceedings of the ASME Turbo Expo, 8(PARTS A, B, AND C), 767–777, 2012.

CASEY, M. V., Krähenbuhl, D., & Zwysig, C. The design of ultra-high-speed miniature centrifugal compressors. 10th European Conference on Turbomachinery Fluid Dynamics and Thermodynamics, ETC 2013, 506–519, 2014.

CELIK, I.B.; Ghia, U.; Roache, P.J.; Freitas, C.J.; Coleman, P.E. Raad, Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications, J. Fluids Eng. 130, 1–4, 2008.

FEHER, E. G. The supercritical thermodynamic power cycle. Pp 37-44 of Advances in Energy Conversion Engineering. New York, American Society of Mechanical Engineers, 1967., 8, 1967.

FRIEDMAN, P., & Anderson, M. Thermodynamics (K. Brun, P. Friedman, & R. B. T.-F. and A. of S. C. D. (sCO₂) B. P. C. Dennis (Eds.); pp. 41–66). Woodhead Publishing, 2017.

KIM, S. G; Lee, J.; Ahn, Y.; Lee, J. I.; Addad, Y.; Ko, B. CFD investigation of a centrifugal compressor derived from pump technology for a supercritical carbon dioxide as a working fluid. The Journal of Supercritical Fluids, v. 86, p. 160-171, 2014.

MELLO, P.E.B. RGP Gas Mixture Properties Table Generator for CFD Simulation. Technical Report, RCGI Project 37, 2020.

MENTER, F. R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. AIAA Journal, 32(8), 1598–1605, 1994.

MERONI, A., Zühlsdorf, B., Elmegaard, B., & Haglind, F. Design of centrifugal compressors for heat pump systems. Applied Energy, 232(September), 139–156, 2018.

MONJE, B. B. Design of supercritical carbon dioxide centrifugal compressors. January, 1–151. 2014.

MONJE , B. B., Sánchez, D., Chacartegui, R., Sánchez, T., Savill, M., & Pilidis, P. Comparing the Pressure Rise of Air and Supercritical Carbon Dioxide in Conical Diffusers p. 405–414, 2012.

MUNROE, T. A., Zaccaria, M. A., Flaspohler, W. H., Pelton, R. J., Wygant, K. D., & Dubitsky, O. B. FLUENT CFD steady state predictions of a single stage centrifugal compressor with supercritical CO₂ working fluid. Proceedings of the S-CO₂ Power Cycle Symposium, 1–8, 2009.

PECNIK, R., Rinaldi, E., & Colonna, P. Computational Fluid Dynamics of a Radial Compressor Operating With Supercritical CO₂. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 134, 122301, 2012.

PECNIK, R., Rinaldi, E., & Colonna, P. Steady state CFD investigation of a radial compressor operating with supercritical CO₂. ASME Paper No. GT2013-94580, 2013.

PECNIK, R., Rinaldi, E., & Colonna, P. Computational Fluid Dynamic Simulation of a Supercritical CO₂ Compressor Performance Map. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 137(7), 1–7, 2015.

SARETTO, S. Advanced CO₂ Compression with Supersonic Technology. 1–24, 2016.

SHUM, Y. K. P., Tan, C. S., & Cumpsty, N. A. Impeller–Diffuser Interaction in a Centrifugal Compressor. *Journal of Turbomachinery*, 122(4), 777–786, 2000.

SIEMENS, STC-GV, STC-GVT Siemens Turbocompressor {Integrally Geared, Vertically split volute casing, Brochure, 2018.

SPAN, R. & Wagner, W., A new equation of state for carbon dioxide covering the fluid region from the triple-point temperature to 1100 K at pressures up to 800 MPa, *Journal of physical and chemical reference data* 25 (6) 1509–96, 1996.

TAKAGI, K., Muto, Y., Ishizuka, T., Kikura, H., & Aritomi, M. Research on Flow Characteristics of Supercritical CO₂ Axial Compressor Blades by CFD Analysis. *Journal of Power and Energy Systems*, 4, 138–149, 2010.

ULIZAR, I., & Pilidis, P. Handling of a Semiclosed Cycle Gas Turbine With a Carbon Dioxide-Argon Working Fluid. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 122(3), 437–441, 2000.

UTAMURA, M., Hasuike, H., & Yamamoto, T. Demonstration test plant of closed cycle gas turbine with supercritical CO₂ as working fluid. *Strojarstvo: Časopis Za Teoriju i Praksu u Strojarstvu*, 52(4), 459–465, 2010.

UTAMURA, M., Hasuike, H., Ogawa, K., Yamamoto, T., Fukushima, T., Watanabe, T., & Himeno, T. Demonstration of supercritical CO₂ closed regenerative Brayton cycle in a bench scale experiment. ASME Turbo Expo 2012: Turbine Technical Conference and Exposition, 155–164, 2012.

VERSTEEG, H. K. & Malalasekera, W. An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method. Pearson Education, 2007.

VILIM, R. B. A One-Dimensional Compressor Model for Super-Critical Carbon

Dioxide Applications. International Congress, Advances in Nuclear Power Plants, 3, 1581–1591, 2010.

WADAS, B. CO₂ Capture & Compression Technologies. Proceedings of the CO₂ Summit: Technology and Opportunity, June, 2010.

WANG, Y., Shi, D., Zhang, D., & Xie, Y. Investigation on Unsteady Flow Characteristics of a SCO₂ Centrifugal Compressor. Applied Sciences, 7, 310, 2017.

WILCOX, D. C. Turbulence modeling for CFD (Vol. 2). DCW industries La Canada, CA, 1998.

WRIGHT, S. A., Radel, R. F., Vernon, M. E., Rochau, G. E., & Pickard, P. S. Operation and Analysis of a Supercritical CO₂ Brayton Cycle. September, 2010.

YEOH, G. H., & Tu, J. Chapter 2 - Governing Equations and Boundary Conditions (G. H. Yeoh & J. B. T.-C. T. for M. F. (Second E. Tu (Eds.); pp. 19–83). Butterworth-Heinemann, 2019.