

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA (UNESP)
FACULDADE DE ENGENHARIA
CAMPUS DE ILHA SOLTEIRA**

Patrick Luiz Neuhaus Andrade

**GERAÇÃO DE TABELAS RGP ESPECIALIZADAS PARA
MISTURAS CO₂-CH₄ UTILIZADAS EM MODELO CFD DE
COMPRESSORES CENTRÍFUGOS**

Ilha Solteira
2025

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA (UNESP)
FACULDADE DE ENGENHARIA
CAMPUS DE ILHA SOLTEIRA**

Patrick Luiz Neuhaus Andrade

**GERAÇÃO DE TABELAS RGP ESPECIALIZADAS PARA
MISTURAS CO₂-CH₄ UTILIZADAS EM MODELO CFD DE
COMPRESSORES CENTRÍFUGOS**

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado à Faculdade de Engenharia –
Unesp, Câmpus de Ilha Solteira como parte
das exigências para graduação em
Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Elóy Gasparin

Ilha Solteira
2025

FICHA CATALOGRÁFICA
Desenvolvida pela Diretoria Técnica de Biblioteca e Documentação

A554g Andrade, Patrick Luiz Neuhaus.
Geração de tabelas RGP especializadas para misturas CO₂-CH₄ utilizadas em modelo CFD de compressores centrífugos / Patrick Luiz Neuhaus Andrade.
-- Ilha Solteira: [s.n.], 2025
41 f. : il.

Trabalho de conclusão de curso (Graduação em Engenharia Mecânica) -
Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira, 2025

Orientador: Elóy Gasparin
Inclui bibliografia

1. RGP. 2. ANSYS CFX. 3. CO₂ supercrítico. 4. Mistura CO₂-CH₄.

ANEXO 02
MODELO DE ATA DE DEFESA

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA "JÚLIO DE MESQUITA FILHO"
FACULDADE DE ENGENHARIA – CÂMPUS DE ILHA SOLTEIRA

CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

ATA DA DEFESA – TRABALHO DE GRADUAÇÃO

TÍTULO: Geração de Tabelas RGP Especializadas para Misturas CO₂/CH₄ Utilizadas em Modelo CFD de Compressores Centrífugos

ALUNO: Patrick Luiz Neuhaus Andrade RA: 191050393

Orientador: Prof. Dr. Elóy Esteves Gasparin

Aprovado (X) – Reprovado () pela Comissão Examinadora

Nota obtida: 9.0

Comissão Examinadora:

Prof. _____
Presidente (Orientador)

Prof. _____
Me. Henrique Matos Campos

Prof. _____
Me. Vinicius Marson

Assinatura do Aluno

Ilha Solteira (SP) 28 de novembro de 2025.

DEDICATÓRIA

Ao meu pai Fábio Vieira de Andrade Borges e minha mãe Alessandra Neuhaus, que me educaram e me possibilitaram mais essa conquista, exemplos de vida fundamentais para a minha vida pessoal e profissional.

AGRADECIMENTOS

A minha namorada Isabeli, pelo incentivo e apoio para terminar esse trabalho.

Aos meus pais Fábio Vieira de Andrade Borges e Alessandra Neuhaus Vieira Andrade, meu irmão Fábio Vieira de Andrade Borges Filho, pelo eterno orgulho de nossa caminhada, pelo apoio, compreensão, ajuda, e, em especial, por todo carinho ao longo deste percurso.

Aos meus amigos e colegas de curso, pela cumplicidade, ajuda e amizade.

Ao professor Elóy Gasparin, pela orientação deste trabalho e estímulo em sua conclusão.

“Se você quiser fazer uma torta de maçã a partir do zero, você deve primeiro inventar o universo.”
(CARL SAGAN, 1980)

RESUMO

As simulações de gases reais no ANSYS CFX dependem de tabelas no formato .RGP (Real Gas Properties), que descrevem propriedades termodinâmicas e de transporte em função da temperatura e da pressão. Até então, não existiam ferramentas acessíveis capazes de gerar tabelas .RGP para misturas gasosas, o que limitava estudos com fluidos relevantes em processos de recuperação avançada (EOR) e captura e armazenamento de carbono (CCUS). Este trabalho desenvolve um gerador automatizado em Python, baseado na biblioteca CoolProp, que calcula nove propriedades fundamentais e produz tabelas completas e compatíveis com o CFX. O sistema inclui correção automática de dados, tratamento de descontinuidades e verificação de monotonicidade, garantindo suavidade numérica e consistência termodinâmica. Foram geradas e verificadas tabelas para o CO₂ puro e para a mistura CO₂ (91%)/CH₄ (9%), no formato .RGP. As simulações no CFX confirmaram o comportamento físico esperado, redução da razão de pressão, potência de compressão e eficiência isentrópica, demonstrando a confiabilidade do método. A solução proposta elimina a dependência de arquivos externos e viabiliza o uso de misturas gasosas em CFD, ampliando significativamente o alcance de aplicações industriais e acadêmicas com gases reais.

Palavras-chave: RGP; ANSYS CFX; CO₂ supercrítico; Mistura CO₂/CH₄.

ABSTRACT

Real gas simulations in ANSYS CFX rely on tables in the .RGP (Real Gas Properties) format, which describe thermodynamic and transport properties as a function of temperature and pressure. Until now, there were no accessible tools capable of generating .RGP tables for gas mixtures, which limited studies involving fluids relevant to Enhanced Oil Recovery (EOR) and Carbon Capture, Utilization, and Storage (CCUS) processes. This work develops an automated generator in Python, based on the CoolProp library, which calculates nine fundamental properties and produces complete tables compatible with CFX. The system includes automatic data correction, discontinuity handling, and monotonicity verification, ensuring numerical smoothness and thermodynamic consistency. Tables were generated and verified for pure CO₂ and for a CO₂ (91%)/CH₄ (9%) mixture in the .RGP format. Simulations in CFX confirmed the expected physical behavior, including a reduction in pressure ratio, compression power, and isentropic efficiency, demonstrating the method's reliability. The proposed solution eliminates dependence on external files and enables the use of gas mixtures in CFD, significantly expanding the scope of industrial and academic applications involving real gases.

Keywords: RGP; ANSYS CFX; Supercritical CO₂; CO₂/CH₄ mixture.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Compressor centrífugo (partes e escoamento).....	12
Figura 2 - Diagrama de fases do CO ₂ (ponto crítico, ponto triplo e regiões).....	13
Figura 3 - Exemplo de modelo CFD (geometria original vs. Otimizada).....	16
Figura 4 - Fluxograma metodológico.....	18
Figura 5 - Estrutura interna do arquivo RGP desenvolvido, com destaque para as nove tabelas de propriedades.....	19
Figura 6 - Exemplo de formatação para o começo da tabela .rgp.....	20
Figura 7 - Exemplo real de formatação de uma tabela .rgp gerada.....	21
Figura 8 - Execução do gerador de tabelas RGP em Python.....	22
Figura 9 - Pós-processamento e correção automática das tabelas RGP.....	23
Figura 10 - Geometria do rotor do compressor centrífugo e malha computacional utilizada na simulação.....	26
Figura 11 - Gráfico comparativo da tabela 1 que contém a propriedade de entalpia.....	28
Figura 12 - Gráfico comparativo da tabela 1 que contém a propriedade de entalpia.....	30
Figura 13 - Gráfico comparativo da tabela 2 que contém a propriedade de velocidade do som.....	31
Figura 14 - Gráfico comparativo da tabela 3 que contém a propriedade de volume específico.....	31
Figura 15 - Gráfico comparativo da tabela 4 que contém a propriedade de calor específico a volume constante.....	32
Figura 16 - Gráfico comparativo da tabela 5 que contém a propriedade de calor específico a pressão constante.....	32
Figura 17 - Gráfico comparativo da tabela 6 que contém a propriedade da derivada parcial da pressão em função do volume específico a temperatura constante.....	33
Figura 18 - Gráfico comparativo da tabela 7 que contém a propriedade de entropia específica.....	33
Figura 19 - Gráfico comparativo da tabela 8 que contém a propriedade de viscosidade dinâmica.....	34

Figura 20 - Gráfico comparativo da tabela 9 que contém a propriedade de condutividade térmica.....34

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - $\Delta_{\text{máx(médias)}}$ de cada tabela de propriedade.....	29
Tabela 2 - Resultados da Análise da Simulação Usando Tabela Verificada e Tabelas Geradas.....	35

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CCUS – *Carbon Capture, Utilization and Storage* (Captura, Utilização e Armazenamento de Carbono)

CFD – *Computational Fluid Dynamics* (Dinâmica dos Fluidos Computacional)

CH₄ – *Methane* (Metano)

CO₂ – *Carbon Dioxide* (Dióxido de Carbono)

EOR – *Enhanced Oil Recovery* (Recuperação Aprimorada de Petróleo)

GBM – *Gas-like Behavior Margin* (Margem de Comportamento de Gás)

H₂ – Hidrogênio

MMP – *Minimum Miscibility Pressure* (Pressão Mínima de Miscibilidade)

NaN – *Not a Number* (Não é um Número)

NIST – *National Institute of Standards and Technology* (Instituto Nacional de Padrões e Tecnologia)

PR – *Pressure Ratio* (Razão de Pressão ou Razão de Compressão)

REFPROP – *Reference Fluid Properties* (Propriedades de Fluidos de Referência)

RGP – *Real Gas Properties* (Propriedades Reais do Gás)

s-CO₂ – *Supercritical Carbon Dioxide* (Dióxido de Carbono Supercrítico)

UNESP – Universidade Estadual Paulista

VLE – *Vapor-Liquid Equilibrium* (Equilíbrio Vapor-Líquido)

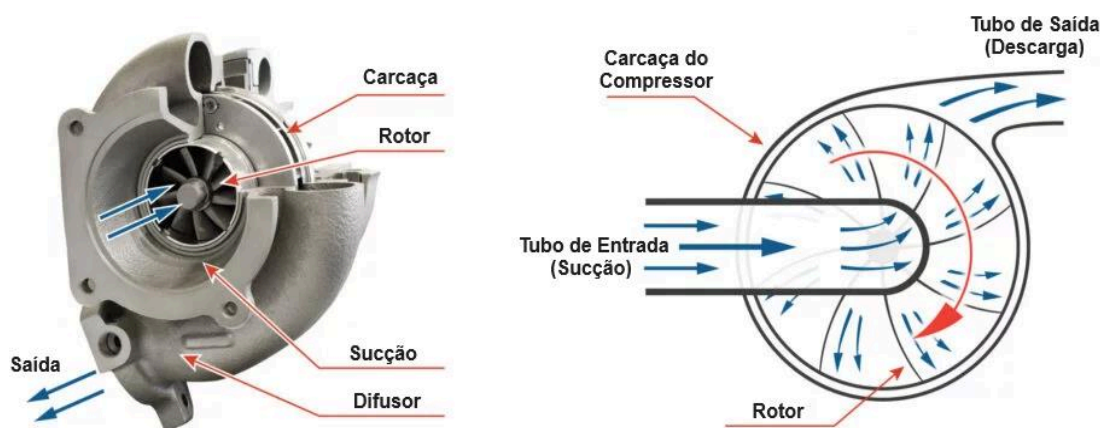
SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	12
1.1 CO ₂ supercrítico e consequências para compressores.....	13
1.2 CFD em compressores s-CO ₂ e a necessidade de arquivos .RGP.....	16
1.3 Backend Termofísico: A Biblioteca CoolProp.....	17
1.4 Objetivo desse trabalho.....	18
2 METODOLOGIA.....	19
2.1 Estudo aprofundado da estrutura do arquivo RGP.....	20
2.2 Desenvolvimento do gerador de tabelas em Python.....	22
2.3 Tratamento de Falhas e Pós-Processamento (Passo 2).....	24
2.4 Verificação das tabelas no CFX.....	25
2.4.1 Comparação Numérica e Delta Máximo.....	25
2.4.2 Teste em Simulação CFD (Caso Compressor).....	26
3 RESULTADOS.....	28
3.1 Comparação entre a tabela gerada e a tabela de referência para CO ₂ puro..	28
3.2 Comparação entre a tabela gerada e a tabela de referência para a mistura CO ₂ /CH ₄ (9%).....	30
3.3 Resultados das simulações no ANSYS CFX.....	36
4 CONCLUSÃO.....	38
5 BIBLIOGRAFIA.....	40

1 INTRODUÇÃO

A cadeia de captura, utilização e armazenamento de carbono (CCUS - *Carbon Capture, Utilization and Storage*) tem ganhado espaço como resposta ao aquecimento global. Nessa cadeia, o CO₂ (*Carbon dioxide* - Dióxido de carbono) é capturado em fontes industriais, comprimido, transportado (muitas vezes em condição supercrítica) e injetado em formações geológicas para armazenamento permanente ou para recuperação aprimorada de petróleo (EOR - *Enhanced Oil Recovery*). Em todas essas etapas, o compressor centrífugo é peça central, já que ele fornece a elevação de pressão necessária, normalmente em trens de compressão (múltiplos estágios com intercoolers) [1]. Em aplicações que demandam alta rotação, são empregados acionamentos elétricos de alta velocidade [2]. Como o compressor consome uma parcela relevante da energia de um projeto CCUS/EOR, ganhos pequenos de eficiência têm impacto direto na viabilidade técnica e econômica [3].

Figura 1 - Compressor centrífugo (partes e escoamento)



Fonte: [4]

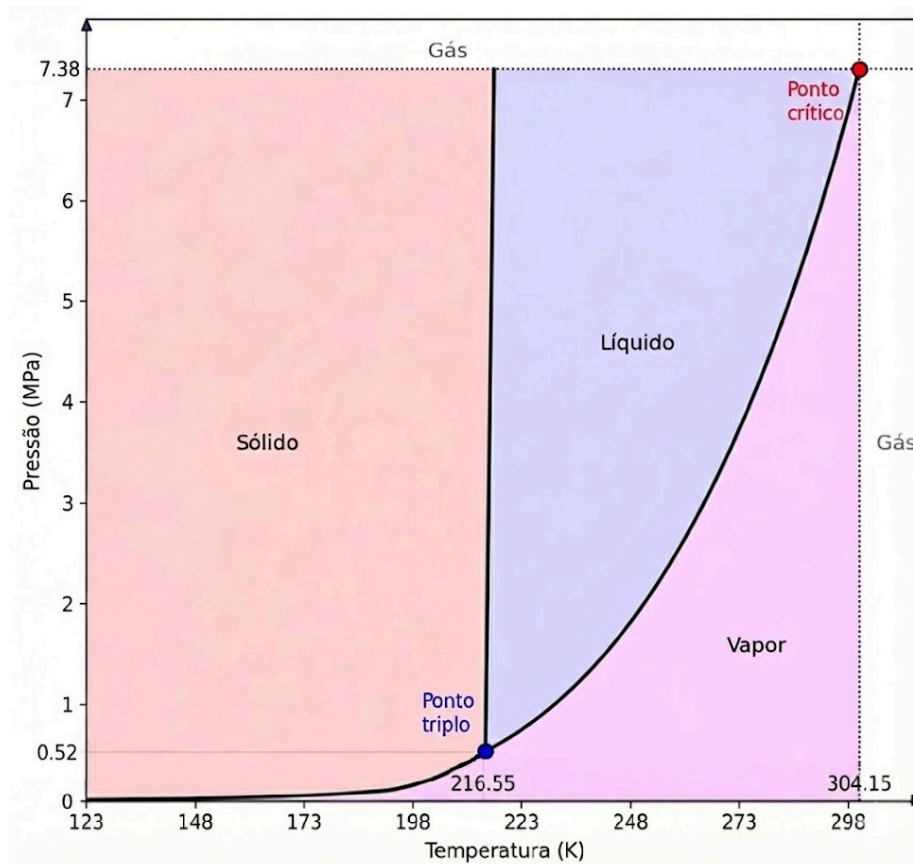
A Figura 1 apresenta a configuração básica de um compressor centrífugo. O escoamento de gás entra pela sucção axial e é acelerado pelas pás do rotor, que transformam energia mecânica em energia cinética. Em seguida, o fluxo passa pelo difusor, onde parte dessa energia é convertida em pressão estática. Por fim, a carcaça coleta e direciona o gás comprimido até a saída. Esse arranjo evidencia a função de cada componente no processo de compressão e ajuda a compreender por

que o rotor e o difusor são elementos críticos para o desempenho e a eficiência do equipamento.

1.1 CO₂ supercrítico e consequências para compressores

O CO₂ tem ponto crítico em 304,2 K e 7,38 MPa, e ponto triplo em 216,6 K e 0,52 MPa (Figura 2), útil para delimitar a região de saturação ao construir tabelas Termodinâmicas. Acima desse ponto, ele se comporta como um fluido supercrítico: não há mudança de fase definida, e pequenas variações de Temperatura e Pressão podem causar grandes mudanças de propriedades (densidade, calor específico, etc.). Próximo ao crítico, uma região conhecida como linha de Widom marca transições de comportamento gasoso (*gas-like*) e líquido (*liquid-like*) mesmo sem ocorrência da “evaporação/condensação” da região de saturação [5].

Figura 2 - Diagrama de fases do CO₂ (ponto crítico, ponto triplo e regiões)



Fonte: Elaboração do autor (gerado a partir de CoolProp) [6].

Para operar com segurança e estabilidade numérica em CFD (*Computational Fluid Dynamics* - Dinâmica dos Fluidos Computacional), é comum adotar o critério Gas-like Behavior Margin (GBM) [3], para manter o escoamento no lado de

comportamento gasoso (*gas-like*), afastado das transições bruscas de propriedades; operacionalmente, isso se traduz em projetar trocadores de calor entre os estágios de compressão para evitar trajetórias que cruzem zonas de alta curvatura de propriedades durante a compressão, usando os trocadores de calor para executar este processo.

No EOR, o CO₂ é amplamente adotado porque reduz a tensão interfacial, favorece a miscibilidade e mobiliza óleo residual [7]. Operacionalmente, muitos campos trabalham em reciclo: o gás produzido volta à superfície misturado (por exemplo, com CH₄ - *Methane* - Metano), é separado, recomprimido e reinjetado. Esse ciclo torna a composição variável ao longo do tempo, o que acaba afetando alguns pontos como o dimensionamento do trem de compressão, a estratégia de controle (faixas de rotação, anti-surge, intercooling) e a definição de propriedades da mistura para simulação. Em resumo, EOR com CO₂ exige altas razões de pressão (repartidas em vários estágios), controle de temperatura para não aproximar da Widom e tolerância a variações de composição [8].

Na prática, o CO não vem puro. Em EOR com reutilização, é comum a presença de CH₄ [8, 9]. Em rotas de hidrogênio com captura (hidrogênio azul) e cenários de co-armazenamento, podem existir frações de H₂ no fluxo [10, 11, 12]. Essas misturas mudam a massa molar, a velocidade do som (a), o expoente isentrópico ($k = c_p/c_v$), a compressibilidade (Z) e as propriedades de transporte (viscosidade μ , condutividade λ). Pode-se ter consequências diretas para o compressor como aumento da velocidade do som por conta do H₂, diminuir o Mach de ponta para uma mesma rotação, impactando razão de pressão e mapa de estabilidade, além de que com CO₂/CH₄, a densidade pode diminuir menos do que o esperado e a potência específica não cresce tanto, mas a pressão mínima de miscibilidade (MMP - *Minimum Miscibility Pressure*) no contato óleo-gás pode subir, exigindo pressões de injeção maiores (interface reservatório-superfície) [7, 9].

Em CO₂/CH₄ com reciclo em CO₂-EOR, estudos de campo e simulação mostram que o gás reinjetado é majoritariamente CO₂ com frações de hidrocarbonetos leves (principalmente CH₄), afetando diretamente a MMP e a performance de superfície. Resultados obtidos experimentalmente indicam que o aumento da fração de CH₄ eleva significativamente a MMP (de ~1410 psi para até ~4080 psi), mas que correntes recicladas contendo até 30 mol% de CH₄ ainda

podem manter condições de miscibilidade se o reservatório operar acima de 2500 psi, garantindo recuperação eficiente e armazenamento associado de CO₂ [9].

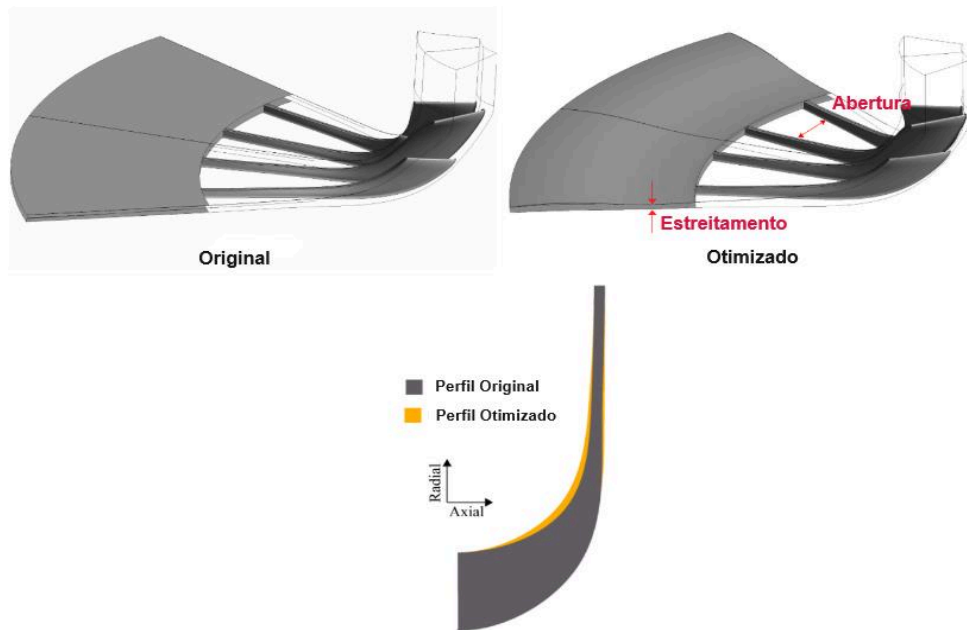
Para CO₂/H₂ em cadeias CCUS e dutos, revisões técnicas e estudos termodinâmicos mostram que H₂ altera VLE (Vapor-Liquid Equilibrium - Equilíbrio Vapor-Líquido), densidade, viscosidade e velocidade do som, com implicações de projeto/operabilidade [11, 12, 13]

A principal lição é que a composição do gás deve ser tratada como um parâmetro central de projeto e operação. Capturar essa variabilidade exige o uso de equações de estado e regras de mistura que representem com fidelidade o comportamento de gases reais. Para que isso seja refletido corretamente em simulações CFD, torna-se fundamental dispor de um gerador de tabelas termodinâmicas robusto e consistente, capaz de fornecer ao solver dados confiáveis sobre as propriedades da mistura ao longo de todo o regime de operação.

1.2 CFD em compressores s-CO₂ e a necessidade de arquivos .RGP

A modelagem CFD é amplamente empregada na literatura para representar o escoamento em compressores centrífugos operando com CO₂ supercrítico. Estudos recentes demonstram que a análise detalhada do campo de escoamento permite otimizações geométricas significativas, resultando em ganhos expressivos de eficiência [14]. A Figura 3 ilustra a complexidade de um modelo CFD utilizado para comparar uma geometria original e uma otimizada; a captura precisa dos fenômenos aerodinâmicos observados nessa figura depende diretamente da qualidade das propriedades termofísicas fornecidas ao software.

Figura 3 - Exemplo de modelo CFD (geometria original vs. Otimizada)



Fonte: [14].

Entretanto, o comportamento do $s\text{-CO}_2$ e de misturas binárias (como $\text{CO}_2\text{-CH}_4$) afasta-se do modelo de gás ideal, especialmente próximo ao ponto crítico. Para garantir a confiabilidade numérica, o solver ANSYS CFX utiliza tabelas de propriedades reais pré-calculadas, denominadas arquivos .RGP (Real Gas Properties - Propriedades Reais do Gás). Esses arquivos contêm matrizes de entalpia, entropia, velocidade do som e propriedades de transporte, evitando que o solver recalcule equações de estado complexas a cada iteração [6].

1.3 Backend Termofísico: A Biblioteca CoolProp

A geração precisa dessas tabelas .RGP requer uma base de dados termodinâmica robusta. Historicamente, grupos de pesquisa têm utilizado códigos proprietários ou acadêmicos baseados no REFPROP (*Reference Fluid Properties* - Propriedades de Fluidos de Referência) para gerar essas propriedades, uma abordagem eficaz, mas que muitas vezes atua como uma "caixa preta" de difícil integração ou automação em novos fluxos de trabalho.

Como alternativa moderna e transparente, destaca-se a biblioteca CoolProp [6]. Desenvolvida originalmente na Universidade de Liège, trata-se de uma biblioteca *open-source* (código aberto) escrita em C++, cuja confiabilidade é amplamente

reconhecida devido à validação cruzada com o banco de dados do NIST (*National Institute of Standards and Technology* - Instituto Nacional de Padrões e Tecnologia).

Para o cálculo das propriedades termodinâmicas, o CoolProp implementa equações de estado baseadas na energia livre de Helmholtz. Especificamente para misturas de gases naturais e similares (como o caso CO₂-CH₄ abordado neste trabalho), a biblioteca utiliza o modelo de mistura GERG-2008 [15]. Este modelo é referência na literatura para cobrir amplas faixas de temperatura e pressão com alta precisão. Ao adotar essa formulação, o trabalho assume a premissa de que a mistura é homogênea e não reativa (inerte), o que é consistente com a física do escoamento em compressores centrífugos onde não ocorrem reações químicas.

Portanto, ao utilizar o CoolProp, este trabalho se apropria de equações de estado e modelos de mistura previamente validados experimentalmente. O foco não reside na validação matemática das equações termodinâmicas em si, mas na implementação computacional correta dessas equações para o formato exigido pelo CFD.

1.4 Objetivo

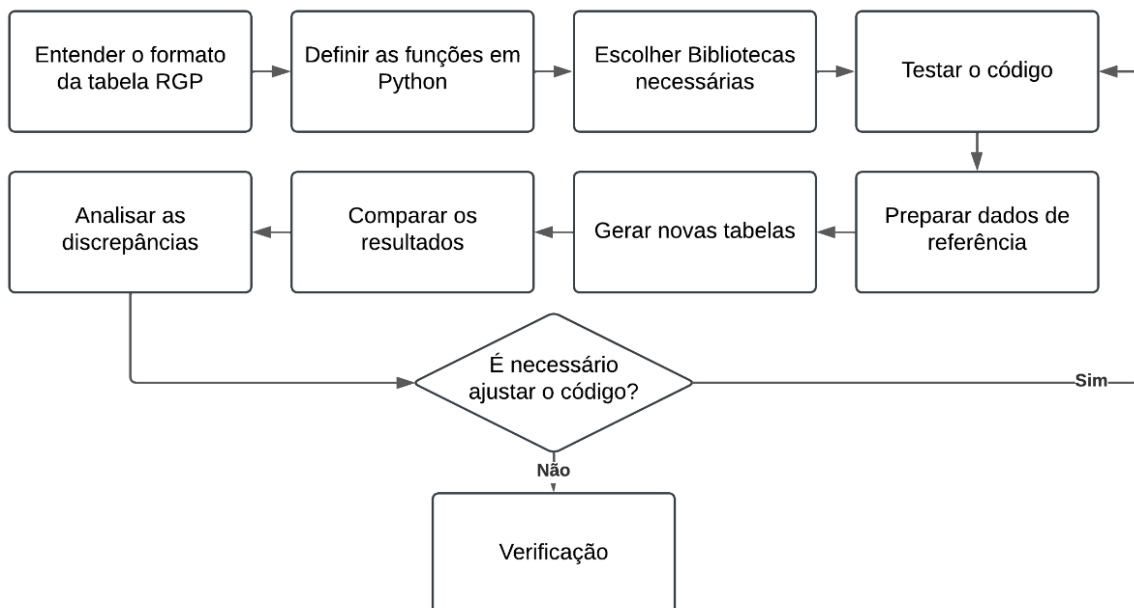
Diante da necessidade de simulações robustas para compressores de s-CO₂ operando com impurezas, e visando superar as limitações de acessibilidade de ferramentas antigas, este trabalho tem como objetivo principal implementar, em linguagem Python, um gerador automático de tabelas .RGP. A ferramenta desenvolvida foca em fluidos puros e misturas binárias (com ênfase no caso CO₂-CH₄), utilizando exclusivamente a biblioteca CoolProp como *backend* termofísico, garantindo assim a fidelidade dos dados de entrada para as simulações no ANSYS CFX.

2 METODOLOGIA

A metodologia adotada neste trabalho foi elaborada para garantir precisão, confiabilidade e aplicabilidade prática no desenvolvimento de arquivos .RGP voltados para simulações CFD no ANSYS CFX. O foco está em representar com alta fidelidade as propriedades termodinâmicas de fluidos puros, como CO₂, e viabilizar o uso de misturas binárias como CO₂-CH₄, elementos fundamentais em cenários industriais como CCUS e EOR.

A Figura 4 ilustra, em formato de fluxograma, todo o processo metodológico. O fluxo de trabalho não foi linear, mas sim iterativo, consistindo em quatro etapas principais: (1) Engenharia Reversa, para compreender a estrutura rígida de leitura do arquivo RGP; (2) Mapeamento de Bibliotecas, definindo as funções do CoolProp necessárias; (3) Desenvolvimento e Testes, onde o código foi escrito e depurado; e (4) Verificação Iterativa, onde as tabelas geradas eram comparadas com dados experimentais e testadas no CFX, retornando ao código para ajustes finos sempre que inconsistências numéricas eram detectadas.

Figura 4 - Fluxograma metodológico



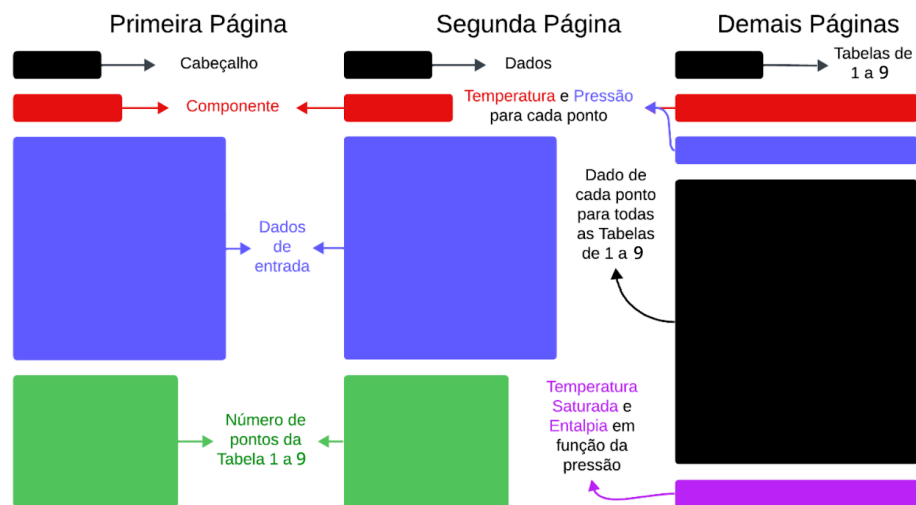
Fonte: Elaboração do autor

2.1 Estudo aprofundado da estrutura do arquivo RGP

A primeira fase consistiu na análise completa da estrutura dos arquivos RGP, que servem como fonte primária de dados para cálculos de gases reais no ANSYS CFX. Essa análise envolveu a revisão detalhada de cada parâmetro presente no cabeçalho, que deve seguir uma formatação específica para ser lido pelo software [16].

Conforme ilustrado no diagrama de blocos da Figura 5, o arquivo é estruturado sequencialmente. Ele inicia com a definição do componente e metadados ("Primeira e Segunda Página"), seguidos pela declaração dos vetores de temperatura e pressão, e finalmente pelos blocos de dados das nove tabelas de propriedades essenciais ("Demais Páginas").

Figura 5 – Estrutura interna do arquivo RGP desenvolvido, com destaque para as nove tabelas de propriedades



Fonte: Elaboração do autor

Uma particularidade crítica descoberta durante a engenharia reversa é a redundância na inicialização do arquivo. Como detalhado na **Figura 6**, o arquivo RGP exige dois blocos de identificação inicial: o bloco `$$$$HEADER` e o bloco `$$$$DATA`. Ambos contêm informações praticamente idênticas sobre o componente (incluindo constantes críticas `T_CRIT`, `P_CRIT` e faixas de operação), diferindo apenas na tag de abertura. A ausência ou formatação incorreta de qualquer um desses blocos impede a leitura pelo CFX.

Figura 6 – Exemplo de formatação para o começo da tabela .rgp

\$\$\$HEADER	\$\$\$DATA
<div style="border: 1px solid red; padding: 2px;">\$\$\$CO2</div> <pre> 1 \$\$PARAM 26 DESCRIPTION CarbonDioxide [HelmholtzEOSBackend, CoolProp 6.4.2 NAME CO2 INDEX CO2 MODEL 3 UNITS 1 PMIN_SUPERHEAT 1.000000E+006 PMAX_SUPERHEAT 1.010000E+008 TMIN_SUPERHEAT 2.400000E+002 TMAX_SUPERHEAT 1.040000E+003 TMIN_SATURATION 2.400000E+002 TMAX_SATURATION 3.041282E+002 SUPERCOOLING 0.000000E+000 P_CRITICAL 7.377300E+006 </pre>	<pre> P_TRIPLE 5.1796434E+005 T_CRITICAL 3.0412820E+002 T_TRIPLE 2.1659200E+002 GAS_CONSTANT 1.8892406E+002 TABLE_1 800 1000 TABLE_2 800 1000 TABLE_3 800 1000 TABLE_4 800 1000 TABLE_5 800 1000 TABLE_6 800 1000 TABLE_7 800 1000 TABLE_8 800 1000 TABLE_9 800 1000 </pre>
<pre> 1 \$\$PARAM 26 DESCRIPTION CarbonDioxide [HelmholtzEOSBackend, CoolProp 6.4.2 NAME CO2 INDEX CO2 MODEL 3 UNITS 1 PMIN_SUPERHEAT 1.000000E+006 PMAX_SUPERHEAT 1.010000E+008 TMIN_SUPERHEAT 2.400000E+002 TMAX_SUPERHEAT 1.040000E+003 TMIN_SATURATION 2.400000E+002 TMAX_SATURATION 3.041282E+002 SUPERCOOLING 0.000000E+000 P_CRITICAL 7.377300E+006 </pre>	<div style="border: 1px solid red; padding: 2px;">\$\$\$CO2</div> <pre> 1 \$\$PARAM 26 DESCRIPTION CarbonDioxide [HelmholtzEOSBackend, CoolProp 6.4.2 NAME CO2 INDEX CO2 MODEL 3 UNITS 1 PMIN_SUPERHEAT 1.000000E+006 PMAX_SUPERHEAT 1.010000E+008 TMIN_SUPERHEAT 2.400000E+002 TMAX_SUPERHEAT 1.040000E+003 TMIN_SATURATION 2.400000E+002 TMAX_SATURATION 3.041282E+002 SUPERCOOLING 0.000000E+000 P_CRITICAL 7.377300E+006 TABLE_1 800 1000 TABLE_2 800 1000 TABLE_3 800 1000 TABLE_4 800 1000 TABLE_5 800 1000 TABLE_6 800 1000 TABLE_7 800 1000 TABLE_8 800 1000 TABLE_9 800 1000 \$SUPER_TABLE 9 </pre>

Fonte: Elaboração do autor

Após os cabeçalhos, seguem-se as nove tabelas de propriedades essenciais: entalpia específica, velocidade do som, volume específico, calores específicos (c_p e c_v), fator de compressibilidade (Z), derivada isotérmica da pressão, entropia específica, viscosidade dinâmica (μ) e condutividade térmica (λ).

A Figura 7 apresenta um recorte real de uma tabela gerada (exemplo da Tabela 1 - Entalpia), onde é possível visualizar a formatação matricial exigida:

1. Vetores de Entrada (Caixas Vermelha e Azul): As primeiras linhas definem os valores discretos de Temperatura e Pressão que compõem a malha.
2. Matriz de Dados (Caixa Preta): O corpo central contém os valores da propriedade calculada para cada par T-P. Para uma malha típica de CO₂ configurada neste trabalho (800 pontos de temperatura e 1000 de pressão), este bloco contém 800.000 entradas calculadas.
3. Linhas de Saturação (Caixa Roxa): Ao final de cada tabela, existem duas linhas cruciais. A primeira lista a Temperatura de Saturação T_{sat} para cada pressão, e a segunda lista o valor da propriedade naquela condição. Esses

dados garantem que o solver calcule a transição entre vapor e líquido de forma suave, sem instabilidades numéricas.

Figura 7 — Exemplo real de formatação de uma tabela .rgp gerada

117	\$TABLE_1				
118	10	15			
119	2.4000000E+002	3.2888889E+002	4.1777778E+002	5.0666667E+002	5.9555556E+002
120	6.8444444E+002	7.7333333E+002	8.6222222E+002	9.5111111E+002	1.0400000E+003
121	1.0000000E+006	6.1428571E+006	1.5285714E+007	2.2428571E+007	2.9571429E+007
122	3.6714286E+007	4.3857143E+007	5.1000000E+007	5.8142857E+007	6.5285714E+007
123	7.2428571E+007	7.9571429E+007	8.6714286E+007	9.3857143E+007	1.0100000E+008
124	4.4237240E+005	5.2550999E+005	6.0998246E+005	6.9924318E+005	7.9316500E+005
125	8.9123273E+005	9.9290985E+005	1.0977024E+006	1.2051728E+006	1.3149421E+006
126	1.2758580E+005	4.4721205E+005	5.7484697E+005	6.7718314E+005	7.7793174E+005
127	8.8026764E+005	9.8489024E+005	1.0918481E+006	1.2009821E+006	1.3120714E+006
128	1.2897152E+005	3.3052166E+005	5.3741496E+005	6.5590010E+005	7.6379841E+005
129	8.7032478E+005	9.7774976E+005	1.0867338E+006	1.1974106E+006	1.3097187E+006
130	1.3078734E+005	3.0936862E+005	5.0370394E+005	6.3661272E+005	7.5111793E+005
131	8.6149726E+005	9.7149044E+005	1.0823291E+006	1.1944184E+006	1.3078436E+006
132	1.3291915E+005	3.0160869E+005	4.7958016E+005	6.2037117E+005	7.4018879E+005
133	8.5387623E+005	9.6613065E+005	1.0786248E+006	1.1919862E+006	1.3064242E+006
134	1.3529329E+005	2.9796800E+005	4.6442857E+005	6.0751508E+005	7.3112145E+005
135	8.4749373E+005	9.6167260E+005	1.0756114E+006	1.1901005E+006	1.3054464E+006
136	1.3785924E+005	2.9635809E+005	4.5509272E+005	5.9776234E+005	7.2383210E+005
137	8.4230653E+005	9.5808750E+005	1.0732671E+006	1.1887440E+006	1.3048963E+006
138	1.4058072E+005	2.9596536E+005	4.4929873E+005	5.9059406E+005	7.1812391E+005
139	8.3821415E+005	9.5531703E+005	1.0715550E+006	1.1878919E+006	1.3047561E+006
140	1.4343076E+005	2.9638556E+005	4.4578101E+005	5.8548157E+005	7.1377186E+005
141	8.3508938E+005	9.5328382E+005	1.0704258E+006	1.1875113E+006	1.3050036E+006
142	1.4638873E+005	2.9738748E+005	4.4380877E+005	5.8196523E+005	7.1056792E+005
143	8.3280370E+005	9.5190365E+005	1.0698229E+006	1.1875637E+006	1.3056120E+006
144	1.4943849E+005	2.9882610E+005	4.4293061E+005	5.7968356E+005	7.0833224E+005
145	8.3124133E+005	9.5109489E+005	1.0696884E+006	1.1880077E+006	1.3065517E+006
146	1.5256717E+005	3.0060431E+005	4.4285584E+005	5.7836899E+005	7.0691110E+005
147	8.3030349E+005	9.5078401E+005	1.0699672E+006	1.1888023E+006	1.3077921E+006
148	1.5576434E+005	3.0265382E+005	4.4339066E+005	5.7782532E+005	7.0617427E+005
149	8.2990717E+005	9.5090760E+005	1.0706091E+006	1.1899081E+006	1.3093029E+006
150	1.5902143E+005	3.0492477E+005	4.4440132E+005	5.7790541E+005	7.0601341E+005
151	8.2998221E+005	9.5141207E+005	1.0715701E+006	1.1912895E+006	1.3110553E+006
152	1.6233130E+005	3.0737963E+005	4.4579235E+005	5.7849590E+005	7.0634002E+005
153	8.3046862E+005	9.5225240E+005	1.0728128E+006	1.1929144E+006	1.3130228E+006
154	2.3592825E+002	3.0412820E+002	3.0412820E+002	3.0412820E+002	3.0412820E+002
155	3.0412820E+002	3.0412820E+002	3.0412820E+002	3.0412820E+002	3.0412820E+002
156	3.0412820E+002	3.0412820E+002	3.0412820E+002	3.0412820E+002	3.0412820E+002
157	4.3529630E+005	2.8763232E+005	2.6206004E+005	2.5549481E+005	2.5274034E+005
158	2.5178030E+005	2.5188512E+005	2.5270005E+005	2.5402355E+005	2.5572943E+005
159	2.5773318E+005	2.5997530E+005	2.6241230E+005	2.6501138E+005	2.6774721E+005

Fonte: Elaboração do autor

2.2 Desenvolvimento do gerador de tabelas em Python

Após compreender a estrutura, desenvolveu-se o gerador automatizado utilizando Python como linguagem principal. A biblioteca CoolProp [6] foi escolhida como *backend* termodinâmico, utilizando a função de baixo nível PropSI para implementar as equações de estado Helmholtz e os modelos de mistura explicados na introdução.

Visando melhorar a experiência do usuário e a usabilidade da ferramenta, foram integradas as bibliotecas Colorama e Tqdm. Embora não contribuam para o cálculo termodinâmico, elas proporcionam uma visualização clara do processo: a primeira traz destaque visual (cores) para avisos e erros no terminal, e a segunda

implementa uma barra de progresso dinâmica, contendo informações como tempo total gasto, tempo estimado e média de processamento por tabela.

O código foi projetado para construir malhas tridimensionais T-P-x adaptadas ao fluido ou mistura de interesse, apresentando diversas funcionalidades acessíveis via terminal:

- Menu Interativo: Permite selecionar entre fluido puro ou mistura, definir limites automáticos ou manuais de temperatura e pressão, e personalizar o tamanho da malha.
- Feedback em Tempo Real: Barra de progresso da geração e resumo dos dados processados, conforme ilustrado na Figura 8.
- Estrutura Adaptada: Formatação automática de nomes (limite de 8 caracteres) e vetores (múltiplos de 5 colunas) para compatibilidade nativa com o CFX.

Figura 8 – Execução do gerador de tabelas RGP em Python

```
(venv) usuario@poliicorp:/media/usuario/PATRICK/ARQUIVOS ANTIGOS/LENOVO_DOCUMENTOS/TCC/TCC Python Code/codigo_python$ python rgp_table_generator.py

Tipo de entrada:
1 - Fluido puro
2 - Mistura de fluidos

Digite 1 para Fluido puro ou 2 para Mistura: 1

Exemplo de fluido puro: CO2
Digite o nome do fluido: co2

Propriedades críticas do fluido CO2:
T_triple = 216.59 K, T_crit = 304.13 K
P_triple = 0.518 MPa, P_crit = 7.377 MPa

Ranges automáticos que serão usados:
Temperatura: 218.6 K até 404.1 K
Pressão: 0.528 MPa até 8.853 MPa

Deseja inserir manualmente os limites de Temperatura e Pressão? (S/N): s

Definir o intervalo de Temperatura e Pressão:
Temperatura MÍNIMA [K]: 240
Temperatura MÁXIMA [K]: 1040
Pressão MÍNIMA [Pa]: 1e6
Pressão MÁXIMA [Pa]: 1.01e8
Digite o número de pontos de Temp. (ex: 15): 800
Digite o número de pontos de Pres. (ex: 10): 1000
Nome do fluido/mistura na tabela RGP(máx 8 caracteres, ex: CO2/METHCO2): CO2
Digite o nome do arquivo de saída (apenas o nome, sem extensão): CO2_EXEMPLO_TCC

Propriedades do fluido CO2:

Pres. mín. supraquec. = 1.000 MPa
Pres. máx. supraquec. = 101.000 MPa
Temp. mín. saturação = 240.0 K
Temp. máx. saturação = 304.1 K
Temp. mín. supraquec. = 240.0 K
Temp. máx. supraquec. = 1040.0 K
Supercooling = 0.0 K
Pres. crítica = 7.377 MPa
Pres. no ponto triplíce = 0.518 MPa
Temp. crítica = 304.1 K
Temp. no ponto triplíce = 216.6 K
Constante dos gases (R) = 188.9 J/(kg·K)

Tabelas principais: 56% | 5/9 [04:13:03:22, 50.74s/it]
```

Fonte: Elaboração do autor

O código completo, incluindo o README com exemplos de execução e parâmetros, está disponível no repositório público:

<https://github.com/mr-starfish/rgp-table-generator>.

2.3 Tratamento de Falhas e Pós-Processamento (Passo 2)

A geração resulta em dois arquivos: o arquivo bruto (<NOME>.rgp) e o arquivo pós-processado (<NOME>_CORRIGIDO.rgp). O segundo arquivo passa por uma etapa crítica de verificação de inconsistências numéricas. Ao lidar com regiões muito próximas ao ponto crítico ou nos limites da equação de estado, o CoolProp pode retornar valores NaN (*Not a Number*). Para corrigir essas lacunas sem comprometer a estabilidade da simulação, implementou-se um algoritmo de reconstrução linear com preservação de monotonicidade (Figura 9). O código identifica sequências de valores inválidos e realiza uma interpolação linear baseada nos vizinhos válidos imediatos, aplicando uma restrição (*clamping*) para garantir que a curva mantenha a tendência física da propriedade, evitando oscilações artificiais que causariam divergência no solver.

Figura 9 – Pós-processamento e correção automática das tabelas RGP

```
Propriedades do fluido CO2:
Pres. mín. supraquec. = 1.000 MPa
Pres. máx. supraquec. = 101.000 MPa
Temp. mín. saturação = 240.0 K
Temp. máx. saturação = 304.1 K
Temp. mín. supraquec. = 240.0 K
Temp. máx. supraquec. = 1040.0 K
Supercooling = 0.0 K
Pres. crítica = 7.377 MPa
Pres. no ponto triplíce = 0.518 MPa
Temp. crítica = 304.1 K
Temp. no ponto triplíce = 216.6 K
Constante dos gases (R) = 188.9 J/(kg·K)

Tabelas principais: 100% | 9/9 [08:38<00:00, 57.62s/it]

==== PASSO 2/2: REESCRITA (sem recálculo) ====
Reescrita: grid (1/2): 100% | 9/9 [00:02<00:00, 4.48tbl/s]
Reescrita: saturações (2/2): 100% | 9/9 [00:00<00:00, 1482.73tbl/s]

Arquivos gerados com sucesso:
  • CO2_EXEMPLO_TCC.rgp
  • CO2_EXEMPLO_TCC_CORRIGIDO.rgp (pós-processado: buracos corrigidos)
Tempo total: 530.6 segundos
Foram encontrados 8424 valores não calculados (NaN):
Tabela SAT_1: 936 warnings
Tabela SAT_2: 936 warnings
Tabela SAT_3: 936 warnings
Tabela SAT_4: 936 warnings
Tabela SAT_5: 936 warnings
Tabela SAT_6: 936 warnings
Tabela SAT_7: 936 warnings
Tabela SAT_8: 936 warnings
Tabela SAT_9: 936 warnings
Verifique os ranges e condições da mistura.

Você pode importar o arquivo diretamente no ANSYS CFX. O sufixo _CORRIGIDO traz a versão com buracos preenchidos por tendência.
(venv) usuario@policorp: /media/usuario/PATRICK/ARQUIVOS ANTIGOS/LENOVO_DOCUMENTOS/TCC/TCC_Python_Code/codigo_python$
```

Fonte: Elaboração do autor

2.4 Verificação das tabelas no CFX

A verificação da metodologia ocorreu em duas frentes: comparação numérica direta e validação via simulação CFD.

2.4.1 Comparação Numérica e Delta Máximo

Para validar a precisão dos dados gerados, comparou-se a nova tabela gerada via CoolProp (denominada "CO₂ Novo") com uma tabela de referência ("CO₂ Antigo"). É importante explicitar a origem desta referência: a tabela "CO₂ Antigo" foi gerada utilizando o software REFPROP através de um código acadêmico desenvolvido por uma universidade australiana, metodologia previamente utilizada e consolidada em trabalhos anteriores do grupo de pesquisa.

A métrica utilizada para quantificar a divergência, denominada Delta Máximo Médio ($\Delta_{\text{máx(médias)}}$), foi calculada através de um algoritmo que seleciona um subconjunto representativo de isobáricas e calcula a curva média da propriedade em função da temperatura. O erro é definido como a maior diferença absoluta encontrada entre a curva média gerada e a curva média de referência, conforme as Equações 1 e 2:

$$\bar{\phi}(T_i) = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K \phi(T_i, P_j) \quad (1)$$

$$\Delta_{\text{máx(médias)}} = \max_i |\bar{\phi}_{\text{gerado}}(T_i) - \bar{\phi}_{\text{ref}}(T_i)| \quad (2)$$

Onde as variáveis representam:

- K: Número de isobáricas (linhas de pressão constante) selecionadas para a amostragem (K = 16 neste trabalho).
- $\Phi(T_i, P_j)$: Valor pontual da propriedade termodinâmica na temperatura T_i e pressão P_j .
- $\Phi_{\text{méd}}(T_i)$: Valor médio da propriedade para uma dada temperatura, calculado sobre todas as isobáricas. Esta média suaviza ruídos locais e representa a tendência global da curva.

- $\Delta_{\text{máx(médias)}}$: O indicador final de erro, que corresponde à maior discrepância absoluta encontrada entre a tendência média gerada e a de referência em todo o domínio de temperatura.

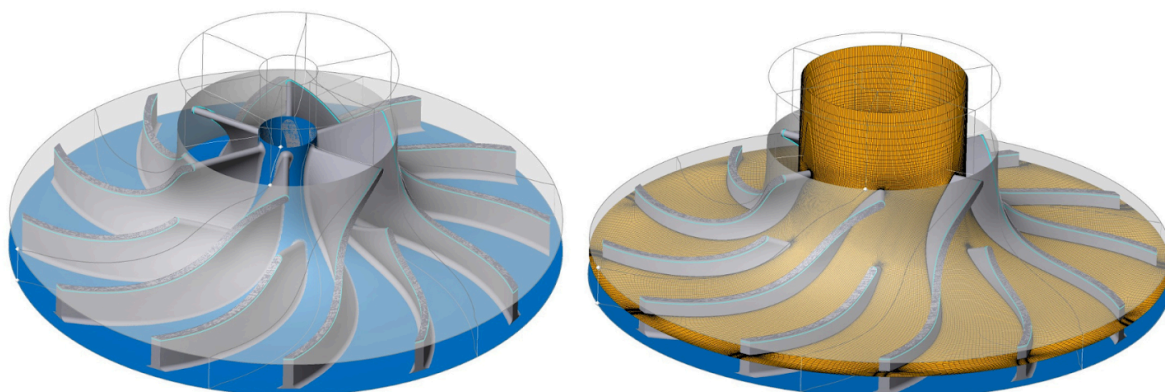
É fundamental ressaltar que este valor não representa um erro percentual, mas sim uma diferença absoluta expressa na mesma unidade da propriedade analisada (por exemplo, J/kg para entalpia ou Pa·s para viscosidade). A escolha por uma métrica absoluta evita distorções matemáticas que poderiam ocorrer ao calcular erros relativos em propriedades cujos valores numéricos tendem a zero ou mudam de sinal.

2.4.2 Teste em Simulação CFD (Caso Compressor)

Para atestar a robustez e aplicabilidade prática das tabelas .RGP desenvolvidas, elas foram aplicadas em uma simulação CFD de um impulsor de compressor centrífugo operando com s-CO₂. A geometria do rotor e a malha computacional utilizada podem ser vistas na Figura 10, e foi utilizada para investigar a sensibilidade geométrica para aplicações de Recuperação Aprimorada de Petróleo (EOR).

As simulações foram realizadas no software ANSYS CFX, utilizando a geometria discretizada com uma malha estruturada adequada para capturar os fenômenos de camada limite. O objetivo principal desta etapa foi verificar a capacidade do arquivo .RGP de fornecer propriedades estáveis ao solver, substituindo o modelo de gás ideal pela equação de estado real tabulada.

Figura 10 — Geometria do rotor do compressor centrífugo e malha computacional utilizada na simulação



Fonte: [17]

O modelo operou em regime permanente sob condições próximas ao ponto crítico do CO₂ uma região de alta não linearidade termodinâmica. A convergência bem-sucedida da simulação demonstrou que as tabelas geradas possuem a consistência e continuidade necessárias para suportar cálculos CFD complexos em regimes supercríticos [17].

3 RESULTADOS

Essa parte final iterativa de gerar tabelas, verificar com software e ajustar o código (como visto na Figura 4) é necessária porque a formatação não pode atrapalhar a leitura pelo software, isso inclui tabulações corretas, quantidade de caracteres limite, ordem do cabeçalho, indicação explícita de parâmetros, valores calculados para as tabelas que façam sentido, evitando zeros ou propriedades fora de limites possíveis etc, caso contrário os dados não convergiriam.

A cada erro uma nova função foi criada ou ajustada para que a similaridade com a tabela RGP já verificada fosse de 100%, e depois do último ajuste no código, os dados convergiram e o resultado ficou praticamente idêntico, exceto para a tabela 9 responsável pela condutividade térmica, mas ainda assim muito próximo. Na próxima seção será mostrada uma tabela contendo o $\Delta_{\text{máx(médias)}}$ para todas as 9 tabelas de propriedades, e um gráfico da tabela 1, na Figura 11, em que se compara a tabela RGP de referência e a gerada pelo programa em python.

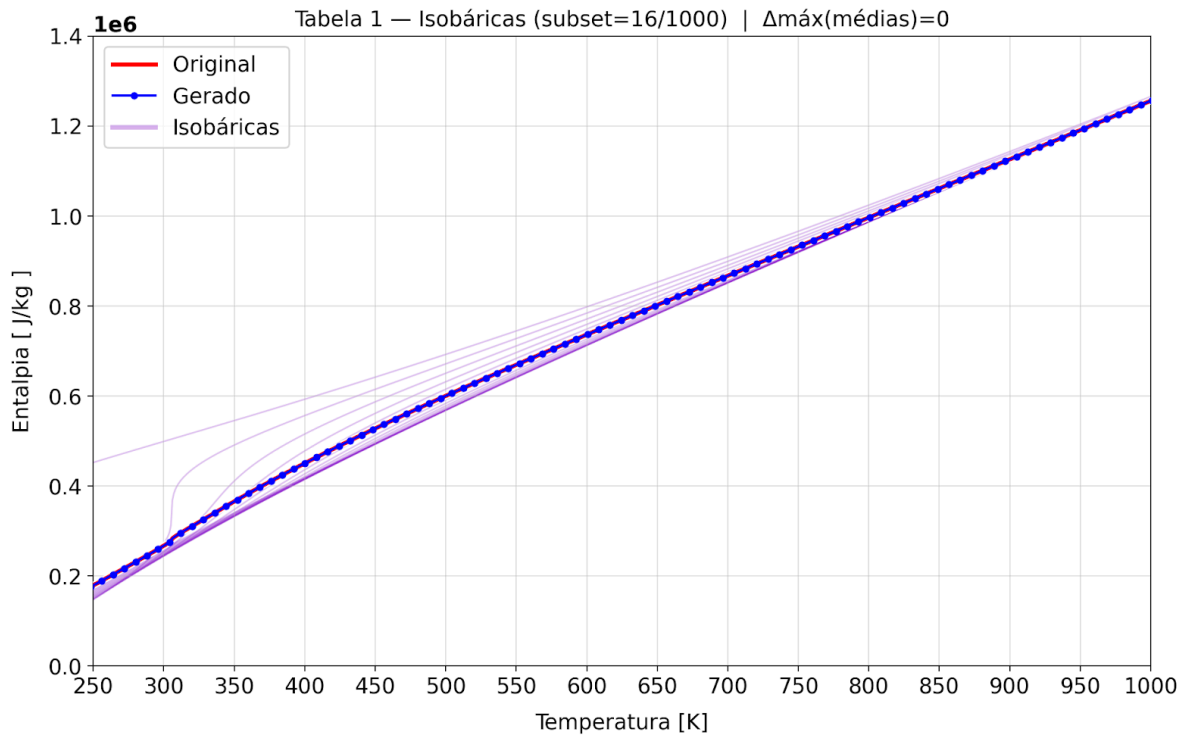
3.1 Comparação entre a tabela gerada e a tabela de referência para CO₂ puro

Antes de discutir cada propriedade, esclareço os elementos presentes nos gráficos: as curvas em vermelho correspondem aos valores “Originais” da tabela RGP de referência e as curvas em azul representam os valores “Gerados” pelo novo código Python, ambos calculados sobre a mesma malha de temperatura e pressão. As linhas lilases são isobáricas mostradas como contexto. Para não poluir as figuras, foi exibido apenas um subconjunto (por exemplo, “subset=16/1000” indica que 16 isobáricas de um universo de aproximadamente mil foram desenhadas). A comparação entre Original e Gerado, entretanto, é sempre realizada sobre o conjunto completo. No título de cada figura, o termo $\Delta_{\text{máx(médias)}}$ resume, para o subconjunto plotado, o maior valor absoluto do viés médio por isobárica entre as duas tabelas; valores próximos de zero indicam viés desprezível.

Quando a propriedade apresentada é o volume específico v , a análise solicitada de massa específica é feita via a relação $\rho=1/v$. A região crítica do CO₂, ponto central desta seção, está em torno de $T_c \approx 304$ K e $p_c \approx 7,38$ MPa; portanto, os comentários destacam o comportamento na janela de 290–330 K e em isobáricas abaixo, próximas e acima de p_c .

De forma geral, as nove propriedades apresentam concordância entre os dados Originais e os Gerados. Na Figura 11, a entalpia mostra sobreposição praticamente exata em toda a faixa de temperatura, com evolução quase linear nas isobáricas.

Figura 11 - Gráfico comparativo da tabela 1 que contém a propriedade de entalpia



Fonte: Elaboração do autor

Abaixo, na Tabela 1, pode-se comparar o $\Delta_{\text{máx(médias)}}$ de cada uma das 9 tabelas de propriedades.

Tabela 1 - $\Delta_{\text{máx(médias)}}$ de cada tabela de propriedade

Tabela	Propriedade	$\Delta_{\text{máx(médias)}}$
1	Entalpia	0
2	Velocidade do Som	0
3	Volume Específico	0
4	C_V	0
5	C_P	0
6	∂_p/∂_V	0
7	Entropia	0
8	Viscosidade Dinâmica	$2,6 \cdot 10^{-6}$
9	Condutividade Térmica	$4,7 \cdot 10^{-3}$

Fonte: Elaboração do autor

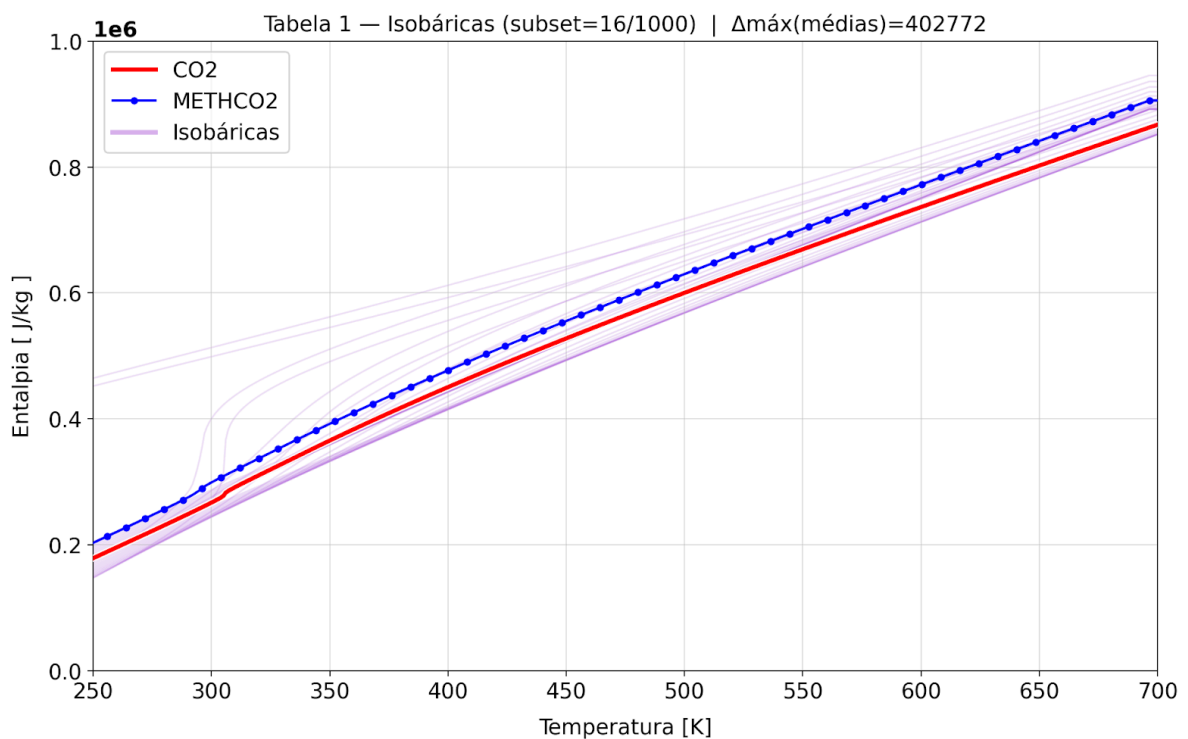
Concluída a análise do dióxido de carbono puro, observou-se que todas as nove propriedades apresentaram comportamento coerente entre a tabela de referência e a tabela gerada, com ênfase para o volume específico e o calor específico a pressão constante, cujas respostas confirmaram a consistência do algoritmo na vizinhança do ponto crítico. Essa verificação inicial forneceu segurança para a etapa seguinte, voltada à avaliação de misturas, que representa um avanço relevante dentro do escopo deste trabalho.

3.2 Comparação entre a tabela gerada e a tabela de referência para a mistura CO_2/CH_4 (9%)

Uma das principais motivações deste estudo foi expandir o gerador RGP para abranger não apenas fluidos puros, mas também misturas binárias simples, recurso até então inexistente nas ferramentas disponíveis. A geração bem-sucedida da primeira tabela de mistura, composta por dióxido de carbono com 9% de metano em fração molar, marca um passo importante na aplicação prática do código

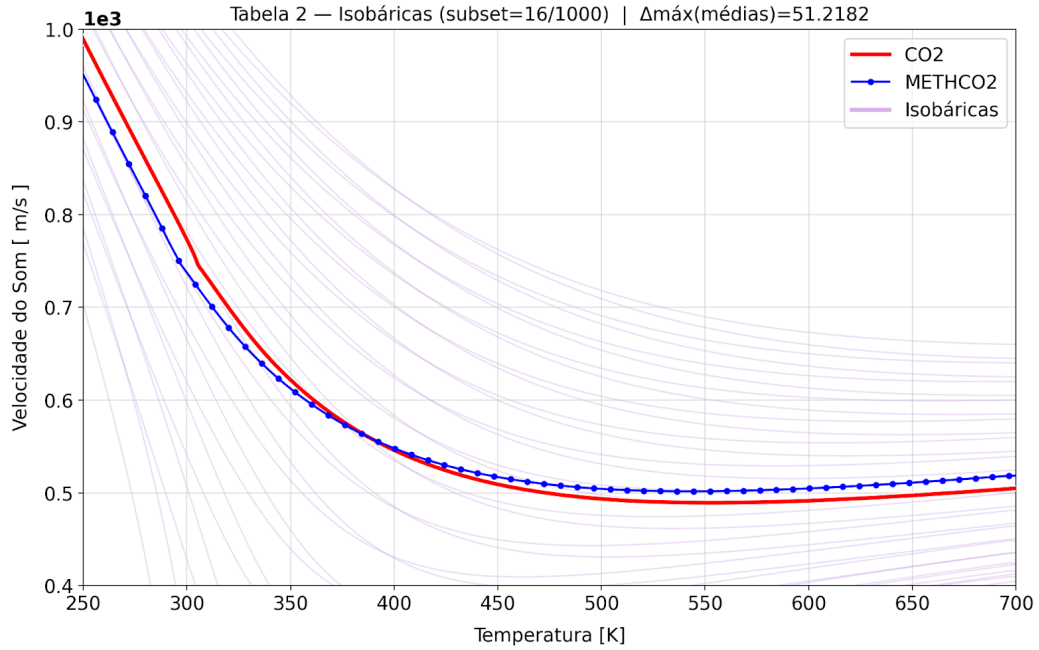
desenvolvido. A mistura foi processada sobre a mesma malha de temperatura e pressão utilizada para o CO₂ puro, permitindo analisar qual o impacto 9% de CH₄ tem, e foram gerados gráficos das 9 tabelas para mostrar visualmente esse impacto, apresentados a seguir, nas Figuras 12 a 20. Esclarece-se que os elementos gráficos são os mesmos, menos o $\Delta_{\text{máx(médias)}}$ já que não faz sentido comparar o desvio entre o fluido puro e a mistura.

Figura 12 - Gráfico comparativo da tabela 1 que contém a propriedade de entalpia



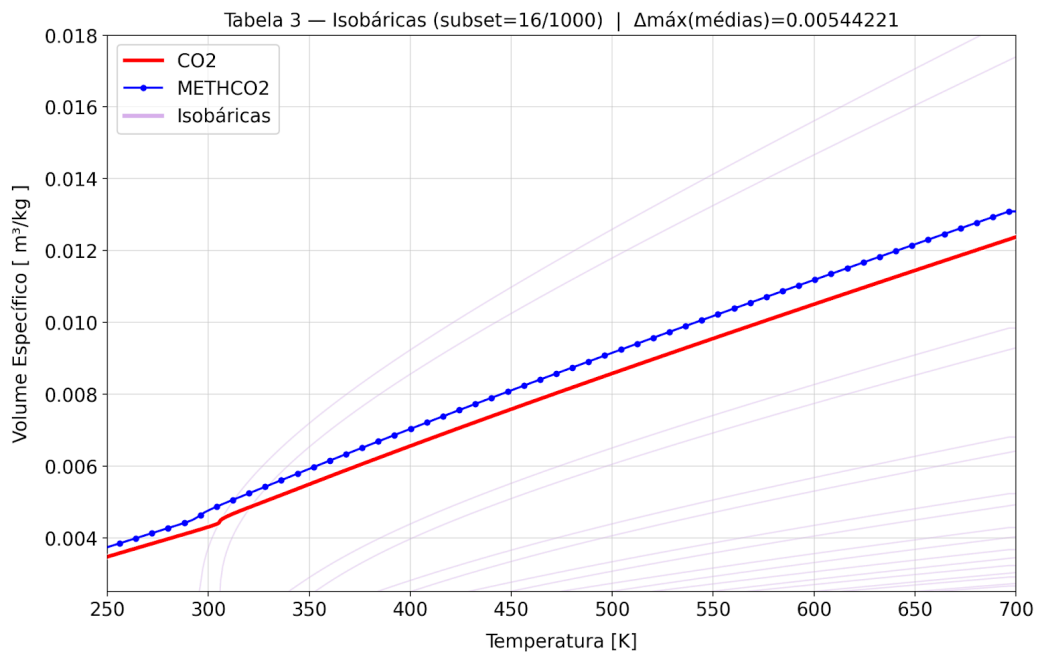
Fonte: Elaboração do autor

Figura 13 - Gráfico comparativo da tabela 2 que contém a propriedade de velocidade do som



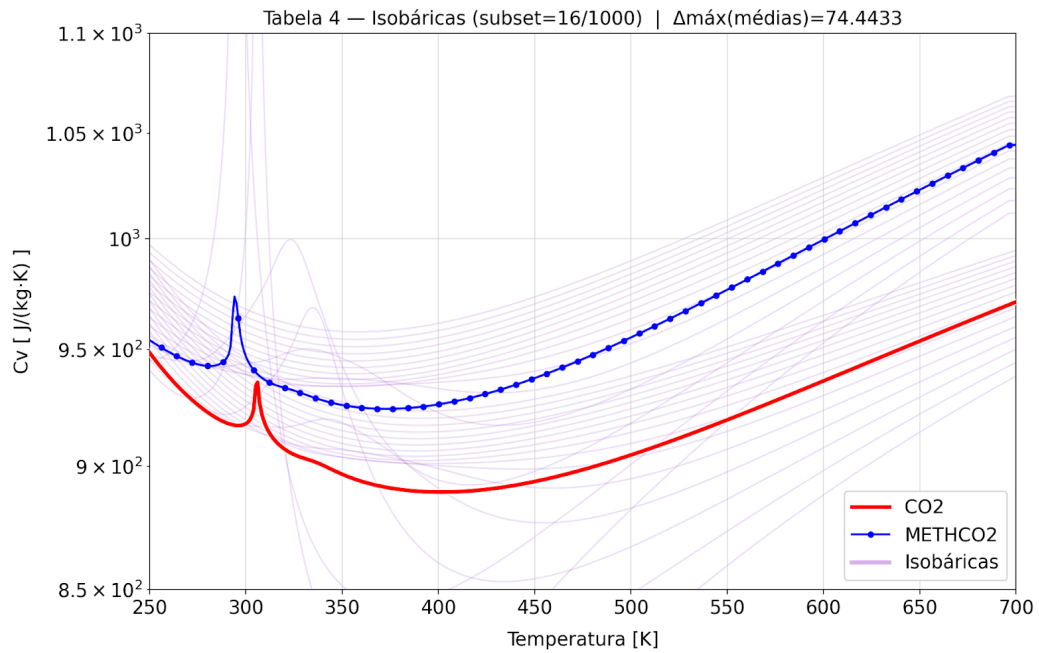
Fonte: Elaboração do autor

Figura 14 - Gráfico comparativo da tabela 3 que contém a propriedade de volume específico



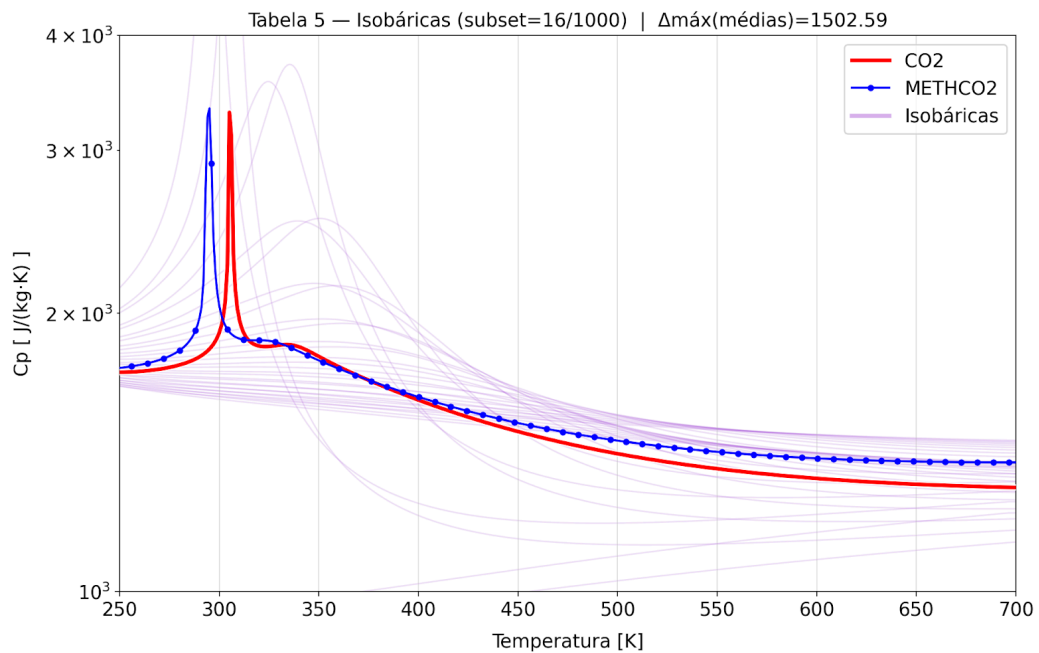
Fonte: Elaboração do autor

Figura 15 - Gráfico comparativo da tabela 4 que contém a propriedade de calor específico a volume constante



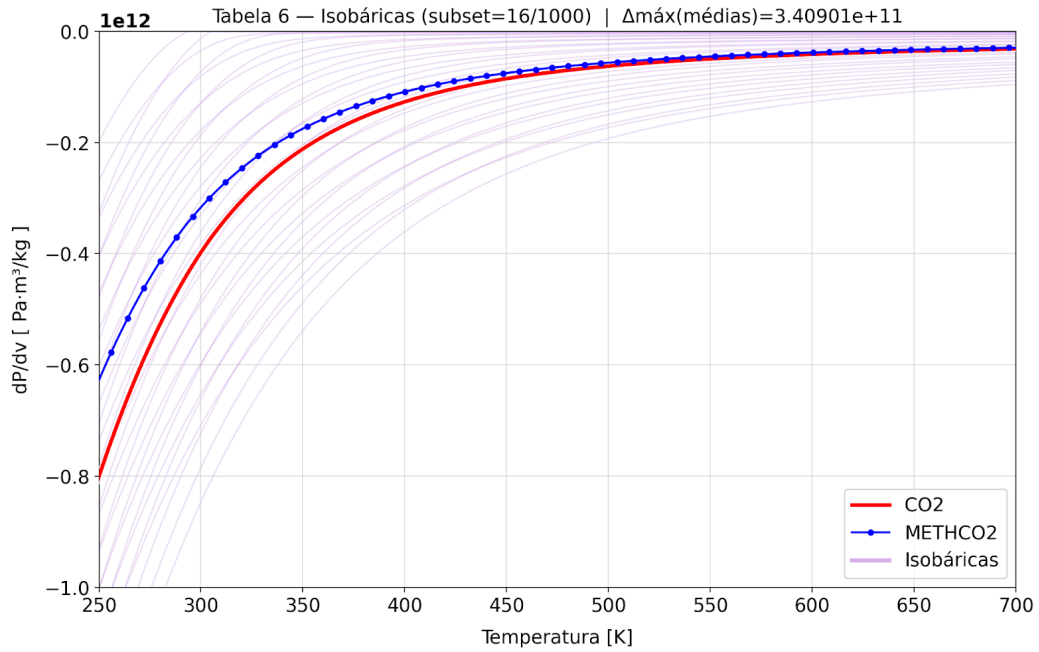
Fonte: Elaboração do autor

Figura 16 - Gráfico comparativo da tabela 5 que contém a propriedade de calor específico a pressão constante



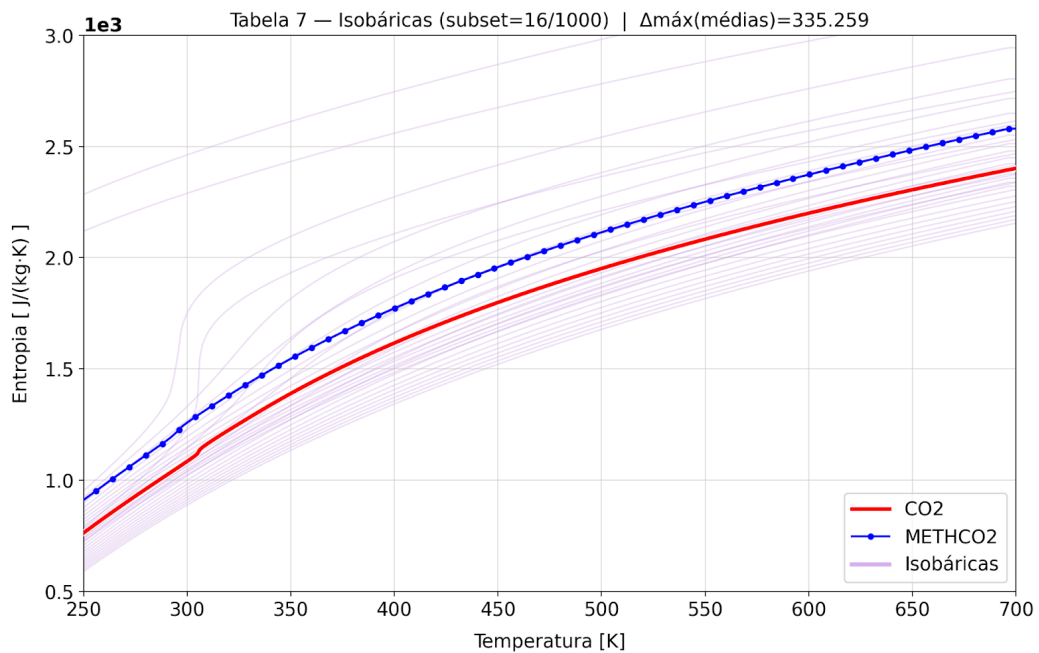
Fonte: Elaboração do autor

Figura 17 - Gráfico comparativo da tabela 6 que contém a propriedade da derivada parcial da pressão em função do volume específico a temperatura constante



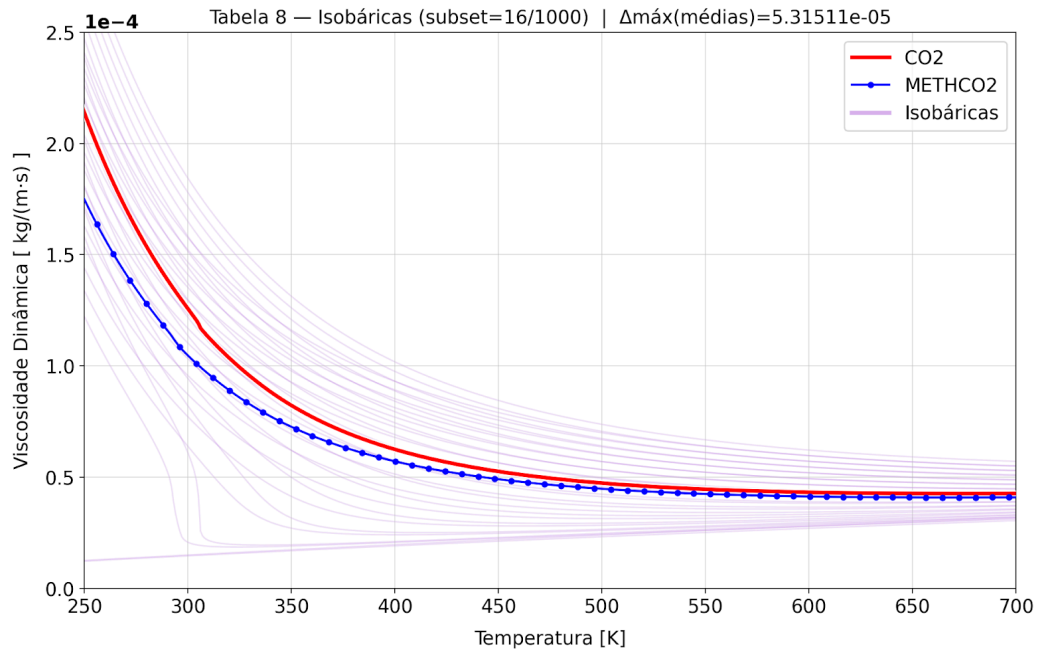
Fonte: Elaboração do autor

Figura 18 - Gráfico comparativo da tabela 7 que contém a propriedade de entropia específica



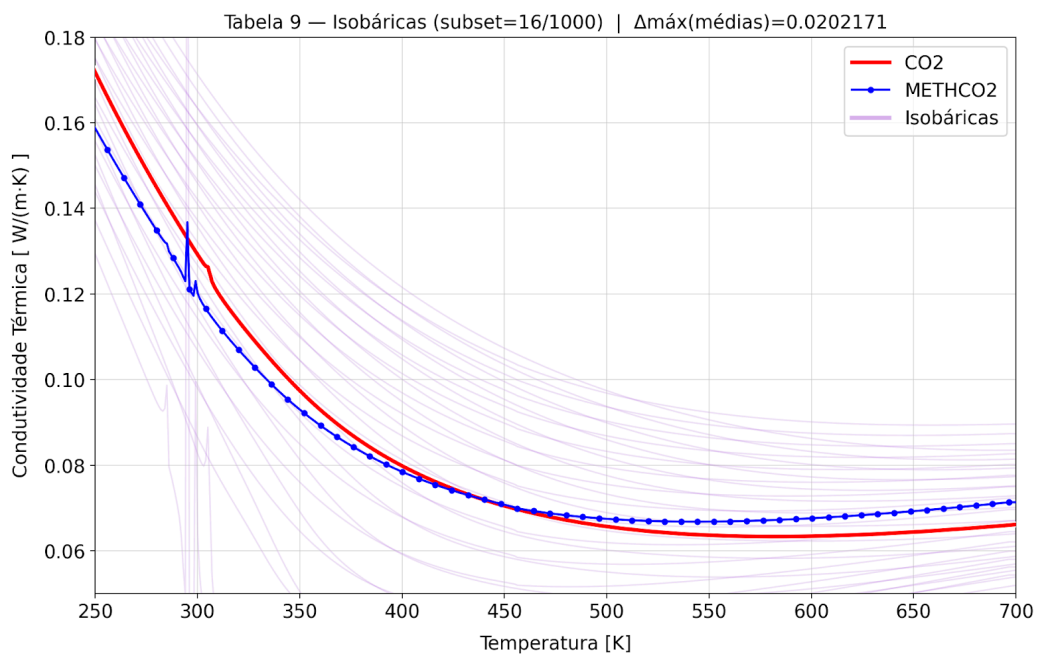
Fonte: Elaboração do autor

Figura 19 - Gráfico comparativo da tabela 8 que contém a propriedade de viscosidade dinâmica



Fonte: Elaboração do autor

Figura 20 - Gráfico comparativo da tabela 9 que contém a propriedade de condutividade térmica



Fonte: Elaboração do autor

Confirmada a coerência entre as tabelas geradas e a de referência, para o CO₂ puro, nota-se a consequência do metano para a mistura CO₂/CH₄ pelo deslocamento do ponto crítico para a direita, aumentando sua temperatura crítica. Para avaliar um pouco mais profundamente essas três tabelas, foram realizadas simulações no ANSYS CFX para comparar se essas diferenças de propriedades impactam o desempenho do escoamento. Os resultados dessas simulações são apresentados a seguir.

3.3 Resultados das simulações no ANSYS CFX

Com as tabelas verificadas, foi possível utilizá-las nas simulações de compressão no ANSYS CFX, de forma a avaliar se as diferenças observadas entre o CO₂ puro e a mistura CO₂/CH₄ teriam algum impacto real sobre o desempenho termodinâmico. Os três casos simulados foram mantidos sob as mesmas condições operacionais, variando apenas a origem dos dados termofísicos. Os resultados principais são apresentados na Tabela 1, que reúne a eficiência isentrópica (aproveitamento de energia), a razão de compressão PR (aumento de pressão obtido), o trabalho de compressão W_{com} (energia gasta no processo) e o tempo de processamento de cada simulação.

Tabela 2 - Resultados da Análise da Simulação Usando Tabela Verificada e Tabelas Geradas

Tabela	Eff. Isen. (%)	PR	W_{com} (kW)	Tempo (min)
CO ₂ Antigo	90,613	1,591	60,229	131
CO ₂ Novo	90,620	1,591	60,226	223
CO ₂ /CH ₄ (9%)	90,437	1,434	56,560	197

Fonte: Elaboração do autor

A comparação mostra que o CO₂ Antigo e o Novo apresentam desempenho praticamente idêntico. A eficiência isentrópica manteve-se em torno de 90,6%, com razão de compressão de 1,59 e trabalho de compressão próximo de 60,2 kW. A única diferença perceptível foi o tempo de processamento, que aumentou de

aproximadamente 90 min na nova tabela, indicando apenas mais cálculos sendo realizados por conta das interpolações da equação de estado, mas sem prejuízo à convergência.

Já a mistura CO₂ (91%)/CH₄ (9%) apresentou leve queda na eficiência isentrópica, reduzindo-se para 90,4%, acompanhada por uma diminuição considerável tanto da razão de compressão para 1,43 quanto do trabalho de compressão para 56,6 kW. Esse comportamento reflete o efeito esperado da presença do metano, que reduz a densidade média da mistura e, conseqüentemente, a energia necessária para a compressão.

Embora o tempo de processamento tenha variado ligeiramente, o impacto foi pequeno e não comprometeu a estabilidade da simulação. De forma geral, os resultados confirmam que a utilização das tabelas geradas não altera de maneira significativa o desempenho previsto pelo modelo CFD. As pequenas diferenças observadas entre o CO₂ puro e a mistura decorrem da adição do metano, e não de falhas no gerador. Assim, o código desenvolvido mostrou-se adequado tanto para a geração de tabelas de fluidos puros quanto para misturas simples, podendo ser empregado com confiança em aplicações futuras de análise termodinâmica e simulação numérica.

4 CONCLUSÃO

O desenvolvimento do gerador de tabelas termodinâmicas em Python atingiu o objetivo principal deste trabalho: criar uma ferramenta capaz de produzir tabelas RGP não apenas para fluidos puros, mas também para misturas binárias simples, mantendo precisão e compatibilidade com softwares de simulação. O processo exigiu um refinamento cuidadoso do código, principalmente na formatação e leitura dos arquivos, até que os resultados gerados fossem praticamente idênticos aos das tabelas originais de referência. A validação para o dióxido de carbono puro mostrou concordância quase total entre os dados gerados e os oficiais, comprovando a consistência numérica do algoritmo. Em seguida, a geração da primeira tabela de mistura CO₂ (91%)/CH₄ (9%) representou um avanço significativo, demonstrando que o gerador pode extrapolar o uso tradicional limitado a fluidos únicos. Mesmo com a inclusão de um segundo componente, as propriedades se modificam por conta apenas da adição do metano, o que reforça a robustez da metodologia implementada.

Outro ponto importante alcançado foi a atenção à experiência do usuário. O código foi estruturado para ser intuitivo, permitindo a inserção e configuração de parâmetros de forma simples, sem exigir conhecimento profundo de programação. Essa abordagem torna a ferramenta acessível para uso em ambientes acadêmicos e industriais, ampliando seu potencial de aplicação. Os testes no ANSYS CFX confirmaram que as tabelas geradas preservam o comportamento físico do escoamento, validando sua utilização prática em simulações de engenharia. Assim, o código proposto consolida-se como uma alternativa confiável, precisa e flexível para a geração de tabelas termodinâmicas, oferecendo um recurso inexistente nas ferramentas convencionais e abrindo caminho para futuras extensões, como o tratamento de misturas mais complexas e o acoplamento direto com softwares de CFD.

Como continuação deste trabalho, recomenda-se ampliar o gerador para permitir o cálculo de misturas complexas, além de mais misturas com três ou mais componentes, ultrapassando as limitações atuais das misturas binárias simples disponíveis no CoolProp. Essa evolução exigiria a implementação direta das correlações termodinâmicas e do cálculo das propriedades de mistura, tornando o

código mais completo. Além disso, pode-se desenvolver uma interface gráfica que simplifique o uso e a geração dos arquivos RGP, tornando a ferramenta ainda mais acessível para pesquisadores e engenheiros que necessitam de tabelas personalizadas para simulações numéricas e estudos termodinâmicos.

5 BIBLIOGRAFIA

- [1] NÓBREGA, Paulo Roberto Leite. **Manutenção de compressores centrífugos**: conheça o funcionamento de cada componente e as técnicas de manutenção de classe mundial. 2. ed. Rio de Janeiro: Instituto Brasileiro de Petróleo, Gás e Biocombustíveis, 2016.
- [2] SOONG, W. L. *et al.* Novel high-speed induction motor for a commercial centrifugal compressor. **IEEE Transactions on Industry Applications**, [S. l.], v. 36, n. 3, p. 706–713, 2000. DOI: 10.1109/28.845043.
- [3] GASPARIN, Elóy. *et al.* Constrained optimization of s-CO₂ compression train system through 1D approach under a new gas-like behavior constraint. **The Journal of Supercritical Fluids**, [S. l.], v. 199, p. 105956, 2023.
- [4] SOLLANT COMPRESSOR. **What is the major advantage and disadvantage of a centrifugal compressor?** Disponível em: <https://sollantcompressor.com/what-is-the-major-advantage-and-disadvantage-of-a-centrifugal-compressor/>. Acesso em: 13 ago. 2025.
- [5] PIPICH, Vitaliy; SCHWAHN, Dietmar. Densification of supercritical carbon dioxide accompanied by droplet formation when passing the Widom line. **Physical Review Letters**, [S. l.], v. 120, n. 14, p. 145701, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.145701>.
- [6] BELL, I. H. *et al.* Pure and Pseudo-pure Fluid Thermophysical Property Evaluation and the Open-Source Thermophysical Property Library CoolProp. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, [S. l.], v. 53, n. 6, p. 2498–2508, 2014.
- [7] ROUSSANALY, Simon; GRIMSTAD, Alv-Arne. The economic value of CO₂ for EOR applications. **Energy Procedia**, [S. l.], v. 63, p. 7836-7843, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2014.11.818>.
- [8] GE *et al.* Laboratory comparison of tertiary N₂, CH₄, and CO₂ injection into an Inland oil field sample. **Fuel**, [S. l.], v. 324, p. 124635, 2022.
- [9] JIN, L. *et al.* Evaluation of recycle gas injection on CO₂ enhanced oil recovery and associated storage performance. **International Journal of Greenhouse Gas Control**, [S. l.], v. 75, p. 151–161, 2018. DOI: 10.1016/j.ijggc.2018.06.001.
- [10] PEREIRA NETO, Antonio; YANAGIHARA, Jurandir Itizo. Impact of hydrogen-enriched methane on the aerodynamic performance of centrifugal compressors: a CFD analysis. **International Journal of Hydrogen Energy**, [S. l.], 2025. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2025.03.189.

- [11] LUNA-ORTIZ, E. *et al.* Impact of Hydrogen as Impurity in the Physical and Transport Properties of CO₂ Streams in CCS/CCUS Transport Systems: A Technical Discussion. *In: GREENHOUSE GAS CONTROL TECHNOLOGIES CONFERENCE (GHGT-15)*, 15., 2021. **Proceedings** [...]. [S. l.: s. n.], 2021. DOI: 10.2139/ssrn.3814810.
- [12] FANDIÑO, O.; TRUSLER, J. P. M.; VEGA-MAZA, D. Phase behavior of (CO₂ + H₂) and (CO₂ + N₂) at temperatures between 218.15 and 303.15 K at pressures up to 15 MPa. **International Journal of Greenhouse Gas Control**, [S. l.], v. 36, p. 78–92, 2015. DOI: 10.1016/j.ijggc.2015.02.018.
- [13] VITALI, M. *et al.* Thermodynamic challenges for CO₂ pipelines design: A critical review on the effects of impurities, water content, and low temperature. **International Journal of Greenhouse Gas Control**, [S. l.], v. 114, p. 103605, 2022. DOI: 10.1016/j.ijggc.2022.103605.
- [14] GASPARIN, Elóy. *et al.* High-dimensional CFD optimization of a low-flow coefficient s-CO₂ centrifugal compressor for enhanced oil recovery systems. **Journal of Geoenergy Science and Engineering**, [S. l.], v. 227, p. 211851, 2023.
- [15] KUNZ, O.; WAGNER, W. The GERG-2008 wide-range equation of state for natural gases and other mixtures: an expansion of GERG-2004. **Journal of Chemical & Engineering Data**, [S. l.], v. 57, p. 3032–3091, 2012. DOI: <http://dx.doi.org/10.1021/je300655b>.
- [16] ANSYS. **RGP Table structure**. ANSYS Innovation Space, [s. d.]. Disponível em: <https://innovationspace.ansys.com/knowledge/forums/topic/rgp-table-structure/>. Acesso em: 15 fev. 2025.
- [17] GIL, G. S. **Identificação de Parâmetros Geométricos Relevantes Através de Análise de Sensibilidade de Varredura em Modelo CFD de Compressores Centrifugos**. 2025. Relatório Final de Iniciação Científica (Processo FAPESP 2024/16470-0) – Faculdade de Engenharia, Universidade Estadual Paulista (UNESP), Ilha Solteira, 2025.