

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO

DEPARTAMENTO DE ENERGIA NUCLEAR

COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR

CENTRO REGIONAL DE CIÊNCIAS NUCLEARES DO NORDESTE

Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares

**AVALIAÇÃO DE INCERTEZA NAS MEDIDAS DE PARÂMETROS
FLUIDODINÂMICOS NA UPF**

FRANCISCO DE ASSIS SILVA TELES

RECIFE

2015

FRANCISCO DE ASSIS SILVA TELES

**AVALIAÇÃO DE INCERTEZA NAS MEDIDAS DE PARÂMETROS
FLUIDODINÂMICOS NA UPF**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação
em Tecnologias Energéticas e Nucleares para
obtenção do título de Doutor em Ciências, Área
de Concentração: Aplicações de radioisótopos
na indústria e medicina.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Costa Dantas

Co-orientador: Prof. Dr. Silvio de Barros Melo

RECIFE

2015

Catálogo na fonte

Bibliotecária Margareth Malta, CRB-4 / 1198

T269a Teles, Francisco de Assis Silva.

Avaliação de incerteza nas medidas de parâmetros fluidodinâmicos na
UPF / Francisco de Assis Silva Teles. - Recife: O Autor, 2015.

90 folhas, il., gráfs., tabs.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Costa Dantas.

Coorientador: Prof. Dr. Silvio de Barros Melo.

Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG.
Programa de Pós-Graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares,
2015.

Inclui Referências e Apêndice.

1. Energia Nuclear. 2. Modelos discreto e contínuo. 3. Transmissão
gama. 4. Fluidodinâmica do FCC. 5. Simulação estocástica. I. Dantas,
Carlos Costa. (Orientador). II. Melo, Silvio de Barros. (Coorientador). III.
Título.

UFPE

621.4837 CDD (22. ed.)

BCTG/2015-213

APROVADA EM : 13.03.2015

ORIENTADOR: Prof. Dr. Carlos Costa Dantas

CO-ORIENTADOR: Prof. Dr. Silvio de Barros Melo

COMISSÃO EXAMINADORA:

Prof. Dr. Carlos Costa Dantas – DEN/UFPE

Prof. Dr. Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira – DEN/UFPE

Prof. Dr. Emerson Alexandre de Oliveira Lima – UPE

Prof. Dr. José Wilson Vieira – IFPE

Prof. Dr. Mario Augusto Bezerra da Silva – DEN/UFPE

Prof. Dr. Enivaldo Santos Barbosa - DEM/UFCG

Visto e permitida a impressão

Coordenador(a) do PROTEN/DEN/UFPE

Dedico este trabalho

Aos meus pais:

José Lins Teles e Maria do Carmo Silva Teles (In memoriun)

Ao meu grande amor:

Aldalícia

Aos meus irmãos:

Maria de Lourdes, Amaro, José e Romualdo

Aos meus filhos:

Fabício, Lorena e Juliana

À minha neta:

Laura.

AGRADECIMENTOS

Aos professores

Carlos Costa Dantas e Silvio de Barros Melo, pela amizade e orientação.

Aos professores Mário Augusto Bezerra da Silva (DEN/UFPE) e Enivaldo Santos Barbosa (UFCG/PB), pela participação da comissão examinadora, e aos professores Carlos Alberto Brayner de Oliveira Lira (DEN/UFPE), Emerson Alexandre de Oliveira Lima (POLI/UFPE) e José Wilson Vieira (IFPE) que compuseram o comitê de acompanhamento.

Aos professores Rajendra Narain (DEN/UFPE) e Elmo Araújo (DEN/UFPE) pelas sugestões e colaborações.

Às professoras Helen Jamil Khoury e Olga Vilela pela amizade e incentivo.

Aos colegas do grupo do Departamento de Energia Nuclear (DEN/UFPE): Antonio Otavio, Alex, Carol, Márcio, João e Zacharias.

A equipe da secretária da pós-graduação especialmente a Nilvânia.

A todos a minha gratidão, pela amizade e incentivo.

Resumo

Foi investigada a incerteza em modelos: discreto e contínuo que descrevem a fluidodinâmica do riser na UPF - Unidade Piloto a Frio tipo FCC – *Fluid Cracking Catalyst*. O processo de refino de petróleo produz metade da gasolina consumida no mundo e se mantém competitivo com pesquisa e desenvolvimento em duas linhas básicas: a cinética e a fluidodinâmica. Na determinação dos parâmetros fluidodinâmicos a técnica da transmissão da radiação gama é competitiva por realizar medidas não intrusivas. Os sinais emitidos por fonte de radiação e detectados em sistema de aquisição são os utilizados para realizar a Tomografia Gama a mais confiável para analisar o processo de FCC. As medidas experimentais são requeridas para validar os modelos teóricos que simulam o escoamento do leito fluidizado bifásico. No processo de validação dos modelos fluidodinâmicos é necessário avaliar a incerteza dos dados experimentais. O método de avaliar incerteza baseado no GUM – *Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement*, foi aplicado a um modelo discreto que descreve fração volumétrica de sólidos no riser, medida por meio da transmissão gama. Os resultados estão apresentados em gráficos e discutidos. A simulação estocástica para avaliação da incerteza, em modelo contínuo unidimensional que descreve o escoamento utilizando os parâmetros medidos experimentalmente, foi realizada e implementada em algoritmo computacional por meio de equações diferenciais estocásticas.

Palavras-chave: Modelos Discreto e Contínuo. Transmissão Gama. Fluidodinâmica do FCC. Simulação Estocástica.

Abstract

We investigated the uncertainty in models: discrete and continuous describing the fluid in the riser UPF - Unit Pilot Cold type FCC - Fluid Cracking Catalyst. The petroleum refining process produces half of the gasoline consumed in the world and remains competitive with research and development in two basic lines: the kinetics and fluid dynamics. In determining the fluid dynamic parameters of the transmission of gamma radiation technique is competitive to perform non-intrusive measures. The signals emitted by radiation source and detected in acquisition system are used to perform tomography range the most reliable to analyze the FCC process. The experimental measurements are required to validate the theoretical models that simulate the flow of two-phase fluidized bed. In the validation process of the fluid dynamic models is necessary to evaluate the uncertainty of the experimental data. The method of evaluating uncertainty based on GUM - Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement, was applied to a discrete model that describes volume fraction of solids in the riser, measured by the transmission range. The results are shown in graphs and discussed. The stochastic simulation to evaluate the uncertainty in continuous one-dimensional model describing the flow using the experimentally measured parameters was carried out and implemented in computational algorithm using stochastic differential equations.

Keywords: Discrete and Continuous Models. Transmission Gamma. FCC Fluid Dynamics. Stochastic Simulation.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Incerteza relativa versus fração volumétrica de sólido.....	20
Figura 2 - Aplicação 1 (calibração de massa).....	41
Figura 3 - Uma visão esquemática da UPF com circulação de sólidos indicado pelas setas, na parte superior, uma câmera com os ciclones para separar a fase sólida. À esquerda, o riser, três sensores de pressão (PT) e três arranjos com fonte gama em posição oposta ao detector.	45
Figura 4 - Aplicação no cálculo da fração volumétrica de sólidos.....	50
Figura 5 - Intensidade versus fração volumétrica de sólidos.....	52
Figura 6 - Incerteza relativa versus fração volumétrica de sólidos	53
Figura 7 - Incerteza relativa versus fração volumétrica (só variáveis).....	54
Figura 8 - Intensidade relativa versus fração volumétrica de sólidos.....	55
Figura 9 - Todos os valores de ρ podem ser determinados com a condição dada.....	58
Figura 10 - A relação I_v/I_F satisfaz a Equação 18, todos os pontos podem ser medidos	58
Figura 11 - Com $I_v = 2.10^4$ não temos medida significativa para $< 1\%$	59
Figura 12 - Com $I_v = 2.10^4$ não se tem medida significativa para $< 1\%$	59
Figura 13 - Com $I_v = 1.10^6$ o intervalo pode ser medido.	60
Figura 14 - Com $I_v = 1.10^6$ todos os pontos podem ser medido.	60
Figura 15 – Dados experimentais (tubo vazio).....	62
Figura 16 - Dados experimentais (concentração de sólidos – amostra 2).	63
Figura 17 - Dados experimentais (concentração de sólidos – amostra 3).	63
Figura 18 - Dados experimentais (concentração de sólidos – amostra 4).	64
Figura 19 - Dados experimentais (concentração de sólidos – amostra 5)	64
Figura 20 - Médias da concentração das cinco amostras observadas.....	65
Figura 21 - Incerteza padrão relativa versus as médias de I_v em círculo e de quatro concentrações do catalisador.	65
Figura 22 - Intensidade relativa para concentração de sólidos de 4 amostras	66
Figura 23 -A fração volumétrica de sólidos ao longo do riser.	67
Figura 24 - Velocidade da fase gasosa (U_g).....	68
Figura 25 - Exemplo de uma solução numérica para a dinâmica do riser (1º resultado).	68
Figura 26 - Exemplo de uma solução numérica para a dinâmica do riser (2º resultado).	69

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 : Resultados do método de incerteza GUM - ($\delta = 0,0005$).....	46
Tabela 2 : Resultado do método Monte Carlo - ($\delta = 0,0005$).....	46
Tabela 3 : Resultados do método de incerteza GUM - ($\delta = 0,005$)	47
Tabela 4 : Resultados do Método Monte Carlo - ($\delta = 0,005$).....	47
Tabela 5 : Resultados do método de incerteza GUM - ($\delta = 5e-007$).....	48
Tabela 6 : Resultados do Método Monte Carlo - ($\delta = 5e-007$).....	48
Tabela 7 : Resultados do método de incerteza GUM - ($\delta = 0.05$)	48
Tabela 8 : Resultados do método de incerteza GUM - ($\delta = 0.05$)	48
Tabela 9 : Resultados do Método GUM - ($\delta = 0.0005$).....	49
Tabela 10 : Resultados do Método Monte Carlo - ($\delta = 0.0005$).....	49
Tabela 11 : Intervalos de confiança por método.....	49
Tabela 12 : Resumo da avaliação do método 1 e 2 do GUM	57

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	12
1.1 Objetivos.....	13
1.1.1 Geral	13
1.1.2 Específicos.....	13
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	14
2.1 Modelar dados discretos e contínuos	14
2.1.1 Modelar dados discretos.	14
2.1.2 Modelar dados contínuos.....	14
2.1.3 Problemas de medição	14
2.1.4 Incerteza de medição	15
2.1.5 Incerteza nas Medidas do Fluxo de Sólidos	18
2.2 Métodos de avaliação da incerteza expandida	22
2.3 Análise de sensibilidade.....	24
2.4 Método de Monte Carlo (MMC)	25
2.5 Avaliação da incerteza em modelo contínuo	26
2.6 Aplicação das equações diferenciais estocásticas (SDEs).....	27
2.7 Integrais estocásticas	30
2.8 Métodos numéricos.....	31
3. METODOLOGIA.....	34
3.1 Métodos de computação	35
3.1.1 Computação em modelos discretos	35
3.1.2 Computação em modelos contínuos	41
3.2 Modelo fluidodinâmico.....	43
3.3 Descrição da UPF.....	44

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	45
4.1 Cálculo da incerteza expandida.....	46
4.1.1 Validação dos resultados do experimento 1 - Calibração de massa	46
4.1.2 Experimento 2 - Cálculo da fração volumétrica de sólidos.....	47
4.2 Calculando a incerteza	50
4.2.1 Avaliação da incerteza em modelo contínuo	50
4.2.2 Simulação do modelo determinístico.	51
4.3 Aplicação da incerteza no cálculo da fração volumétrica de sólidos	55
4.3.1 Problemas de medição	55
4.3.2 Avaliação da condição limite	57
4.4 Avaliação de resultados.....	61
4.4.1 Análise do fluxo de sólidos no riser da UPF.	62
4.4.2 Resultados da simulação do modelo fluidodinâmico estocástico.....	67
5. CONCLUSÕES	70
REFERÊNCIAS	71
APÊNDICE A.....	74

1. INTRODUÇÃO

O processo de refino de petróleo FCC – *Fluid Cracking Catalyst* produz metade da gasolina consumida no mundo e se mantém competitivo com pesquisa e desenvolvimento em duas linhas básicas: a cinética e a fluidodinâmica. A linha de pesquisa em cinética química estuda as reações do craqueamento catalítico e os processos térmicos associados que ocorrem no riser, o reator da refinaria. A fluidodinâmica vai investigar os fluxos da fase gasosa e sólida, e as relações de velocidade, entre elas, a velocidade de *slip no riser*. O desenvolvimento obtido em ambas as linhas cinética e fluidodinâmica deverá ser consolidado por meio de modelos que vão simular o processo industrial do refino de petróleo. A validação do modelo de simulação será ferramenta básica para executar o processo de scale-up, por meio do qual, se espera transferir o conteúdo da inovação para o processo de FCC.

Para acessar a investigação da fluidodinâmica do processo de refino do petróleo, foi projetada e instalada a UPF (Unidade Piloto a Frio), no Departamento de Energia Nuclear da UFPE, com o objetivo de determinar parâmetros do escoamento bifásico do leito fluidizado ar comprimido e catalisador de FCC. A UPF opera em regime de *CFB – Circulating Fluidized Bed* como uma unidade do tipo FCC. As variáveis independentes do sistema são medidas online: a vazão do ar, a pressão e a transmissão da radiação gama. A medida da radiação é requerida por ser não invasiva, além de que a tomografia gama é a mais competitiva para análise do *riser* (DUDUKOVIC, 2000). Um sinal emitido por fonte radioativa e detectado através de um cilindro de aço de 60 m de altura, diâmetro de 1 m com paredes 0,2 m é o método mais confiável nas condições de operação de uma refinaria.

Os parâmetros estudados - a fração volumétrica de sólidos, a sua distribuição axial e radial, e as velocidades das duas fases, são calculados a partir das variáveis medidas online. A fração volumétrica de sólidos é calculada com medidas da transmissão gama com a equação dada por (WIRTH, 1991). Estes valores foram utilizados na solução das equações do modelo fluidodinâmico unidimensional (MELO, 2004).

A validação dessa simulação para o riser de mesma geometria e dimensões maiores foi investigado, pelo método perturbativo, e aplicado à análise da sensibilidade dos parâmetros do modelo unidimensional por (FARIAS, 2007). Um modelo para estimar o erro nas medidas da distribuição radial da fração volumétrica de sólidos devido ao efeito da parede do tubo-riser foi proposto (DANTAS, 2006). As medidas da radiação e a estimativa de parâmetros

fluidodinâmicos na UPF, por meio da análise dos componentes principais, foram pesquisados por (SANTOS, 2011). Avaliação da incerteza na medida da transmissão gama foi comparada com simulação em CFD (Computacional Fluid Dynamics), (DANTAS, 2013). Os parâmetros fluidodinâmicos experimentais foram dados de entrada na simulação com CFD, (LIMA FILHO, 2014).

A experiência ao longo desses trabalhos na UPF tem sido com medidas experimentais requeridas para validar os modelos teóricos que simulam o escoamento do leito fluidizado bifásico. No processo de validação é necessário avaliar a incerteza dos dados experimentais. O método de avaliar incerteza baseado no GUM – *Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement* (2003) considera os modelos discretos cuja metodologia foi aplicada na determinação da fração volumétrica de sólidos na UPF, medida por meio da transmissão gama com o modelo proposto por (WIRTH, 1991). Essa metodologia combina as incertezas individuais, o que poderia ser considerada uma incerteza adicional, a possibilidade de expressar uma incerteza total combinada é verificada (CHOI et al., 2003). A necessidade de usar modelos contínuos foi apresentada por (BROCK, 1979). O trabalho de Barker (2004), sistematiza modelos por categoria e a literatura ISO-GUM é amplamente considerada. A partir desse ponto de vista a estrutura do modelo matemático e a solução numérica é o foco do trabalho, o qual basicamente foi proposto por (LORD; WEIGHT, 2003). A avaliação da incerteza por meio de métodos computacionais em modelos contínuos é bastante realizada por meio da CFD de acordo com (LORD; WEIGHT, 2003). Foi escolhida a implementação de equações estocásticas com computação simples no Matlab, adotando a metodologia de Higham, (2001). A simulação determinística do modelo fluidodinâmico unidimensional foi tomada como referência para avaliar a incerteza com dados da simulação estocástica.

1.1 Objetivos

1.1.1 Geral

Avaliar a incerteza na simulação do escoamento bifásico por meio de modelos que descrevam a fluidodinâmica no riser da UPF.

1.1.2 Específicos

1. Estimar a incerteza padrão nas medidas das variáveis independentes vazão de ar, pressão e intensidade da radiação gama ao longo do riser;
2. Avaliar a incerteza no modelo discreto que calcula a fração volumétrica de sólidos;

3. Avaliar a incerteza no modelo unidimensional que descreve a fluidodinâmica no riser da UPF.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Modelar dados discretos e contínuos

2.1.1 Modelar dados discretos.

Num experimento a temperatura T_i é medida simultaneamente em um número de pontos m localizados em posições (x_i, y_i) numa chapa retangular em estado estacionário. Os dados estão representados por uma matriz finita cuja i -ésima linha é (x_i, y_i, T_i) . A temperatura $t(x, y, \mathbf{a})$ é modelada como função da posição e do parâmetro $\mathbf{a}$. O problema da análise de dados é encontrar valores do parâmetro $\mathbf{a}$ tal que $t(x, y, \mathbf{a})$ melhor descreva os dados. Por exemplo, uma estimativa de $\mathbf{a}$ com os mínimos quadrados é obtida resolvendo:

$$\frac{\min}{\mathbf{a}} \sum_{i=1}^m (T_i - t(x_i, y_i, \mathbf{a}))^2 \quad (1)$$

Embora o modelo envolva fenômeno contínuo, a temperatura, mas a análise de dados é discreta uma vez que a função a ser minimizada é uma soma discreta baseada numa equação algébrica (BARKER, R. M., et al., 2004).

2.1.2 Modelar dados contínuos.

Duas bordas adjacentes de uma chapa são mantidas as temperaturas $g(x)$ e $h(y)$ onde g e h são funções conhecidas definidas nas distâncias x e y ao longo das bordas. O problema da análise de dados é determinar a temperatura em estado estacionário $t(x, y)$ em cada ponto sobre a barra, dado o coeficiente v de condução do calor do material. A análise de dados envolve a solução da equação de calor, uma equação diferencial parcial sujeita a condições de contorno.

Os dados são contínuos no sentido que g e h são definidas em cada ponto da borda não um número finito de pontos. Mas, a solução numérica envolve a discretização da equação a ser resolvida, (BARKER, R. M., et al., 2004).

2.1.3 Problemas de medição

Segundo o GUIDE (2003), talvez o componente de incerteza mais difícil de avaliar seja aquele associado com o método de medição, especialmente se a aplicação do método demonstrou dar resultados com menor variabilidade que os de quaisquer outros métodos conhecidos. Assim, muito embora a incerteza do método possa ser dominante, a única informação muitas vezes disponível para avaliar sua incerteza-padrão é o próprio

conhecimento existente do mundo físico. A determinação do mesmo mensurando por diferentes métodos, seja no mesmo laboratório, seja em laboratórios diferentes, ou pelo mesmo método em laboratórios diferentes, pode, muitas vezes, fornecer informação valiosa acerca da incerteza atribuível a um método em particular. Em geral, a troca de padrões de medição ou de materiais de referência entre laboratórios para medições independentes é um meio útil de avaliar a confiabilidade das avaliações de incerteza e de identificar efeitos não reconhecidos previamente.

Em algumas situações práticas de medição, a amostragem e o tratamento das amostras desempenham um papel muito mais importante. Este é, muitas vezes, o caso da análise química de materiais naturais. Ao contrário dos materiais feitos pelo homem, que podem ter uma homogeneidade comprovada em um nível bem acima do requerido para a medição, os materiais naturais são freqüentemente muito heterogêneos. Essa heterogeneidade conduz a dois componentes adicionais de incerteza. Primeiro, a avaliação requer a determinação da conformidade da amostra selecionada representar o material original sendo analisado. Segundo, a avaliação requer a determinação da extensão na qual os constituintes secundários (não analisados), influenciam a medição e como eles são tratados pelo método de medição, (INMETRO, 2003).

2.1.4 Incerteza de medição

Quando se relata o resultado de uma medição de uma grandeza física, é necessário que seja dada uma indicação quantitativa da qualidade do resultado de tal forma que a utilização desse resultado possa ser segura. A incerteza inerente ao resultado de uma medição reflete a falta de conhecimento exato do mensurando, ou seja, é impossível eliminar completamente os erros de medição.

A incerteza de medição consiste em um parâmetro associado ao resultado de uma medição, seja ela uma calibração ou um ensaio, que caracteriza a dispersão dos valores que podem ser atribuídos ao mensurando (INMETRO, 2003).

Na maioria dos casos o mensurando Y não é medido diretamente, mas é determinado a partir de N outras grandezas $X_1, X_2, \dots, X_N$ através de uma relação funcional f :

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_N) \quad (2)$$

Uma estimativa do mensurando Y é obtida da Equação (1) usando estimativas de entrada $x_1, x_2, \dots, x_N$, para os valores das N grandezas $X_1, X_2, \dots, X_N$. Assim, a estimativa de saída y , que é o resultado da medição, é dada por:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (3)$$

Na prática uma estimativa para y é obtida por :

$$y = \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n Y_k \quad (4)$$

Na maioria dos casos **a melhor estimativa da esperança ou valor esperado** μ_q de uma

variável aleatória Q , para a qual n observações independentes Q_k foram obtidas é a média $\bar{q}$

$$\bar{q} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n q_k \quad (5)$$

A variância experimental das observações, que estima a variância σ^2 da distribuição de probabilidade de q é dada por:

$$s^2(q_k) = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (q_k - \bar{q})^2 \quad (6)$$

Esta estimativa da variância e sua raiz quadrada positiva $s(q_k)$, denominada desvio padrão experimental, caracterizam a variabilidade dos valores Q_k , ou mais especificamente, sua dispersão em torno de sua média $\bar{q}$. A melhor estimativa de $\sigma^2(\bar{q}) = \sigma^2 / n$, a variância da média, é dada por:

$$s^2(\bar{q}) = \frac{s^2(q_k)}{n} \quad (7)$$

A variância experimental da média $s^2(\bar{q})$ e o desvio padrão experimental da média $s(q)$, quantificam o quanto $\bar{q}$ estima a esperança μ_q de Q , e qualquer um deles pode ser usado como medida da incerteza de $\bar{q}$, (INMETRO, 2003).

O número de observações n deve ser suficientemente grande para assegurar que $\bar{q}$ forneça uma estimativa confiável da esperança μ_q da variável aleatória Q e que $s^2(\bar{q})$ forneça uma estimativa confiável da variância $\sigma^2(\bar{q}) = \sigma^2 / n$. A diferença entre $s^2(\bar{q})$ e $\sigma^2(\bar{q})$ deve ser considerada quando se estabelecem intervalos de confiança. Neste caso, se a distribuição de

probabilidade de q não é exatamente uma distribuição normal, a diferença é levada em consideração através da distribuição *t-Student*.

Embora a variância $s^2(\bar{q})$ seja a grandeza mais fundamental, o desvio padrão $s(\bar{q})$ é mais conveniente na prática porque tem as mesmas dimensões de q .

A incerteza padrão de y , onde y é a estimativa do mensurando Y , e desta maneira, o resultado da medição, é obtido pela combinação apropriada de incertezas padrão das estimativas de entrada $x_1, x_2, \dots, x_N$.

A incerteza padrão combinada $u_c(y)$ é a raiz quadrada positiva da variância combinada $u_c^2(y)$, que é dada por:

$$u_c^2(y) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial f}{\partial x_i} \right]^2 u^2(x_i) \quad (8)$$

E a expressão para a incerteza relativa: $u_r = \frac{u_c}{y}$ (9)

A maior parte dos exemplos de avaliação da incerteza em medições apresentados no GUM são realizadas com base no resultado de uma única medição. No entanto, é muito comum em química analítica, por exemplo, se realizar várias medições, e relatar o resultado com um valor médio e sua incerteza. Aqui nós queremos determinar a incerteza total, combinando as incertezas dos resultados individuais quando a diferença desses resultados é estatisticamente significativa.

Dada uma estimativa da diferença nos resultados individuais de n medições, é necessário testar se esta diferença é estatisticamente significativa ou não. Se o teste de significância indica que não houve diferença nos resultados, o método padrão do GUM deve ser aplicado. No entanto, quando a diferença é considerada significativa, será preciso investigar para determinar a sua causa e efeito. Se a diferença não é devido a um efeito sistemático, resulta exclusivamente de um efeito aleatório. Para compensar a diferença de resultados individuais, um novo termo deve ser introduzido no sistema (como uma incerteza adicional resultante de um efeito aleatório), porque a incerteza decorrente de efeitos aleatórios pode ser reduzida em n medições, (CHOI et al., 2003).

2.1.5 Incerteza nas Medidas do Fluxo de Sólidos

Técnica do gradiente de pressão

A fração volumétrica de sólidos $1 - \varepsilon$ é avaliada na indústria por meio do perfil de pressão ΔP ao longo de ΔH , a distância entre dois medidores.

$$1 - \varepsilon = \frac{1}{(\rho_s - \rho_g)g} \frac{\Delta P}{\Delta H} \quad (10)$$

Com essa equação se obtém um valor médio da fração volumétrica de sólidos ao longo de ΔH , no perfil axial do riser.

Uma alternativa para medir a fração volumétrica de sólidos ε_s num único ponto, de modo não intrusivo é por meio da transmissão da radiação gama. A Equação (11) é a conhecida lei de Beer-Lambert, relaciona as intensidades incidente e emergente com o coeficiente de atenuação linear μ_L .

$$I = I_0 e^{-\mu_L x} \quad (11)$$

A Equação (12), é uma adaptação da Equação (11) ao riser (BARTOLOMEU R. N., 1957), as intensidades agora são I_V e I_F , para o tubo vazio e em condições de fluxo, relacionadas com o coeficiente de atenuação mássico μ_m .

A equação (12) mede a densidade média ao longo do diâmetro interno D .

$$\rho_m = \frac{1}{\mu_m D} \ln\left(\frac{I_V}{I_F}\right) \quad (12)$$

Técnica de atenuação da radiação gama

A Equação (13), proposta por (WIRTH, K.-E., 1991), que calcula a fração volumétrica de sólidos ε_s é formulada a partir da equação (12), dividindo-se os dois lados pela densidade do sólido ρ_m :

$$\varepsilon_s = \frac{1}{\mu_m \rho_m D} \ln\left(\frac{I_V}{I_F}\right) \quad (13)$$

Considera-se que as Equações (10) a (13) são modelos básicos para a análise da incerteza na fluidodinâmica do riser, a incerteza na medidas da radiação foi descrita por (DANTAS, C.C., 2006). Na aplicação a fração volumétrica de sólidos expressa pela Equação (13), devemos considerar que as Equações 1 e 6 que calculam a incerteza estão definidas para a distribuição normal; e que as intensidades IV, IF na Equação (13) obedecem a distribuição de Poisson, uma vez que são provenientes de emissão de radiação nuclear (GRASSLER e WIRTH, 1999). A probabilidade na distribuição de Poisson para um número x de observações é calculada por:

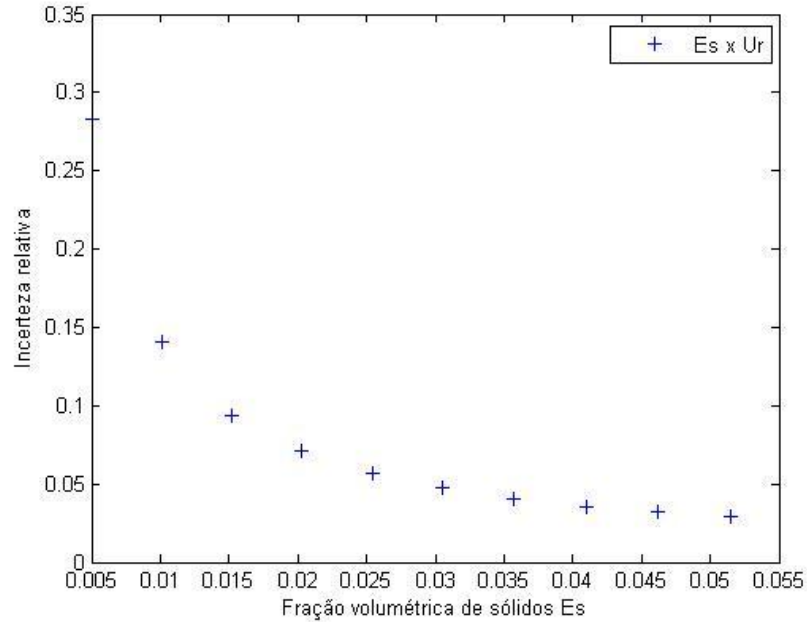
$$P(x) = \frac{\lambda^x \cdot e^{-\lambda}}{x!} \quad (14)$$

Onde λ é a média e o desvio padrão $\sigma = \sqrt{\lambda}$ ou seja, a variância é igual a média. Considerando N um número grande de contagens da radiação, o desvio padrão será $\sigma = \sqrt{N}$, porque com um valor da média λ grande e x grande a Equação (14) pode ser aproximada pela distribuição normal. Então, a média dada pela Equação (5), sendo um número grande e n também grande pode-se escrever:

$$N \cong \bar{q} \cdot n = \sum_{k=1}^n q_k. \quad (15)$$

Com essa condição N pode representar a média das contagens da radiação. A intensidade I esta relacionada ao número de contagens por $I = \frac{N}{t}$, no tempo t .

A condição limite do processo, é definida, observa-se na Figura 1, a incerteza nas medidas em na região de mais baixa concentração de sólidos.

Figura 1 - Incerteza relativa versus fração volumétrica de sólido

A Figura 1 mostra que na região da concentração mais baixa do catalisador, o valor da fração volumétrica decresce, significa que I_F se aproxima de I_V , e o limite inferior para a medida de ϵ_s , precisa ser determinado. Esta condição está apresentada na Equação (16), para o riser vazio $\epsilon_s = 0$ e completamente cheio de catalisador $\epsilon_s = 1$.

$$\epsilon_s = \begin{cases} 0, & \text{se } I_V = I_F \\ 1, & \text{se } I_V = I_F \cdot e^{D\mu\rho} \end{cases} \quad (16)$$

A condição de medida da fração volumétrica de sólidos ϵ_s entre os limites definidos em (16), é que I_V seja significativamente maior do I_F . A diferença entre as intensidades é significativa, de acordo com o teste t-Student,

$$t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{s\sqrt{1/n_1 + 1/n_2}} \quad (17)$$

$$\text{Onde } s = \sqrt{\frac{(n_1 - 1)s_1^2 + (n_2 - 1)s_2^2}{n_1 + n_2 - 2}} \quad (18)$$

E n é o número de medidas e $n_1 = n_2$, temos $s = \sqrt{\frac{s_1^2 + s_2^2}{2}}$ (19)

A Equação (17) é dada para uma distribuição normal, e o número de contagens N pode representar à média pela aproximação da distribuição dada na Equação (14) com a normal, conforme a Equação (15). Então podemos substituir as médias na Equação (17), pelas intensidades I_V e I_F , e com $I_V \neq I_F$ estatisticamente significativo, definir a condição quando I_V é significativamente maior do que I_F .

$$I_V > I_F + ts \sqrt{\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}} \quad (20)$$

Modelo Fluidodinâmico

Para a descrição do comportamento fluidodinâmico em reatores verticais gás-sólido, no estado estacionário, isotérmico e unidimensional, segundo (ARASTOPOUR;GIDASPOW¹,1979 apud Melo, 2004) os modelos matemáticos devem ser constituídos de equações básicas da conservação de massa do gás, conservação de massa do sólido, conservação de movimento da mistura gás-sólido e uma quarta equação característica que descreve a variação da fração volumétrica ao longo do riser, cuja dedução difere de modelo para modelo. As equações básicas necessárias para a simulação do modelo são:

(I) Equação de conservação da massa do gás;

$$\frac{\partial U_g}{\partial z} + \frac{U_g}{\varepsilon_g} \frac{\partial \varepsilon_g}{\partial z} = 0 \quad (21)$$

(II) Equação de conservação da massa do sólido;

$$\frac{\partial U_s}{\partial z} + \frac{U_s}{\varepsilon_s} \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial z} = 0 \quad (22)$$

(III) Equação de conservação da quantidade de movimento da mistura;

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -\frac{\partial}{\partial z} [\varepsilon_g (\rho_s U_s^2 - \rho_g U_g^2)] - (\varepsilon_s \rho_s + \varepsilon_g \rho_g)g - f_w \quad (23)$$

Onde z é a direção axial do riser (suposto unidimensional), U_g a velocidade axial do gás, U_s a velocidade axial da fase sólida e P a pressão da mistura no riser. Os parâmetros do

¹ARASTOPOUR;GIDASPOW, D. Vertical pneumatic using four hydrodynamic models. Ind. & Eng. Chem. V. 18, p. 123-130, 1993.

escoamento são ε_g a fração volumétrica do gás, ε_s a fração volumétrica da fase sólida (note que $\varepsilon_g = 1 - \varepsilon_s$), ρ_g a densidade do gás, ρ_s a densidade do catalisador sólido e g é a aceleração da gravidade. O termo f_w refere-se a força de atrito do gás com as paredes do riser medida por unidade de volume. A equação correspondente (equação de Fanning) é:

$$f_w = \frac{0.316 \rho_g U_g^2}{2D \sqrt[4]{Re_g}} \quad (24)$$

Na qual D é o diâmetro médio do riser. O termo Re_g refere-se ao número de Reynolds do gás dado por:

$$Re_g = \frac{\rho_g U_g D}{\mu_g} \quad (25)$$

Onde μ_g é a viscosidade dinâmica do gás.

Para a equação que descreve a fração volumétrica do gás ao longo do riser consideramos a equação deduzida por Malladi e Otero (1983). A equação considera a força de sustentação e arraste das partículas quando a velocidade do sólido tenha atingido um valor constante ao longo do riser.

$$\frac{\partial e_g}{\partial z} = \frac{g e_s}{U_s^2} \left(1 - \frac{\rho_g}{\rho_s} \right) \left[\left(\frac{1 - \frac{U_s}{U_g}}{1 - S_\infty} \right)^2 - 1 \right] \quad (26)$$

Onde S_∞ é a razão entre a velocidade do sólido e do gás na região de escoamento completamente desenvolvido. Neste trabalho é utilizado $S_\infty = 0,79$ valor que foi obtido por Melo (2004) a partir de dados experimentais.

2.2 Métodos de avaliação da incerteza expandida

A metodologia do ISO-GUM estabelece o uso da incerteza padrão combinada $uc(y)$ como parâmetro para expressar quantitativamente a incerteza do resultado de uma medição. Embora $uc(y)$ possa ser universalmente usada para expressar a incerteza de um resultado de medição, em algumas aplicações comerciais, industriais e regulamentadoras, é muitas vezes necessário dar uma medida de incerteza, que defina um intervalo em torno do resultado da medição. Com esse intervalo se espera abranger uma extensa fração da distribuição de valores que poderiam ser razoavelmente atribuídos ao mensurando, (GUIDE, 2003).

A medida adicional de incerteza que satisfaz o requisito de fornecer um intervalo do tipo descrito acima é denominada incerteza expandida.

A incerteza expandida U é obtida, multiplicando-se a incerteza padrão combinada $u_c(y)$ por um fator de abrangência k :

$$U(y) = k \cdot u(y) \quad (27)$$

O valor de k chamado fator de expansão, está relacionado com o grau de confiança que queremos ter na construção do intervalo. Segundo o GUM, k assume o valor de 2 ou 3 que correspondem a um nível de confiança de 95% ou 99% respectivamente.

O cálculo de k deverá ser baseado na distribuição t-Student, a qual permite determinar a incerteza expandida a partir de amostras pequenas.

- Método dos Graus de Liberdade

O GUM recomenda que a equação de Welch-Satterthwaite seja utilizada para calcular o valor dos graus de liberdade efetivos - v_{eff} na determinação de k .

De modo geral, os graus de liberdade significa a grandeza de informações ou conhecimentos que entrou em uma estimativa de incerteza. Portanto, quando as incertezas são combinadas, precisamos saber os graus de liberdade para a incerteza total. Infelizmente, os graus de liberdade para uma estimativa de incerteza combinada não é uma simples soma dos graus de liberdade para cada componente de incerteza, (GUIDE, 2003).

Os graus de liberdade efetivos, v_{eff} , para a incerteza total, $u_c(y)$, resultante da combinação de incertezas associadas u_i e graus de liberdade, v_i , para as fontes de n erros deve ser estimada através da fórmula de Welch-Satterthwaite (WS), dada na Equação (28).

$$v_{eff} = \frac{u_c^4(y)}{\sum_{i=1}^N \frac{c_i^4 \cdot u_i^4(x_i)}{v_i}} \quad (28)$$

onde $u_c(y)$ é a incerteza total ou combinada, calculada assumindo que não há correlação de erros.

Uma alternativa a aproximação para uma distribuição-t com base na fórmula de Welch-Satterthwaite é a extensão Bayesiana. Os pressupostos que fundamentam ambos os métodos são essencialmente idênticos. No entanto, a utilização da extensão Bayesiana simplifica grandemente a expressão da incerteza, eliminando por completo a necessidade de se calcular graus de liberdade a partir da fórmula Welch-Satterthwaite, (GUM SUPPL. 1, 2004).

- Método de Monte Carlo

O MMC realiza a propagação das distribuições de probabilidade por amostragem da distribuição de probabilidade da grandeza de saída Y . Neste método, as funções de densidade de probabilidade FDP's são expressamente atribuídas a todas as grandezas de entrada X_i com base nas informações relativas a estas grandezas. O Suplemento 1 do GUM dá orientações sobre a atribuição, em algumas circunstâncias comuns, de FDP's para as grandezas de entrada X_i . Para se construir uma FDP para uma grandeza com base em uma série de indicações o teorema de Bayes pode ser aplicado. O Suplemento 1 do GUM não faz distinção entre os tipos de distribuições de probabilidade A e B para as variáveis de entrada. Cada valor y_r ($r = 1, \dots, M$) é obtido através da realização de uma amostragem aleatória de cada uma das funções de densidade de probabilidade das grandezas de entrada X_i permitindo a avaliação do modelo com os valores encontrados. Os M valores de Y obtidos devem ser dispostos em uma ordem crescente, proporcionando assim uma aproximação numérica para a representação G da função de distribuição $GY(\eta)$. O vetor G pode ser utilizado para obter uma estimativa y de Y , a incerteza padrão $u(y)$ em relação a y , bem como um intervalo de confiança adequado para Y , para uma determinada probabilidade de significância p . A eficácia do MMC para obter y , $u(y)$ e um intervalo de confiança para Y dependerá da escolha apropriada do valor de M (M. SOLAGUREN-BEASCOA FERNÁNDEZ et al., 2008).

As condições para uma aplicação válida do método MMC são menos restritivas do que as do GUM. No entanto, o MMC é muito difícil de utilizar, em alguns casos, por exemplo, quando as grandezas de entrada são correlacionadas. A utilização de ambos os métodos leva a uma melhor compreensão do processo de medição.

2.3 Análise de sensibilidade

Para avaliar a incerteza com o método GUM é necessário calcular as derivadas parciais para o modelo com respeito aos parâmetros de entrada. Essas derivadas, avaliadas com as melhores estimativas das grandezas de entrada, são os coeficientes de sensibilidade do modelo, (INMETRO, 2003). Ainda, segundo o GUIDE (2003), em vez de serem calculados pela função f , os coeficientes de sensibilidade $c_i = \frac{\partial f(X_1, X_2, \dots, X_N)}{\partial X_i} \Big|_{x_1, x_2, \dots, x_N}$ são, por vezes, determinados experimentalmente: mede-se a variação em Y causada por uma variação em um dado X_i , enquanto se mantêm constantes as grandezas de entrada restantes. Neste caso, o conhecimento da função f (ou de uma parte desta função, quando alguns coeficientes de

sensibilidade são determinados) é, de forma correspondente, reduzido a uma expansão empírica de primeira ordem da série de Taylor, baseada nos coeficientes de sensibilidade medidos.

Este método é importante não apenas para a avaliação da incerteza combinada como também pode fornecer ao metrologista uma indicação de que vale a pena tentar reduzir as incertezas das variáveis de entrada (LORD; WEIGHT, 2003).

A redução da incerteza em uma variável de entrada com um coeficiente de sensibilidade grande pode produzir uma significativa redução na incerteza combinada de saída.

A avaliação desses coeficientes pode ser particularmente problemática para alguns modelos contínuos. A dependência dos resultados do modelo em função dos seus parâmetros pode tomar algumas formas complicadas. Podem existir várias soluções, por exemplo, devido à histerese, o que é problemático.

A análise de sensibilidade que está crescendo em popularidade com o aumento do poder computacional permite que estudos de modelos complicados seja mais tratável, (LORD; WEIGHT, 2003).

Para analisar a variação na saída para os diferentes parâmetros, podem ser utilizadas várias técnicas, cada uma produzindo diferentes medidas de sensibilidade. A idéia geral destes métodos é decompor a variância total da resposta, em termos correspondentes a incerteza sobre os parâmetros de entrada.

Todos estes métodos assumem que as variáveis aleatórias de entrada são estatisticamente independentes sendo a soma destes índices de sensibilidade igual a 1.

Segundo Farias (2007), os métodos perturbativos permitem calcular a sensibilidade de uma resposta de forma generalizada para qualquer parâmetro do sistema. O trabalho de (ASSUNÇÃO et al., 2009) que realiza a simulação do riser com base nos resultados de Farias (2007), apresentar resultados consistentes com a literatura.

2.4 Método de Monte Carlo (MMC)

Quando se utiliza um modelo matemático para descrever um sistema, é possível que o modelo seja complexo demais, ou então, não permita uma solução analítica. Nesse caso, a simulação computacional pode ser considerada uma ferramenta de grande valia na obtenção de uma resposta para um problema particular. Quando o modelo envolve amostragem aleatória de

uma distribuição probabilística, o método é designado Simulação Monte Carlo (SMC), (LORD; WEIGHT, 2003).

Na SMC, o formato da distribuição de saída será obtido a partir da avaliação do modelo matemático usado por meio da combinação de amostras aleatórias das variáveis de entrada, respeitando as respectivas distribuições. Por isso, é conhecido como método da propagação das distribuições, (GUM SUPPL. 1, 2004). Essencialmente a SMC é um método estatístico de amostragem que serve de alternativa à propagação das incertezas por aproximação do modelo de medição através de séries de Taylor, como no método GUM.

A SMC propaga as FDPs ao invés de apenas as incertezas das grandezas de entrada, conseguindo assim obter uma estimativa da FDP do mensurando em vez de um simples parâmetro estatístico como o desvio padrão final. No método clássico, cada variável de entrada deve ser caracterizada pela função densidade de probabilidade, sua média e desvio padrão e os graus de liberdade. Na SMC, esse último parâmetro não é envolvido nos cálculos. A qualidade do resultado obtido irá depender dos seguintes fatores:

- Representatividade do modelo matemático;
- Qualidade da caracterização das variáveis de entrada;
- Características do gerador de números pseudo-aleatórios utilizado;
- Número de simulações realizadas (N);
- Procedimento de definição do intervalo de abrangência.

2.5 Avaliação da incerteza em modelo contínuo

Algumas propriedades dos modelos contínuos tornam a metodologia do ISO-GUM inadequada:

É usualmente difícil obter a derivada parcial requerida pelo GUM, ou seja, a forma da derivada parcial do modelo em relação a grandeza de entrada.

Freqüentemente a grandeza de saída de um modelo contínuo é a posição e o valor máximo de alguma grandeza, por exemplo, o pico da temperatura máxima. Esse tipo de resultado pode produzir uma expressão para a grandeza de saída que não é derivável, e então não se pode obter os coeficientes de sensibilidade.

Alguns modelos contínuos não dependem das variáveis de entrada de uma maneira direta, por exemplo, múltiplas soluções podem existir se o modelo exhibe histerese. O que significa que o

requerimento de linearidade não se verifica e que o teorema do limite central é improvável de ser aplicado, (HIGHAM, 2001).

Estes pontos não significam que a metodologia do GUM é inadequada para todos os modelos contínuos. Muitos modelos dependem das variáveis de entrada linearmente e satisfazem as outras condições necessárias a metodologia do GUM.

2.6 Aplicação das equações diferenciais estocásticas (SDEs)

Os processos em sistemas contínuos, muitas vezes são modelados como um sistema de equações diferenciais ordinárias. Estes modelos assumem que a dinâmica observada são movidas exclusivamente por mecanismos internos determinísticos. No entanto, os sistemas reais fluidodinâmicos irá sempre ser exposto a influências que não estão completamente entendidas ou que não é possível modelar explicitamente. Como consequência, existe uma necessidade crescente de se estender os modelos determinísticos para modelos que incorporem variações mais complexas na sua dinâmica. Uma maneira de modelar estes elementos é através da inclusão de influências estocásticas ou ruído.

Uma extensão natural de um modelo determinístico de equações diferenciais é um sistema de equações diferenciais estocásticas, onde os parâmetros relevantes são modelados como processos estocásticos adequados ou processos estocásticos são adicionados para dirigir as equações do sistema. Esta visão pressupõe que a dinâmica está em parte impulsionada pelo ruído, (LORD; WEIGHT, 2003).

Entre os métodos mais indicados para a avaliação da incerteza em modelos contínuos está a aplicação das Equações Diferenciais Estocásticas (SDEs), (LORD; WEIGHT, 2003).

Se toda a incerteza no sistema for de um único termo de ruído a solução terá um caminho não-suave, não-diferenciável. O problema torna-se uma equação diferencial ordinária com um termo forçado probabilístico, ou seja, uma equação diferencial estocástica (SDE). Existem vários métodos de análise que podem ser utilizados para explorar esses problemas, e estes são descritos na seção seguinte.

Em geral, os métodos analíticos exigem informações sobre as equações que fazem o modelo e o acesso ao código-fonte e assim é improvável que seja adequado para uso com o software de caixa preta. Muitas vezes eles implicam pressupostos sobre as pdfs das grandezas de entrada e, portanto, não pode ser suficientemente geral para algumas aplicações.

A decisão de qual tipo de método deve ser usado é parcialmente determinada pela complexidade do modelo. Se as equações do modelo não são lineares ou são muito complicadas ou são desconhecidas, (por exemplo, devido ao uso de software caixa-preta), é provavelmente melhor usar um método de amostragem porque requerem menor número de suposições sobre suas grandezas e sobre o modelo. Se o modelo é simples e linear e as entradas têm distribuições bem definidas, vale a pena considerar um método analítico, pois pode ser mais eficiente em termos de tempo e pode produzir mais informações do que o método de amostragem, (LORD; WEIGHT, 2003).

Outro fator que afeta a escolha do método é o objetivo final do modelo. Se um intervalo de confiança é necessário, o conhecimento da função de distribuição irá ser necessário, a fim de definir o intervalo.

Formulação da equação diferencial estocástica

A equação diferencial estocástica (SDE) pode ser pensada como uma equação diferencial com um termo forçado que é descrito por uma variável aleatória. Se o termo forçado é irregular, resultante de algum processo estocástico, tais como ruído branco de Gauss, e as soluções não são diferenciáveis são necessárias novas técnicas (na verdade é necessário um novo cálculo). Na literatura física SDEs são freqüentemente chamadas de equações de Langevin, (LORD; WEIGHT, 2003).

$$\frac{dx}{dt} = -\lambda x + f(t) , \text{ onde } f(t) \text{ é um termo randômico forçado.}$$

Uma das aplicações mais úteis de SDEs num contexto de metrologia é a capacidade de calcular intervalos de confiança para grandezas derivadas a partir de dados com ruído. Elas são comumente usadas em aplicações onde uma boa estimativa da variância é particularmente importante para previsões do comportamento futuro do processo, (LORD; WEIGHT, 2003).

Uma equação diferencial ordinária $u' = f(t, u)$ pode ser resolvida para obter uma equação integral:

$$u(t) = u(t_0) + \int_{t_0}^t f(s, u(s)) ds$$

Esta formulação é adaptada para um sistema que está acoplado de alguma forma a um termo forçado randômico. Simbolicamente o sistema muitas vezes é escrito como uma equação diferencial.

$$dX(t) = a(t, X(t))dt + b(t, X(t))dW(t), \quad X(0) = X_0, 0 \leq t \leq T. \quad (29)$$

Onde $b(t, X(t))dW(t)$ é o termo randômico forçado. Esta é uma convenção de notação, pois o termo forçado não é de fato diferenciável.

O termo $a(t, X(t))$ é chamado de tendência, e o termo $b(t, X(t))$ é chamado de difusão.

O sistema (2) é mais corretamente interpretado como:

$$X(t) = X(0) + \int_{t_0}^t a(s, X(s))ds + \int_{t_0}^t b(s, X(s))dW(s), \quad 0 \leq t \leq T. \quad (30)$$

A segunda integral do lado direito é a integração com relação ao ruído. Ao longo do texto, será assumido que o ruído é o movimento Browniano. Além disso, o processo estocástico será indicado como $X(t)$.

Se b é independente de X , o ruído é chamado de ruído aditivo caso contrário ele é chamado multiplicativo. Do ponto de vista da metrologia o termo ruído é usado para modelar o ruído no sistema físico. Ruído aditivo é o ruído que é externo ao sistema, enquanto que o ruído multiplicativo depende da variável X e pode ser pensado como interno ao sistema, (LORD; WEIGHT, 2003).

Por exemplo, Kloeden e Platen, (1999) apresenta um exemplo de rádio astronomia, onde um ruído aditivo é usado para modelar os erros de medição. O sinal saindo de uma estrela é representado como

$$\eta(t) = A \exp(i(B + X(t))) + r \zeta(t). \quad (31)$$

Onde A é a amplitude e B é a fase do sinal.

$X(t)$ tem valor real, com média zero e é usado para modelar a turbulência atmosférica como um processo estocástico, $\zeta(t)$ é um valor complexo com ruído branco Gaussiano que modela os erros de medições e r é um parâmetro.

Um processo de Ornstein-Uhlenbeck (OU) é usado para modelar o erro de medição $X(t)$:

$$dX(t) = -\beta X(t)dt + \sigma \sqrt{2\beta} dW(t), \quad (32)$$

onde W é o ruído branco Gaussiano. Processos OU geram ruído colorido.

Dados de medição são então usados para determinar estimativas dos valores de A e B para uma estrela. O processo de determinação também exige conhecimento de β , σ e r . Se esses

parâmetros são conhecidos, uma maneira de encontrar A e B é considerá-las como um processo independente do tempo que satisfazem

$$dA(t) = 0, dB(t) = 0,$$

e, em seguida, usar um filtro não-linear para determinar as estimativas de A e B a partir das observações, (LORD; WEIGHT, 2003).

2.7 Integrais estocásticas

O Movimento Browniano ou processo de Wiener em $[0, T]$, é uma variável aleatória $W(t)$ que depende continuamente de $t \in [0, T]$ e satisfaz as três condições:

- I) $W(0) = 0$ (com probabilidade 1)
- II) $E\{W(t)\} = 0$,
- III) $W(t) - W(s) \sim N(0, t-s)$, para todo $0 \leq s \leq t$.

Os caminhos da amostra do processo de Wiener são contínuos, mas não são diferenciáveis em nenhum ponto, (LORD; WEIGHT, 2003).

Dada uma função h , a integral $\int_0^T h(t)dt$ pode ser aproximada pela soma de Riemann:

$$\sum_{j=0}^{N-1} h(t_j) (t_{j+1} - t_j), \quad (33)$$

De modo semelhante, pode-se considerar o limite aproximado da soma:

$$\sum_{j=0}^N h(t_j) (W(t_{j+1}) - W(t_j)) \quad (34)$$

Como definido antes $\delta t = T/N$ uma partição do intervalo $[0, T]$ obtemos os pontos discretos $t_j = j\delta t$. Dessa forma, se δt é suficientemente pequeno, a fórmula acima é uma boa aproximação para a integral estocástica.

Aplicando a regra, com $h(t) = W(t)$, obtemos a

- A integral de Itô

A integral estocástica de Itô é definida como,

$$\int_0^T W(t) dW(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{N-1} W(t_j) (W(t_{j+1}) - W(t_j)) = \frac{1}{2} W(T)^2 - \frac{1}{2} T, \quad (35)$$

onde m.s.lim denota o limite médio quadrático e $t_j = j\Delta t$. O método utiliza o valor da função no final do lado esquerdo de cada subintervalo.

Usar a integral de Itô é uma forma de dizer que o comportamento presente do fenômeno não depende das futuras perturbações aleatórias, (HIGHAM, 2001).

- A integral de Stratonovich

A integral estocástica de Stratonovich utiliza o ponto médio de cada sub-intervalo para o valor da função, de modo que,

$$\int_0^T W(t) \circ dW(t) = \frac{\text{m.s.lim}}{N \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{N-1} W\left(\frac{t_j + t_{j+1}}{2}\right)(W(t_{j+1}) - W(t_j)) = \frac{1}{2} W^2(T) \quad (36)$$

2.8 Métodos numéricos

O Método de Euler-Maruyama

O método numérico mais simples para resolução de SDE é o esquema de Euler estocástico proposto por Maruyama que é a versão estocástica do método de Euler, (HIGHAM, 2001).

Considere uma SDE autônoma, ou seja, SDEs que não têm qualquer dependência explícita sobre t .

$$X(0) = X_0 \quad (37)$$

$$d(X(t)) = f(X(t))dt + g(X(t))dW(t) \quad (38)$$

$$X(t) = X_0 + \int_0^t f(X(s))ds + \int_0^t g(X(s))dW(s) \quad (31)$$

$X(t)$ é um processo estocástico que descreve a evolução aleatória do processo. O objetivo é estimar a solução da equação diferencial estocástica da forma:

$$d(X(t)) = f(X(t))dt + g(X(t))dW(t) \quad (39)$$

Estas equações decompõem o ruído em duas partes:

- A tendência $f(X(t))dt$
- A variabilidade em torno da tendência $g(X(t))dW(t)$

$X(t)$ apresenta as seguintes características:

- Tendência linear

- Flutuações aleatórias proporcionais a $N(0, \Delta t)$;
- Incrementos independentes

Para aplicar o método numérico para em $[0, T]$, temos primeiro que discretizar o intervalo.

Fazendo $\Delta t = T/L$ para algum inteiro positivo L , e $\tau_j = j\Delta t$. A aproximação numérica para $X(\tau_j)$ será escrita como $X(j)$, (HIGHAM, 2001).

O método de Euler-Maruyama (EM) tem a seguinte forma:

$$X(j) = X(j-1) + f(X_{j-1})\Delta t + g(X_{j-1}) (W(\tau_j) - W(\tau_{j-1})), j = 1, 2, \dots, L. \quad (40)$$

$$X(\tau_j) = X(\tau_{j-1}) + \int_{\tau_{j-1}}^{\tau_j} f(X(s))ds + \int_{\tau_{j-1}}^{\tau_j} g(X(s))dW(s) \quad (41)$$

Cada um dos três termos do lado direito da Equação (41) é aproximado pelo termo correspondente do lado direito da Equação (40).

- Convergência forte e fraca para o método Euler-Maruyama

A capacidade de um método em calcular soluções estáveis é quantificada, em média, pela ordem de convergência forte. Se é de interesse apenas informações sobre o valor esperado da solução, leva ao conceito de ordem de convergência fraca, (HIGHAM, 2001).

O método apresenta ordem de convergência forte igual a γ se $E|X_n - X(\tau)| \leq C\Delta t^\gamma$ (42). Para $\tau = n\Delta t \in [0, T]$ e com Δt suficientemente pequeno.

A método é dito ter ordem de convergência fraca igual a γ se existe uma constante C , de modo que, para todas as funções de classe p , temos $|E_p(X_n) - E_p(X(\tau))| \leq C\Delta t^\gamma$ (43) para qualquer $\tau = n\Delta t \in [0, T]$ e Δt suficientemente pequeno.

Método de ordem superior de Milstein

Em geral, os esquemas de ordem superior podem ser obtidos a partir da expansão estocástica de Taylor através da inclusão de mais termos. O método de Milstein é uma alternativa ao método de Euler-Maruyama.

O método de Euler-Maruyama converge com ordem forte $k=0.5$ e com ordem fraca $k=1$. É possível fazer com que a ordem do erro de aproximação forte seja $= 1$, adicionando uma correção para o incremento estocástico, obtendo o método de Milstein, (HIGHAM, 2001).

$$X(t_i) = X(t_{i-1}) + a(t_{i-1}, X(t_{i-1}))\Delta t + b(t_{i-1}, X(t_{i-1}))(W_i - W_{i-1}) + \frac{1}{2}b(X_{i-1})\frac{\partial b}{\partial x}[W_i - W_{i-1}]^2 - \Delta t], \quad (44)$$

Ao escolher um esquema numérico, a convergência deve ser considerada. A convergência compara a verdadeira solução $X(t_n)$ e uma aproximação X_n , sendo que ambas são variáveis aleatórias, (HIGHAM, 2001).

Uma vez que o esquema de Euler-Maruyama é comprovadamente uma aproximação da solução para uma SDE, podemos avaliar a qualidade dessa aproximação.

Isto dá origem à noção de ordem de convergência.

É usual classificar a convergência como fraca ou forte, dependendo se as informações de interesse é a estatística do processo (a distribuição de probabilidade tem de ser uma boa aproximação da real) ou se as realizações individuais do processo são necessárias para se obter uma boa aproximação, (HIGHAM, 2001).

Em aplicações metrológicas o primeiro tipo de convergência é a de maior interesse.

O esquema de Euler-Maruyama apresenta convergência forte (0.5) e fraca (1).

Estabilidade linear

Os conceitos de convergência fraca e forte considera a precisão de um método numérico sobre um intervalo finito $[0, T]$ para pequenos incrementos Δt .

Em muitas aplicações é de interesse analisar o comportamento da SDE quando, $t \rightarrow \infty$.

Regra da cadeia estocástica

Segundo G. J. Lord and L. Weight, (2003), a diferença fundamental entre o cálculo estocástico e o determinístico é que:

No caso determinístico, se $dX/dt = f(X)$ então, para qualquer função V suave, a regra da cadeia diz que:

$$\frac{dV(X(t))}{dt} = \frac{dV(X(t))}{dX} \frac{d(X(t))}{dt} = \left\{ \frac{dV(X(t))}{dX} \right\} f(X(t)) \quad (45)$$

Agora, supondo que a SDE satisfaz a regra de Itô.

A SDE equivalente a (45) para $V(X)$ é dada por:

$$dV(X(t)) = \frac{dV(X(t))}{dX} (f(X(t))dt + g(X(t))dW(t)) \quad (46)$$

$$\text{É razoável admitir que} \quad dV = \frac{dV}{dX} dX \quad (47)$$

No entanto, uma análise rigorosa com o resultado de Itô revela que o termo extra surge e a formulação adequada:

$$dV(X(t)) = \frac{dV(X(t))}{dX} dX + \frac{1}{2} g(X(t))^2 \frac{d^2V(X(t))}{dX^2} dt \quad (48)$$

Que, usando a SDE de Itô, obtemos:

$$dV(X(t)) = (f(X(t)) \frac{dV(X(t))}{dX} + \frac{1}{2} g(X(t))^2 \frac{d^2V(X(t))}{dX^2}) dt + g(X(t)) \frac{dV(X(t))}{dX} dW(t) \quad (49)$$

Para realizar um experimento numérico, considere a SDE

$$dX(t) = (\alpha - X(t))dt + \beta \sqrt{X(t)} dW(t), \quad X(0) = X_0 \quad (50)$$

3. METODOLOGIA

Para atingir os objetivos, foi considerado o conhecimento obtido com a avaliação da incerteza de dados experimentais e com a aplicação de modelos para descrever o escoamento.

Os cálculos de incertezas foram aplicados aos parâmetros medidos na UPF comparados com resultados de outros trabalhos e com os dados da literatura.

Métodos de computação eficientes e simples, de preferência em Matlab, foram implementados da literatura, disponibilizados na internet, e também algoritmos foram desenvolvidos no presente trabalho.

O estudo da sensibilidade de parâmetros do modelo unidimensional realizado por Farias (2007) contribuiu, significativamente para a compreensão da simulação nas unidades de laboratório e da piloto - UPF. A simulação na UPF confirmou integralmente as condições observadas no modelo reduzido do laboratório. Os estudos considerados no presente trabalho foram todos realizados nas condições de operação da UPF:

A UPF é construída em acrílico, permitindo uma melhor visualização do processo. O diâmetro interno é de 9 cm e o externo é de 10,05 cm, e com 6 metros de altura. O diâmetro da câmara de separação é de 1,5 m. A coluna de retorno é interligada ao *riser* através de um duto de PVC inclinado. O fluxo de catalisador da coluna de retorno para o *riser* é controlado através de uma válvula.

Os resultados estão apresentados no capítulo de Resultados, com discussão.

3.1 Métodos de computação

3.1.1 Computação em modelos discretos

Tanto o método de incerteza GUM como o MMC podem ser utilizados para a realização de cálculo do processo de avaliação da incerteza em modelos discretos. A diferença entre o método GUM e o método MMC está na forma como eles caracterizam a grandeza de saída (M. SOLAGUREN-BEASCOA FERNÁNDEZ et al., 2008).

O método GUM determina, a partir das incertezas padrão das grandezas de entrada, o que será a incerteza padrão para a grandeza de saída, e, para delimitar a incerteza de medida por meio de um intervalo de confiança, caracteriza a grandeza de saída, por meio de uma distribuição normal (Gaussiana), ou uma distribuição t.

A relação funcional entre a grandeza de saída Y e as grandezas de entrada X_i deve ser linearizada por aproximação através dos termos da série de Taylor de primeira ordem de uma vizinhança de suas estimativas x_i :

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_N) = c_1 X_1 + c_2 X_2 + \dots + c_N X_N \quad (51)$$

Onde os c_i são chamados de coeficientes de sensibilidade:

$$c_i = \left. \frac{\partial f(X_1, X_2, \dots, X_N)}{\partial X_i} \right|_{X_1, X_2, \dots, X_N}$$

Para uma grandeza de entrada que é independente das outras grandezas, o método de incerteza GUM requer para o seu funcionamento apenas três parâmetros que resumem as informações sobre a grandeza representada por sua distribuição:

- Uma estimativa da grandeza de entrada;
- A incerteza padrão associada à estimativa;
- Os graus de liberdade correspondente.

No cálculo da incerteza expandida pelo GUM a suposição de normalidade das grandezas de entrada e a condição de linearidade do modelo são a base para a aplicação da distribuição t na construção do intervalo de confiança.

O cálculo do fator de expansão k com base na distribuição t permite determinar a incerteza expandida a partir de amostras pequenas. Para isso, é necessário também o cálculo dos graus de liberdade efetivos do processo, através da equação de Welch-Satterthwaite (GUIDE, 2003).

Para uma grandeza com distribuição normal definida, com esperança μ e desvio padrão σ , o fator de expansão k pode ser calculado para um nível de confiança p e o intervalo de confiança determinado por $[\mu - k\sigma, \mu + k\sigma]$. Para se obter uma melhor aproximação do que simplesmente usar um valor k da distribuição normal a distribuição de probabilidade da função $t = (y - Y)/u_c(y)$, aproximada pela distribuição-t, pode então ser utilizada para construir um intervalo de incerteza com uma probabilidade de abrangência p fixada para o valor da grandeza medida (M. SOLAGUREN-BEASCOA FERNÁNDEZ et al., 2008). Neste caso o intervalo de confiança para a grandeza de saída terá a forma: $[y - U_p, y + U_p]$ onde U_p é a incerteza expandida para um nível de confiança p , Equação (27).

Incerteza para múltiplas medições

O desvio-padrão dos resultados individuais, $s(y)$, deve refletir a incerteza padrão resultante de efeitos aleatórios, $u_{R,w}(y)$, em uma única medida. Se a diferença entre os resultados de n medições individuais é estatisticamente significativa, podemos concluir que o desvio padrão dos resultados individuais é muito maior do que a incerteza padrão resultante do efeito do acaso no nível de significância escolhido. Em outras palavras, é claro que a incerteza padrão resultante de efeitos aleatórios é subestimada na avaliação (CHOI et al., 2003).

As composições separadas dos componentes aleatórios e sistemáticos para n medições da incerteza padrão combinada total é dada pela Equação (52).

$$u_c(n) = \sqrt{u_R^2(n) + u_S^2(n)} \quad (52)$$

onde $u_R(n)$ e $u_S(n)$ são as incertezas combinadas padrão resultantes dos efeitos de forma aleatória e sistemáticos, respectivamente, para n medições.

Uma vez que as incertezas individuais resultantes de efeitos aleatórios em n medições não são correlacionadas e as incertezas individuais resultantes de efeitos sistemáticos são totalmente correlacionadas, as incertezas padrão combinadas resultantes de efeitos aleatórios e efeitos sistemáticos são:

$$u_R(n) = \sqrt{\frac{u_R^2(y_1) + u_R^2(y_2) + \dots + u_R^2(y_n)}{n^2}} \quad (53)$$

$$u_S(n) = \frac{u_S(y_1) + u_S(y_2) + \dots + u_S(y_n)}{n} \quad (54)$$

As incertezas dos resultados individuais são esperadas ser semelhantes. Especialmente, as incertezas resultantes de efeitos sistemáticos é suposto ser a mesma para n medições.

A Equação (54) mostra que a incerteza decorrente de efeitos sistemáticos devido à correlação não é reduzida, enquanto a incerteza decorrente de efeitos aleatórios, Equação (53), pode ser reduzida por n medições.

$$u_c(n) = \sqrt{\frac{u_R^2(y)}{n} + u_S^2(y)} \quad (55)$$

Para compensar a subestimação, uma incerteza não reconhecida decorrente de um efeito aleatório, $u_u^2(y)$, é introduzida na Equação (55), o que reflete a variação pura dos resultados individuais sem a medição da incerteza decorrente de efeitos aleatórios.

$$u_c(n) = \sqrt{\frac{u_R^2(y) + u_u^2(y)}{n} + u_S^2(y)} \quad (56)$$

Portanto, a Equação (56) pode ser universalmente utilizada na avaliação da incerteza de n medições múltiplas, (CHOI et al., 2003).

O cálculo com o MMC

O método MMC obtém, a partir das distribuições de probabilidades das grandezas de entrada, um valor aproximado para a representação numérica da distribuição de probabilidade da grandeza de saída. Um parâmetro fundamental para a obtenção de resultados confiáveis através do método MMC é o número de ensaios ou avaliações M a serem realizados para o modelo. Se M é escolhido a priori, não haverá um controle direto sobre os resultados, (JCGM, 2008).

Um valor $M = 10^6$ muitas vezes é considerado apropriado, para se construir um intervalo de confiança de 95%.

O algoritmo de cálculo do MMC compreende os seguintes passos:

- a. Escolha a probabilidade p para construir o intervalo de confiança desejado;
- b. Escolha o número de dígitos decimais significativos n_{dig} para a incerteza $u(y)$. Normalmente o valor 1 ou 2;
- c. Escolha do número de ensaios M para executar cada sequência da aplicação do processo. A prática padrão é fazer $M = \max(100/(1-p), 10^4)$. (57)

Estes dois valores devem ser intencionalmente escolhidos para serem muito menor do que o número total de iterações previsíveis (da ordem de 10^6), a fim de ser possível analisar, após cada sequência, a variabilidade da estatística dos parâmetros a serem determinados.

- d. A variável h armazena o número de avaliações do método MMC. Para inicialização tomamos $h = 1$;
- e. Para cada sequência de h , M ensaios ou avaliações do modelo são realizadas, obtendo os valores y_r ($r=1, \dots, M$);
- f. Para analisar a variabilidade dos parâmetros, é necessário mais do que uma sequência, portanto, se $h = 1$, ele deve ser aumentado de uma unidade e retornar ao passo (e);
- g. Após cada sequência, a média e o desvio padrão dos últimos parâmetros devem ser calculados;

A média é tomada como uma estimativa y de Y :

$$y^{(h)} = \frac{1}{M} \sum_{r=1}^M y_r \quad (58)$$

O desvio padrão é tomado como a incerteza padrão $u(y)$ associado com y :

$$u(y) = \sqrt{\frac{1}{M-1} \sum_{r=1}^M (y_r - y)^2} \quad (59)$$

O cálculo do intervalo de confiança:

Seja q a parte inteira de $pM+1/2$.

o intervalo de confiança será probabilisticamente simétrico para Y com $[y_{\text{low}}^{(h)}, y_{\text{high}}^{(h)}]$.

Os extremos do intervalo são $y^{\text{low}(h)} = y(r)$ e $y^{\text{high}(h)} = y(r+q)$

Onde r é a parte inteira de $(M-q)/2+1/2$. Se o resultado desejado é o menor intervalo de abrangência, o valor r^* deve ser determinado como $y(r^* + q) - y(r^*) \leq y(r+q) - y(r)$. Para todos os valores $r = 1, \dots, (M - q)$.

Para a estimativa de Y , temos:

$$\hat{y} = y = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^h y^{(i)} \quad (60)$$

$$S\hat{y} = \sqrt{\frac{1}{h(h-1)} \sum_{i=1}^h (y^{(i)} - \hat{y})^2} \quad (61)$$

Para a incerteza padrão:

$$\hat{u}(y) = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^h u(y^{(i)}) \quad (62)$$

$$S\hat{u}_{(y)} = \sqrt{\frac{1}{h(h-1)} \sum_{i=1}^h (u(y^{(i)}) - \hat{u}(y))^2} \quad (63)$$

Para o limite superior do intervalo de abrangência:

$$\hat{y}_{high} = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^h y_{high}^{(i)} \quad (64)$$

$$S_{y_{high}} = \sqrt{\frac{1}{h(h-1)} \sum_{i=1}^h (y_{high}^{(i)} - \hat{y}_{high})^2} \quad (65)$$

(h) Para aplicar o critério de estabilização com os resultados, a tolerância numérica δ relacionada com a incerteza padrão $u(y)$ deve ser calculada. A incerteza $u(y)$ é calculada como descrito no item (e), mas utilizando todos os valores $h \times M$ do modelo. A tolerância é simplesmente a metade do último algarismo significativo da incerteza. Para calcular a tolerância (δ), a incerteza deve ser expressa na forma de $u(y) = c \times 10^d$, onde c é um ndig (dígito inteiro decimal) e d um número inteiro, então a relação da tolerância numérica é: $\delta = \frac{1}{2} \times 10^d$. O critério de estabilização para os resultados é obtido quando qualquer um dos valores $2S_y$, $2S_{u(y)}$, $2S_{y_{low}}$ ou $2y_{high}$ é maior do que δ , h deve ser incrementado de uma unidade e o passo (e) deve ser repetido. Quando o critério de estabilização for verificado, todos os valores do modelo $h \times M$ devem ser utilizados para calcular y_{low} e y_{high} da mesma maneira que foi feito no passo (e) para cada sequência. Os valores de y e $u(y)$ já foram calculados nos passos (g) e (h), respectivamente, (M. SOLAGUREN-BESCOA FERNÁNDEZ et al., 2008).

Validar a metodologia de incerteza

O método de avaliação de incerteza do GUM tem algumas limitações. Embora se pode esperar que o procedimento funcione bem em muitas circunstâncias, é geralmente difícil quantificar os efeitos das aproximações envolvidas, como, linearização, o uso da fórmula de Welch-Satterthwaite para os graus de liberdade efetivos e a suposição de que a grandeza de saída segue uma distribuição de Gauss (ou seja, que o Teorema do Limite Central é aplicável), (GUM SUPPL. 1, 2004).

Portanto, uma vez que estas condições não podem ser testadas com facilidade, todos os casos de dúvida, devem ser validados. Para este fim, uma vez que o método de Monte Carlo constitui um procedimento mais geral para avaliação de incerteza, recomenda-se que tanto a estrutura de incerteza do GUM como o método de Monte Carlo sejam aplicados e os resultados comparados. Se a comparação for favorável, a estrutura de incerteza do GUM pode ser suficientemente usada nessa ocasião e em problemas semelhantes no futuro. Caso contrário, pode ser considerado o uso do método de Monte Carlo, (JCGM, 2008).

O procedimento de comparação é baseado no seguinte objetivo: determinar se os intervalos de confiança obtidos pela estrutura de incerteza do GUM e pelo método de Monte Carlo concordam com o grau estipulado de aproximação. Este grau de aproximação é avaliado em

termos dos valores extremos do intervalo de confiança e corresponde ao que é dado pela expressão da incerteza padrão $u(y)$ considerando um número significativo de dígitos decimais (M. SOLAGUREN-BESCOA FERNÁNDEZ et al., 2008).

O procedimento é o seguinte:

1) Seja n_{ndig} o número de dígitos decimais considerados significativos para o valor numérico de $u(y)$. Normalmente, $n_{\text{ndig}} = 1$ ou $n_{\text{ndig}} = 2$. Expresse o valor de $u(y)$ sob a forma: $\mathbf{a} \times 10^{\mathbf{r}}$, onde $\mathbf{a}$ é um número inteiro com n_{ndig} dígitos e $\mathbf{r}$ um inteiro.

A tolerância numérica para avaliar o grau de aproximação é: $\delta = 0,5 \times 10^{\mathbf{r}}$.

Avaliação do resultado

Compare os intervalos de confiança obtidos pela estrutura de incerteza do GUM e pelo método de Monte Carlo para determinar se o número necessário de dígitos corretos no intervalo de confiança fornecido pela estrutura de incerteza do GUM foi obtido.

Determinar os valores das diferenças absolutas dos respectivos pontos extremos dos dois intervalos de confiança.

$$|y - u(y) - y_{\text{low}}| \text{ e } |y + u(y) - y_{\text{high}}|; \quad (66)$$

Então, se esses dois valores não são maiores do que δ a comparação é favorável e a estrutura de incerteza do GUM foi validada neste caso.

Experimento 1 - calibração de massa

A aplicação usa o exemplo para o cálculo da incerteza na calibração de uma massa.

Os resultados serão comparados com os obtidos através do método GUM. Este exemplo faz parte do suplemento para o GUM.

Dados do experimento:

Considere a calibração de um peso W em relação a outro de referência R , ambos com a mesma massa nominal: $M_{\text{nom}} = 100\text{g}$, utilizando uma balança.

Uma vez que operam no ar (com uma densidade de massa ρ_a) e as densidades de massa de ambos os pesos, ρ_w e ρ_r , será geralmente diferente, é necessário considerar os efeitos de flutuação.

Seja δm_r o peso da menor massa que deve ser adicionada a R , a fim de equilibrar W .

A massa convencional $m_{w,c}$ é definida como a massa de peso hipotético de densidade $\rho_0=8000 \text{ kg/m}^3$ que W equilíbrio no ar, com uma densidade de $\rho_{a0}= 1.2 \text{ kg/m}^3$.

$$\delta_m = m_{w,c} - m_{nom} = (m_{R,c} + \delta_{mR,c}) \left[1 + (\rho_a - \rho_{a0}) \left(\frac{1}{\rho_w} - \frac{1}{\rho_R} \right) \right] - m_{nom}$$

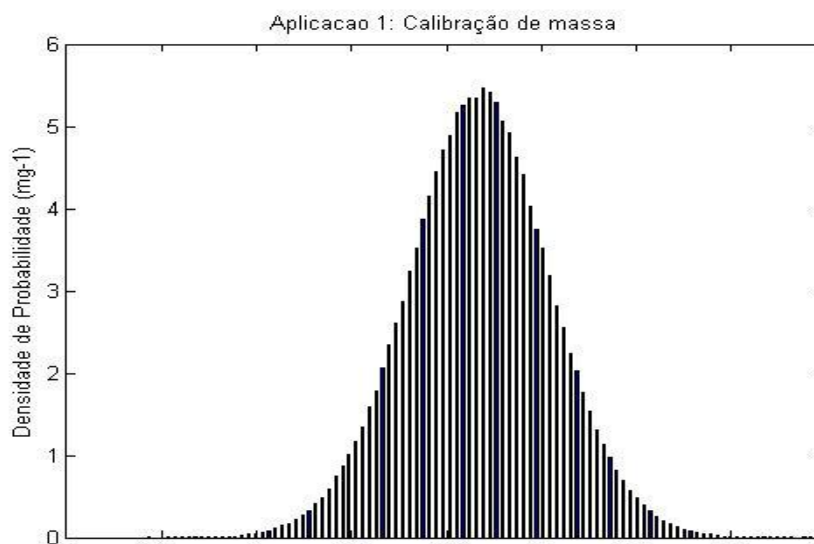
Onde $m_{w,c}$ = massa convencional experimental

m_{nom} = massa nominal

$\delta_{mR,c}$ = massa que deve ser adicionada para compensar a balança ρ densidade

subscritos: R, a, w, referência, ar e peso respectivamente.

Figura 2 - Aplicação 1 (calibração de massa)



3.1.2 Computação em modelos contínuos

A decisão de qual tipo de método deve ser usado é determinada, parcialmente, pela complexidade do modelo. Se as equações do modelo não são lineares, ou são desconhecidas, ou são muito complicadas (por exemplo, devido ao uso de software caixa-preta), é provavelmente melhor usar um método de amostragem porque necessitam um número menor de suposições sobre suas grandezas e sobre o modelo. Se o modelo é simples e linear e as grandezas de entrada têm distribuições bem definidas, vale a pena considerar um método analítico, pois pode ser mais eficiente em termos de tempo e pode produzir mais informações do que o método de amostragem, (LORD; WEIGHT, 2003).

Monte Carlo (MMC)

O GUIA ISO 98:1995 para a expressão da incerteza de medição (GUM) apresenta importantes limitações de aplicação. Para o seu aperfeiçoamento, diferentes suplementos foram desenvolvidos. O primeiro destes suplementos descreve um método alternativo para o cálculo de incertezas, o MMC, que não se restringe às condições do método descrito no GUM: a linearidade do modelo e da aplicação do teorema do limite central.

Em certas situações, que não devem ocorrer muito freqüentemente na prática, as condições requeridas pelo teorema do limite central podem não ser completamente satisfeitas, e o enfoque dado pela Equação (28) leva a um resultado inaceitável.

O MMC pode ser aplicado em todas as situações em que as condições de aplicação do GUM não forem satisfeitas ou não sejam claras.

- (1) Linearidade do modelo
- (2) A aplicação do teorema do limite central

O MMC deve ser usado como método alternativo para o cálculo de incertezas. Os pressupostos que fundamentam ambos os métodos são idênticos. O MMC realiza uma caracterização das grandezas medidas com base na amostragem aleatória das funções de distribuição de probabilidade de cada grandeza envolvida no modelo de medição.

Por ser um método probabilístico, obtém a partir das distribuições de probabilidades das grandezas de entrada uma representação numérica da distribuição de probabilidade para a grandeza de saída. O método GUM propaga as incertezas padrão e o MMC propaga as distribuições de probabilidade (M. SOLAGUREN-BESCOA FERNÁNDEZ et al., 2008).

Equações diferenciais estocásticas

Resolução de SDEs segue a método da simulação dos caminhos amostrais é empregada na resolução da equação. O método consiste em uma aproximação numérica, mediante o emprego de tempos discretos, o que implica na necessidade da discretização do intervalo de tempo $[t_0, t_{fin}]$. Esta discretização é uniforme no tempo (HIGHAM, 2001).

Para realizar o cálculo é útil considerar o movimento Browniano discretizado, em que $W(t)$ é determinado pelos valores discretos t . Tomamos $\delta_t = T/N$ para um inteiro positivo N e fazemos $W(t_j)$, com $t_j = j\delta_t$.

Na aplicação para o cálculo do método de Euler-Maruyama conforme a seção 2.7 temos:

$X(t)$ é um processo estocástico que apresenta as seguintes características:

- Tendência linear
- Flutuações aleatórias proporcionais a $N(0, \Delta t)$;
- Incrementos independentes

Para aplicar um método numérico para o modelo em $[0, T]$, temos primeiro que discretizar o intervalo.

Fazendo $\Delta t = T/N$ para algum inteiro positivo N , e $\tau_j = j\Delta t$. A aproximação numérica para $X(\tau_j)$ será escrito da forma $X(j)$.

O método de Euler-Maruyama (EM) tem a seguinte forma:

$$X(j) = X(j-1) + f(X_{j-1})\Delta t + g(X_{j-1}) (W(\tau_j) - W(\tau_{j-1})), j = 1, 2, \dots, L. \quad (67)$$

$$X(\tau_j) = X(\tau_{j-1}) + \int_{\tau_{j-1}}^{\tau_j} f(X(s))ds + \int_{\tau_{j-1}}^{\tau_j} g(X(s))dW(s) \quad (68)$$

Cada um dos três termos do lado direito da Equação (68) é aproximado pelo termo correspondente do lado direito da Equação (67).

3.2 Modelo fluidodinâmico

Neste trabalho, foram realizadas simulações numéricas do comportamento fluidodinâmico de gás-sólido através do riser, sendo este modelado como um reator tubular, unidimensional.

O escoamento será suposto em regime permanente, incompressível, sem ocorrência de reações químicas e com catalisador (fase sólida) totalmente fluidizado. As partículas sólidas serão supostas de formato esférico e o atrito entre as paredes do riser e a fase sólida será considerado desprezível. Com estes pressupostos, as equações que modelam o comportamento foram obtidas através da aplicação da Equação (21) de conservação de massa do gás, da Equação (22) de conservação da massa do sólido, da Equação (23) de conservação da quantidade de movimento da mistura e da Equação (26) que descreve a fração volumétrica das fases. As hipóteses adotadas na elaboração do modelo fluidodinâmico do riser foram as seguintes:

- Escoamento em regime permanente;
- Modelo unidimensional (coordenadas cartesianas) – considera que a distribuição radial do sólido tem variação desprezível;
- Escoamento incompressível;

- Sem reação química;
- O catalisador (fase sólida) é descrito como meio contínuo – o sólido entra no riser já totalmente fluidizado;
- O atrito do sólido com as paredes do riser é desprezado;
- As partículas sólidas assumem ter formato esférico. (FARIAS, 2007).

3.3 Descrição da UPF

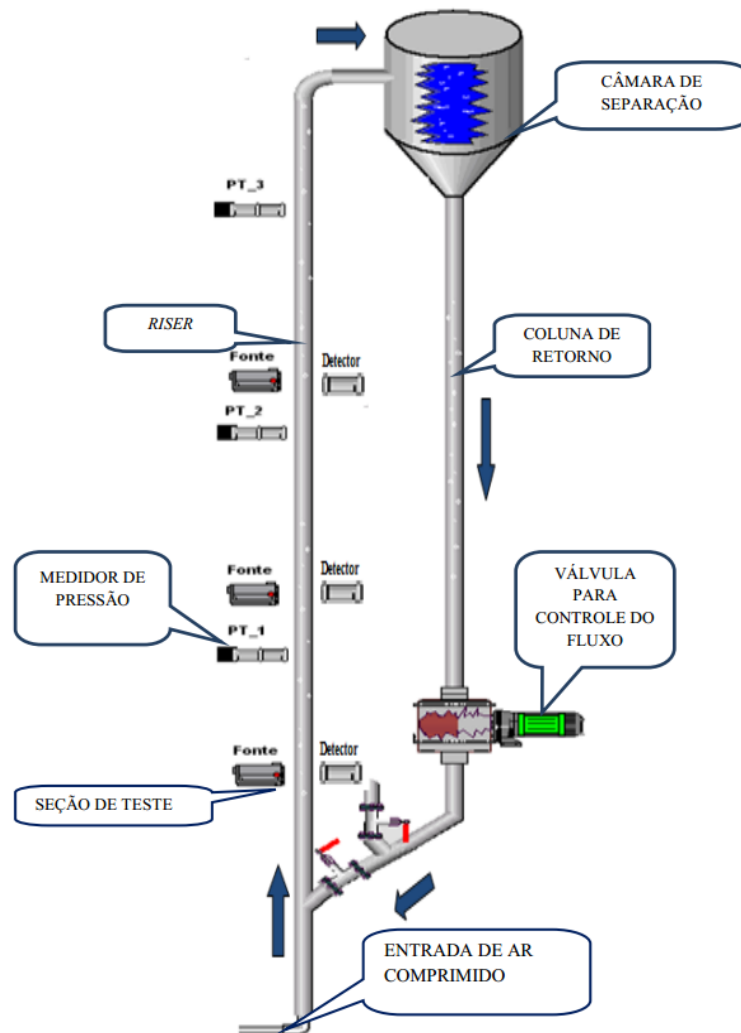
Os testes experimentais foram realizados na unidade piloto a frio (UPF) do DEN-UFPE, cuja finalidade principal é o estudo da aplicação da radiação gama na fluidodinâmica do riser. Construído com 6 m de altura e 0.1 m de diâmetro, em acrílico. Diversos equipamentos são utilizados na UPF para garantir o funcionamento do sistema em perfeitas condições de estabilidade e confiabilidade. No comando do sistema está o Controlador Lógico Programável-CLP. Os sensores do sistema são: pressão, umidade, temperatura e fluxo de ar. Válvula de injetor de sólidos, controlador do fluxo de ar e o desumidificador.

Em paralelo ao controle do sistema fluidodinâmico existe o sistema de medidas com transmissão gama. Este sistema consiste em três conjuntos de mesas equipadas para perfilagem gama instaladas ao longo do *riser*, localizadas a 0,65m, 1,38m e 3,25m em relação a base do *riser* respectivamente. Neste sistema uma fonte de ^{241}Am é utilizada para as medidas de transmissão gama através do fluxo bifásico formado por ar e catalisador. De um modo geral, as tanto as informações coletadas no CLP quanto os dados da radiação estão disponíveis no computador de controle da UPF, como ilustrado na Figura 4.

Pressão, vazão de ar e as intensidades de raios gama são medidas online para determinar os parâmetros do fluxo. Medições de transmissão de raios gama são necessárias como uma técnica não-invasiva. Os parâmetros são utilizados para resolver equações do modelo da dinâmica de fluidos.

As medidas de transmissão gama são feitas em três seções de teste, a seção de teste 1 pode ser observada na Figura 3. As seções de teste 1, 2 e 3 estão respectivamente a 0,95; 2,16 e 4,40 metros de distância da base do riser.

Figura 3 - Uma visão esquemática da UPF com circulação de sólidos indicado pelas setas, na parte superior, uma câmara com os ciclones para separar a fase sólida. À esquerda, o riser, três sensores de pressão (PT) e três arranjos com fonte gama em posição oposta ao detector. À direita, a coluna de retorno, uma válvula para controle do fluxo e a entrada de ar comprimido na base.



4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta seção são apresentados os principais resultados obtidos com a pesquisa. Resultados da modelagem determinística e estocástica com a análise dos fenômenos observados.

4.1 Cálculo da incerteza expandida

O método GUM e o MMC foram aplicados para obter uma estimativa da incerteza com base no modelo de medição no experimento 1 (calibração de massa) e no experimento 2 para avaliar a incerteza da fração volumétrica de sólidos no riser conforme configuração descrita em seguida.

4.1.1 Validação dos resultados do experimento 1 - Calibração de massa

Análise dos resultados obtidos

A função de densidade de probabilidade em forma de sino (como uma gaussiana) obtida pelo método MMC indica uma boa aproximação entre as melhores estimativas do GUM e MMC.

Resultado obtido na simulação usando Matlab.

O Cálculo MMC foi estabilizado

Tabela 1 : Resultados do método de incerteza GUM - ($\delta = 0,0005$)

Tolerância	Estimativa - y	Incerteza - u(y)	Intervalo - I(y)
0.0005	1.23396	0.0755145	[1.0831,1.38515]

O MMC não validou o Método GUM

Tabela 2 : Resultado do método Monte Carlo - ($\delta = 0,0005$)

Tolerância	Estimativa - y	Incerteza - u(y)	Intervalo - I(y)
0.0005	1.23413	0.0755128	[1.08105, 1.38069]

Alterando o valor da tolerância numérica

O Cálculo MMC foi estabilizado

Tabela 3 : Resultados do método de incerteza GUM - ($\delta = 0,005$)

Tolerância	Estimativa - y	Incerteza - u(y)	Intervalo - I(y)
0.005	1.23307	0.0755515	[1.08304,1.38524]

O Método GUM foi validado pelo MMC

Tabela 4 : Resultados do Método Monte Carlo - ($\delta = 0,005$)

Tolerância	Estimativa - y	Incerteza - u(y)	Intervalo - I(y)
0.005	1.23414	0.0755546	[1.08289,1.38225]

4.1.2 Experimento 2 - Cálculo da fração volumétrica de sólidos

O programa em Matlab foi implementado para um riser com as seguintes características:

$D = 16,4$ cm (diâmetro interno do riser)

$\rho = 0,85$ g / cm³ (massa específica do catalisador)

$\mu_L = 0,0715$ cm² / g (coeficiente de absorção de massa do catalisador).

$p = 0,95$ (nível de confiança desejado para o intervalo obtido para medir).

Análise dos resultados obtidos

O método GUM e o MMC adaptativo foram aplicados para obter uma estimativa da incerteza da fração volumétrica de sólidos com base no modelo de medição adotado, descrito pela Equação (11).

O procedimento foi realizado para avaliar a incerteza da fração volumétrica de sólidos.

Tabela 5 : Resultados do método de incerteza GUM - ($\delta = 5e-007$)

Tolerância	Estimativa - y	Incerteza - u(y)	Intervalo - I(y)
5e-007	0.0273021	8.15305e-005	[0.0271426, 0.0274622]

Tabela 6 : Resultados do Método Monte Carlo - ($\delta = 5e-007$)

Tolerância	Estimativa - y	Incerteza - u(y)	Intervalo - I(y)
5e-007	0.0273024	8.15312e-005	[0.0271422, 0.0274621]

O MMC não validou o Método GUM

Alterando o valor da tolerância numérica

O Cálculo MMC foi estabilizado

Tabela 7 : Resultados do método de incerteza GUM - ($\delta = 0.05$)

Tolerância	Estimativa - y	Incerteza - u(y)	Intervalo - I(y)
0.05	0.0273041	8.17589e-005	[0.0271419, 0.0274624]

Tabela 8 : Resultados do método de incerteza GUM - ($\delta = 0.05$)

Tolerância	Estimativa - y	Incerteza - u(y)	Intervalo - I(y)
0.05	0.0273022	8.17603e-005	[0.027142, 0.0274623]

Método GUM foi validado pelo MMC

Tabela 9 : Resultados do Método GUM - ($\delta = 0.0005$)

Tolerância	Estimativa - y	Incerteza - u(y)	Intervalo - I(y)
0.0005	0.027302	8.15998e-005	[0.0271432, 0.0271434]

Tabela 10 : Resultados do Método Monte Carlo - ($\delta = 0.0005$)

Tolerância	Estimativa - y	Incerteza - u(y)	Intervalo - I(y)
0.0005	0.0273023	8.16017e-005	[0.0271427, 0.0274627]

O MCM não validou o Método GUM

A Figura (5) representa o histograma gerado pelo programa MATLAB da função de densidade de probabilidade da grandeza de saída e a curva da distribuição gaussiana (curva contínua) para os parâmetros obtidos a partir do método GUM, que ficou sobreposta.

A função densidade de probabilidade em forma de sino (gaussiana) obtida pelo MMC indica uma boa concordância entre a melhor estimativa do GUM e do MMC.

Os resultados das estimativas apresentadas pelo método GUM e o MMC e suas incertezas padrão associadas apresentam uma boa concordância, porém os dois métodos apresentam diferentes intervalos de confiança:

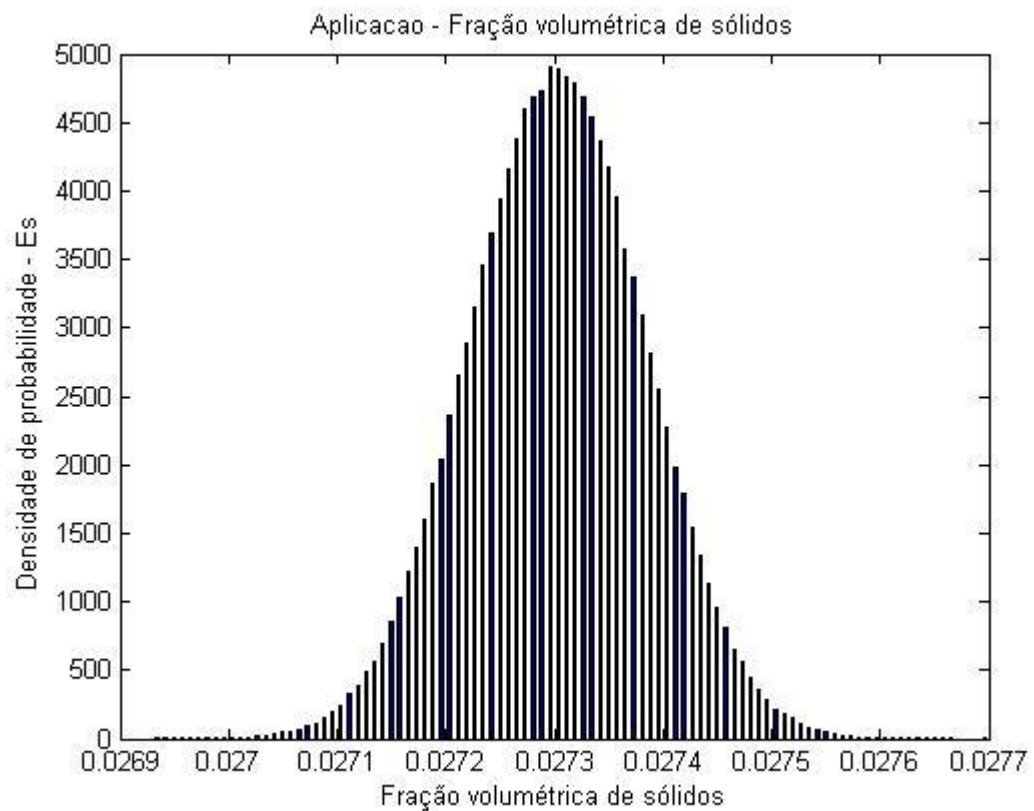
Tabela 11 : Intervalos de confiança por método

Tolerância	Intervalo - GUM	Intervalo – MCM
5e-007	[0.0271426, 0.0274622]	[0.0271427, 0.0274627]
0,05	[0.0271419, 0.0274624]	[0.027142, 0.0274623]
0,0005	[0.0271432, 0.0271434]	[0.0271427, 0.0274627]

Verificamos também que a validação do método GUM através do MMC é extremamente dependente do nível de tolerância adotado para o teste, (M. SOLAGUREN-BESCOA FERNÁNDEZ et al., 2008).

Por exemplo, a aplicação usando uma tolerância de $5e-007$ ou $0,0005$ o método do GUM não é validado. Trocamos o valor para $0,05$ e o procedimento foi validado.

Figura 4 - Aplicação no cálculo da fração volumétrica de sólidos



4.2 Calculando a incerteza

4.2.1 Avaliação da incerteza em modelo contínuo

Considere a transferência de calor unidimensional, ao longo de uma barra de comprimento unitário com seção desprezível. Suponha que uma extremidade da barra o calor é fixado a

uma temperatura inexata e a outra extremidade perde calor a uma taxa inexata, (DANTAS et al., 2006). O perfil de temperatura satisfaz:

$$\frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1$$

$$T(0) = T_0, \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=1} = Q$$

Onde $T(0) = T_0$ e Q são variáveis independentes inexatas, e λ é exata e conhecida, a condutividade térmica.

A solução analítica do problema é $T = T_0 + x(Q/\lambda)$. Suponha que T_0 e Q tem distribuição normal, com média 0°C e $1 \text{ W}_{\text{m-2}}$ respectivamente, e desvios padrão $0,2$ e $0,1 \text{ W}_{\text{m-2}}$ respectivamente. Se a quantidade de entrada T é a temperatura no meio da barra, então $T^* = T_0 + Q/(2\lambda)$ e a metodologia do GUM pode ser aplicada:

1. $T_0 \sim N(0,0,04)$ e $Q \sim N(1,0,01)$

2. $\frac{\partial T^*}{\partial T_0} = 1, \quad \frac{\partial T^*}{\partial Q} = \frac{1}{2\lambda}$

3. Medida de $\bar{T}^* = \frac{1}{2\lambda}$

4. Coeficiente de sensibilidade são 1 para T_0 e $1/(2\lambda)$ para Q .

5. Incerteza padrão combinada associada ao resultado da medida

$$\text{é } u_c^2 = 1 \times 0,04 + 0,01/(4\lambda^2)$$

6. Os graus de liberdade efetivos γ é considerado como infinito desde que as distribuições de T_0 e Q são conhecidas exatamente.

7. A incerteza expandida para 95 % do intervalo de confiança para o valor de T^* é

$$U_c = 1,96 \times [0,04 + 0,0025/\lambda^2]^{1/2} \text{ um intervalo para o valor da quantidade de saída é}$$

$$\left[\frac{1}{2\lambda} - U_c, \frac{1}{2\lambda} + U_c \right], \text{ e } T^* \text{ será tomado como tendo distribuição normal.}$$

4.2.2 Simulação do modelo determinístico.

A seguir estão relacionadas as simulações realizadas com diferentes configurações com o objetivo de se avaliar a incerteza no riser.

O programa calcula a incerteza u_c aplicando a Equação (6) à fração volumétrica de sólidos ε_s da Equação (11). As condições $I_v = 2.10^5$; I_F variando de 190000 até 199000; enquanto

ε_s varia de 0,05 até 0,005, e apresenta os gráficos.

Figura 6: Intensidade I_F contra ε_s . Nesse gráfico a intensidade cresce I_F e ε_s decresce, com essa simulação se poderia supor que a sensibilidade na determinação de ε_s depende só da intensidade.

Figura 5 - Intensidade versus fração volumétrica de sólidos

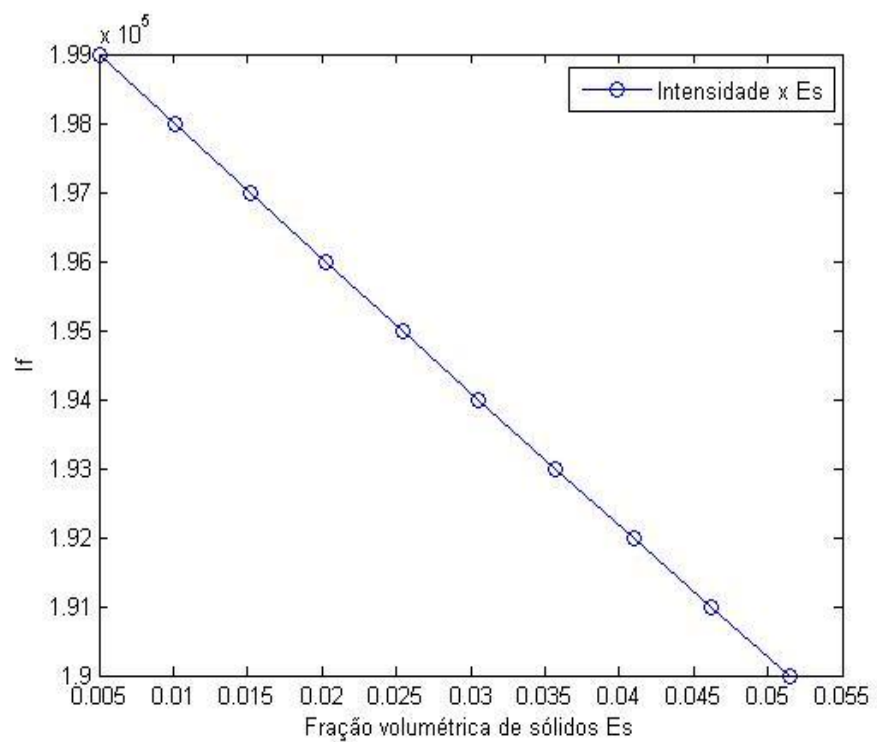
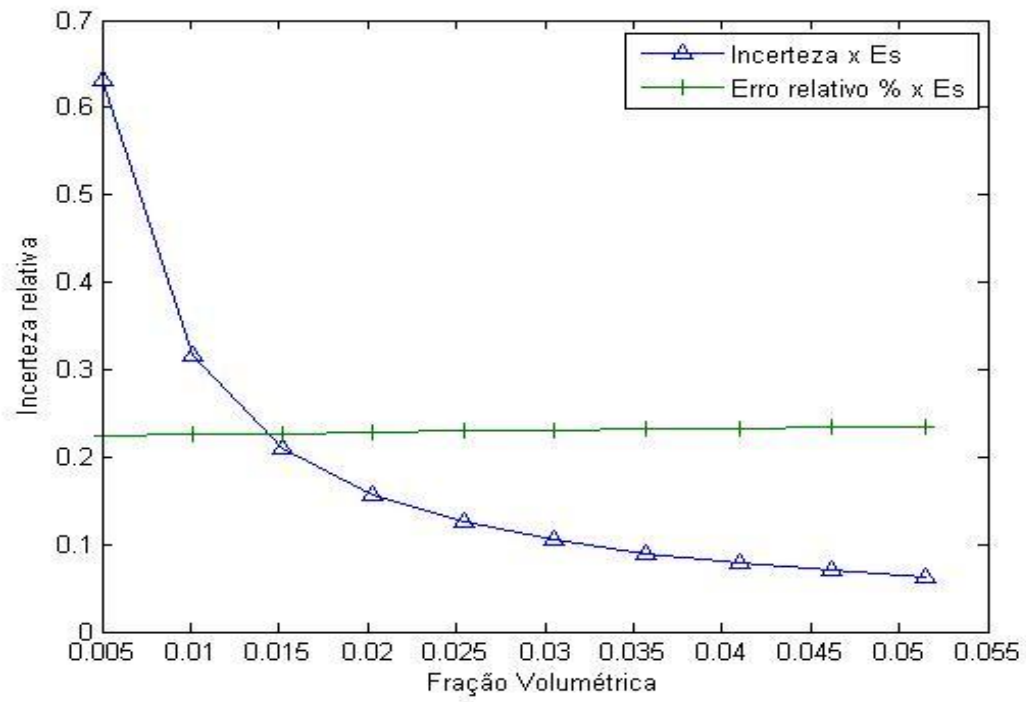
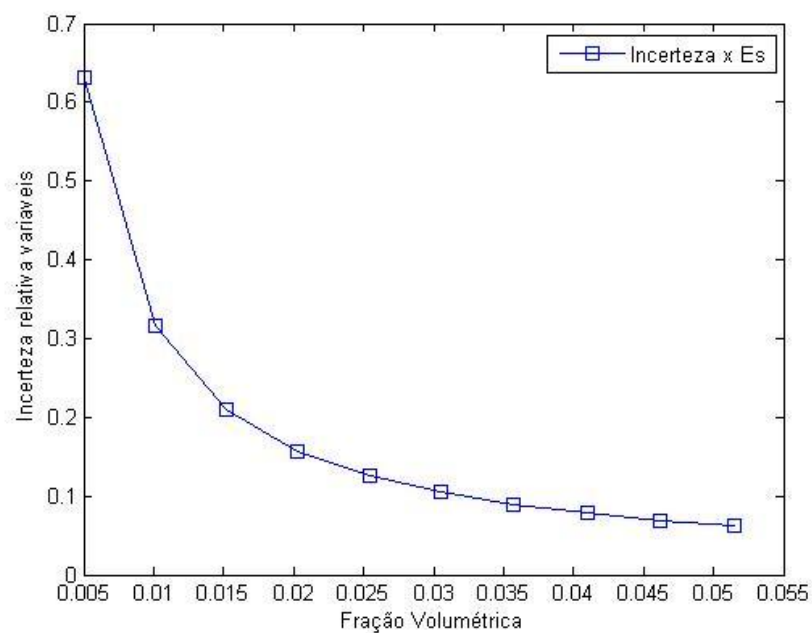


Figura 6 - Incerteza relativa versus fração volumétrica de sólidos



A Figura 6 - Incerteza relativa contra ε_s , mostra que na região onde ε_s é menor a incerteza relativa é exageradamente alta. Na Figura 6, também se pode observar o erro relativo percentual $(\sqrt{N}/N) \times 100$, que não é significativo e praticamente constante, caindo lentamente com a intensidade, no sentido oposto da incerteza relativa. Para observar a dependência da incerteza das variáveis, ou seja, considerando só o termo de I_V e I_F , na Equação (11).

Figura 7 - Incerteza relativa versus fração volumétrica (só variáveis)



Na Figura 7, a Incerteza relativa foi calculada só com as variáveis: intensidades I_V e I_F .

O gráfico da Figura 8, mostra que os termos relativos às constantes são desprezíveis se comparamos ao gráfico da Figura 7, cujos dados incluem todos os termos da Equação (11). A observação da incerteza relativa crescer tanto com ε_s próximo de 0,005, requer uma consideração, que pode ser melhor avaliada na Figura 9 - Intensidade relativa I_V/I_F versus ε_s .

Figura 8 - Intensidade relativa versus fração volumétrica de sólidos

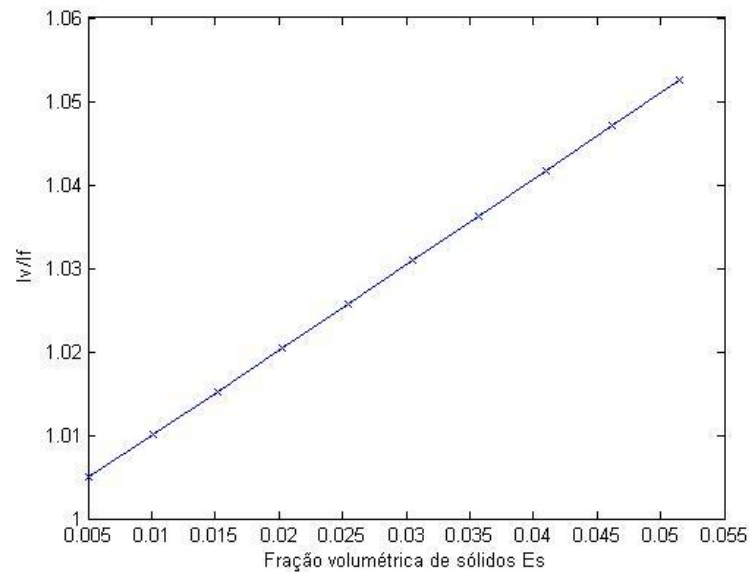


Figura 8 - Intensidade relativa contra ϵ_s se aproxima de 1, quando ϵ_s se aproxima do valor limite dado pela diferença significativa entre as intensidades.

4.3 Aplicação da incerteza no cálculo da fração volumétrica de sólidos

4.3.1 Problemas de medição

As médias aritméticas das observações e os desvios-padrão experimentais destas médias, calculados pelas Equações (3) e (5) em 2.1, são tomadas como sendo as melhores estimativas dos valores esperados das grandezas de entrada, e os desvios-padrão experimentais são as incertezas-padrão destas médias, (GUIDE, 2003).

Como as médias $\bar{I}_v$ e $\bar{I}_f$ são obtidas a partir de observações simultâneas, elas são correlacionadas e as correlações devem ser levadas em conta na avaliação das incertezas-padrão do mensurando Y (Enfoque 1). Os coeficientes de correlação requeridos são prontamente obtidos pela Equação (70). Os resultados são mostrados na Tabela 12.

Modelo proposto: considera a Equação (11).

Análise dos Dados

Os dados são analisados de dois modos distintos, sendo que ambos fornecem os mesmos resultados numéricos.

Em vista da variabilidade comparativamente pequena dos valores de I_v e I_f , a razão das médias $\frac{\bar{I}_v}{\bar{I}_f}$ são, respectivamente, quase as mesmas que a razão média $\bar{R}$ e seu desvio padrão experimental $s(\bar{R})$, como mostra a Tabela 12.

Enfoque 1:

Leva em conta as correlações observadas entre as grandezas de entrada.

Aplicar a Equação (6) do GUM para calcular a incerteza padrão combinada.

E a Equação (69) para calcular o coeficiente de correlação linear – r.

Onde
$$r(x_i, x_j) = \frac{u(x_i, x_j)}{u(x_i)u(x_j)}, \quad (70)$$

Na avaliação da Incerteza Padrão Combinada Relativa, temos:

$$\frac{u_c^2(\epsilon_s)}{\epsilon_s^2} = \frac{u^2(\mu)}{\mu^2} + \frac{u^2(\rho)}{\rho^2} + \frac{u^2(D)}{D^2} + \frac{u^2(\bar{I}_v)}{\bar{I}_v^2} + \frac{u^2(\bar{I}_f)}{\bar{I}_f^2} - 2r(\bar{I}_v, \bar{I}_f) \frac{u(\bar{I}_v)u(\bar{I}_f)}{\bar{I}_v\bar{I}_f} \quad (71)$$

Onde os últimos três termos fornecem a variância relativa estimada de

$$\bar{R} = \frac{I_v}{I_f} \quad (72)$$

Enfoque 2:

O segundo enfoque, o objetivo é evitar a correlação entre $\bar{I}_v$ e $\bar{I}_f$. O cálculo de ϵ_s usa a média aritmética de R onde $\bar{R} = \frac{I_v}{I_f}$

A expressão para a Incerteza combinada relativa é obtida com:

$$\frac{u_c^2(\epsilon_s)}{\epsilon_s^2} = \frac{u^2(\mu)}{\mu^2} + \frac{u^2(\rho)}{\rho^2} + \frac{u^2(D)}{D^2} + \frac{u^2(\bar{R})}{\bar{R}^2} \quad (73)$$

Onde:

$$\bar{R} = \frac{I_v}{I_f}$$

Tabela 12 : Resumo da avaliação do método 1 e 2 do GUM

Enfoque 1	Enfoque 2	
$u(\epsilon_s) = 8,4820\text{e-}05$	$u(\epsilon_s) = 8,4821\text{e}05$	
$\bar{I}_v = 551557$	$\bar{I}_f = 536287$	$\bar{R} = 1,0285$
$s(\bar{I}_v) = 2,8809\text{e}02$	$s(\bar{I}_f) = 3,4510\text{e}02$	$s(\bar{R}) = 8,667\text{e-}04$
$s(\bar{I}_v)/\bar{I}_v = 5,2230\text{e-}04$	$s(\bar{I}_f)/\bar{I}_f = 6,4351\text{e-}04$	$s(\bar{R})/\bar{R} = 7,8431\text{e-}04$
	$\frac{\bar{I}_v}{\bar{I}_f} = 1,0285$	
	$u(\bar{I}_v/\bar{I}_f) = 8,0905\text{e-}04$	
	$u(\bar{I}_v/\bar{I}_f)/\frac{\bar{I}_v}{\bar{I}_f} = 7,8665\text{e-}04$	
	$r(\bar{I}_v, \bar{I}_f) = 0,1013$	

Considerando os dois resultados, prefere-se o segundo método, porque ele evita a aproximação da razão das médias das duas grandezas pela média de uma razão de duas grandezas; e ele reflete melhor o procedimento de medição utilizado – os dados foram, de fato, coletados em ciclos separados.

Observamos que a diferença entre os valores de $u(\epsilon_s)$, resultantes dos dois enfoques, é claramente pequena, tal concordância entre os resultados demonstra que os dois enfoques são equivalentes quando as correlações observadas são apropriadamente consideradas.

4.3.2 Avaliação da condição limite

A Figura 8 mostra I_F versus ϵ_s , que para as condições dadas $I_V = 2.10^5$ e o mesmo intervalo de ϵ_s , todos os valores de ϵ_s podem ser determinados com a condição dada pela Equação (17), seção 2.1.5.1.

Figura 9 - Todos os valores de I_v podem ser determinados com a condição dada.

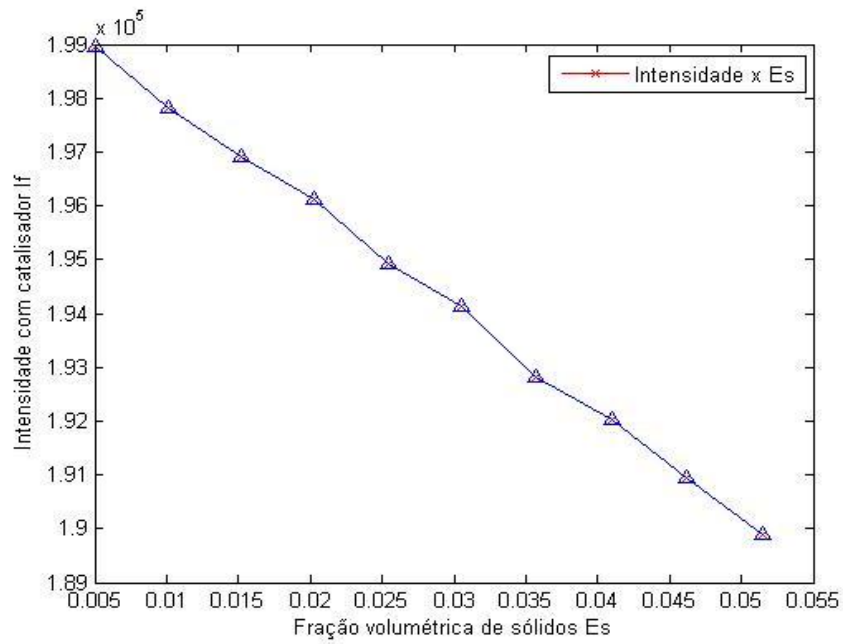


Figura 10 - A relação I_v/I_f satisfaz a Equação 18, todos os pontos podem ser medidos

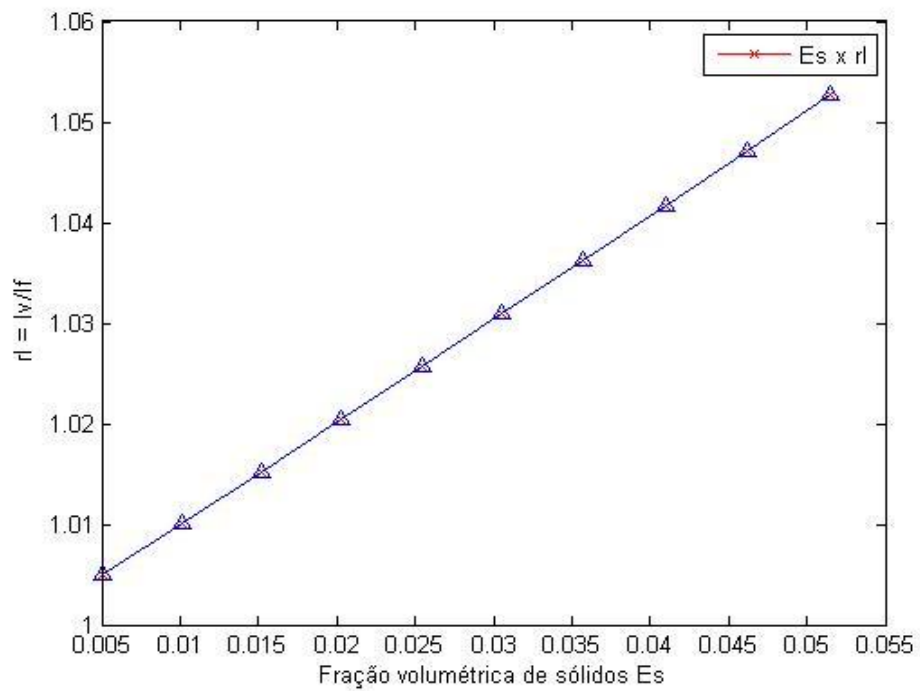


Figura 11 - Com $I_v = 2 \cdot 10^4$ não temos medida significativa para $< 1\%$

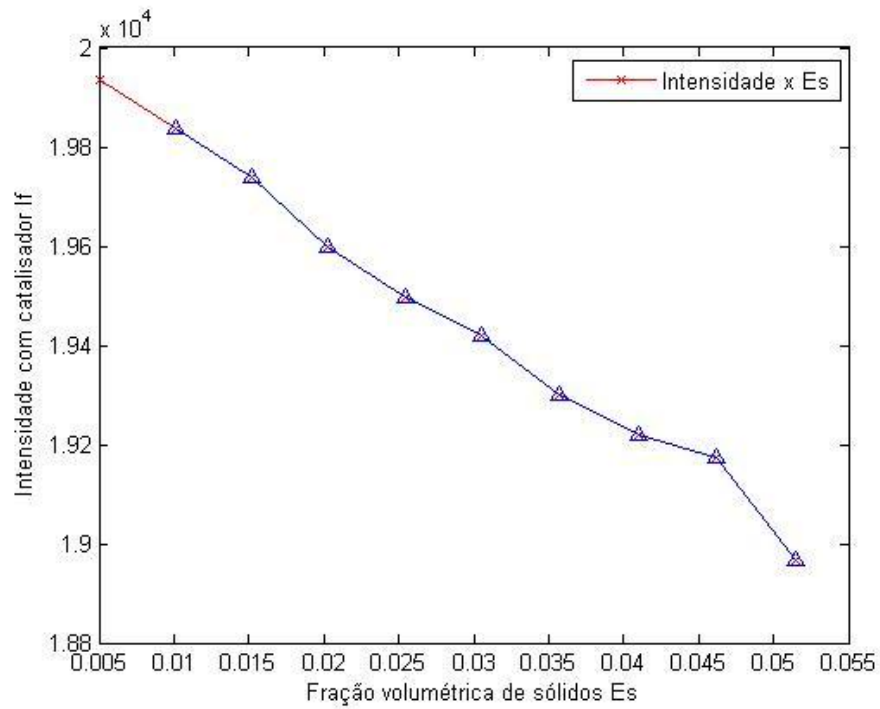


Figura 12 - Com $I_v = 2 \cdot 10^4$ não se tem medida significativa para $< 1\%$.

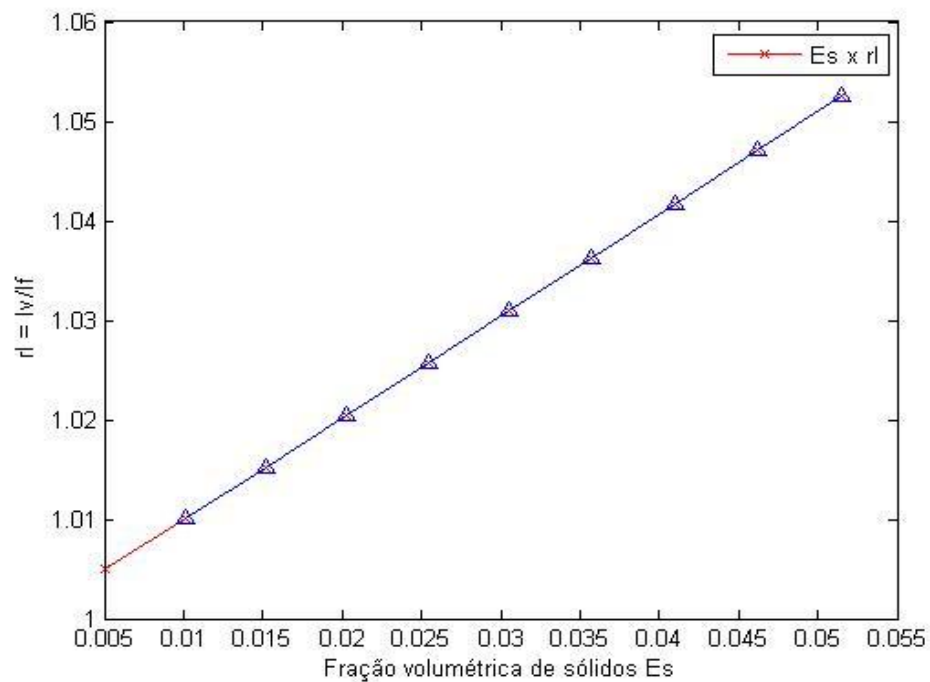


Figura 13 - Com $I_v = 1.10^6$ o intervalo pode ser medido.

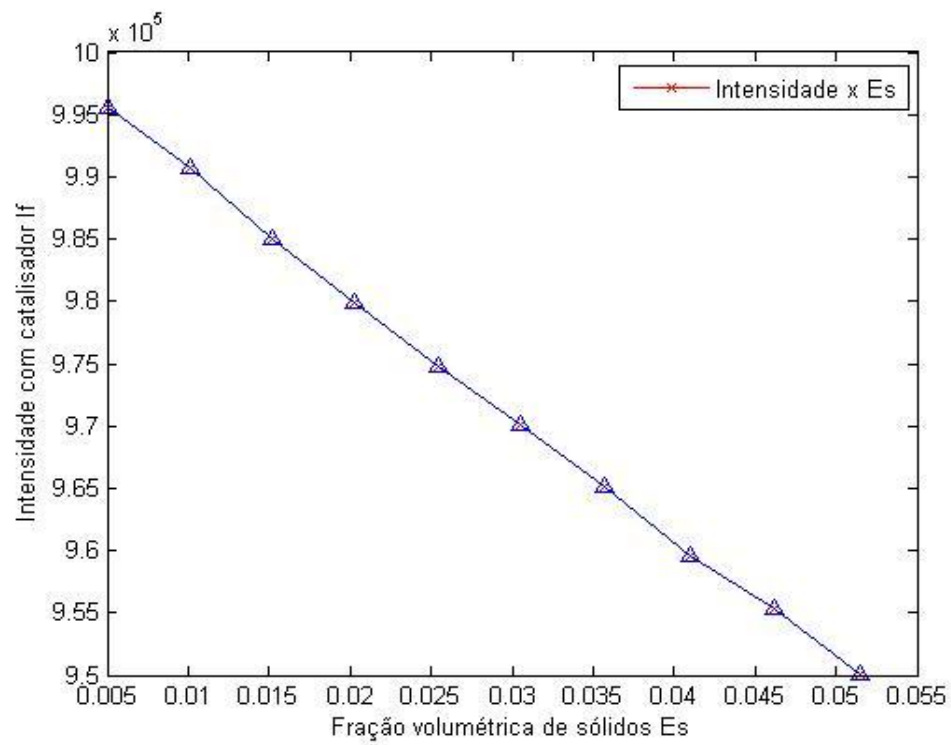
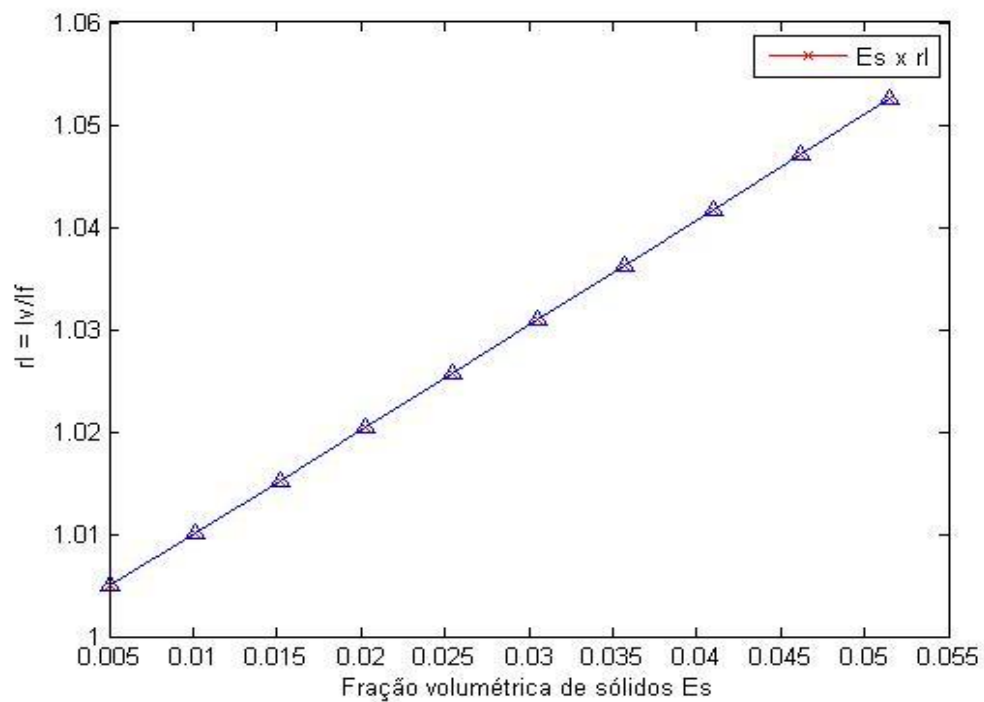


Figura 14 - Com $I_v = 1.10^6$ todos os pontos podem ser medido.



Essas avaliações dos gráficos das Figuras 8 a 14, permitiram interpretar as condições de fluxo com a UPF em operação. Onde a densidade do catalisador é de 850 kg/m^3 e o fluxo do sólido é de $7,1 \text{ Kg / m}^2 \cdot \text{s}$.

As condições de medidas em regime diluído do sólido em circulação são consideradas e confirmadas em grande extensão nos dados apresentados nas Figuras 15 até 25.

4.4 Avaliação de resultados

Para as medições, foram realizadas dez repetições para avaliar o fluxo do sólido com até quatro diferentes concentrações. O primeiro gráfico se refere as medidas de intensidade com o tubo vazio, que servirá de referência para as outras medidas.

Os gráficos da média de I_V com quatro diferentes concentrações de sólidos, foram plotados e também o intervalo de confiança como um gráfico de controle. Um total de cinco gráficos, observando dez repetições contando a dispersão em torno do valor médio, foram observados. Desta forma, o estado estável da unidade piloto pode ser monitorado. Esta observação mostra uma estabilidade semelhante para todos os cinco gráficos que são apresentados nas Figuras (15) a (19).

Em todas as amostras a distribuição em torno da média está dentro dos limites de 2σ , para um tamanho considerado relativamente pequeno da amostra $n = 10$. O limite inferior é o valor de I_F que se aproxima da intensidade I_V quando a concentração diminui, como pode ser visto na Figura (22).

O menor valor do catalisador é apresentado na Figura (22), como uma estrela, mostra que a intensidade relativa I_V/I_F fica próximo a 1 com seu hold up chegando perto de zero, de modo que uma determinação precisa não pode ser realizada, só o limite inferior pode ser estimado.

O gráfico da Figura (20) apresenta a distribuição das médias das intensidades obtidas de cada amostra. A Figura 21 mostra a incerteza relativa versus as médias de I_V e de 4 concentrações do catalisador.

4.4.1 Análise do fluxo de sólidos no riser da UPF.

Figura 15 – Dados experimentais (tubo vazio).

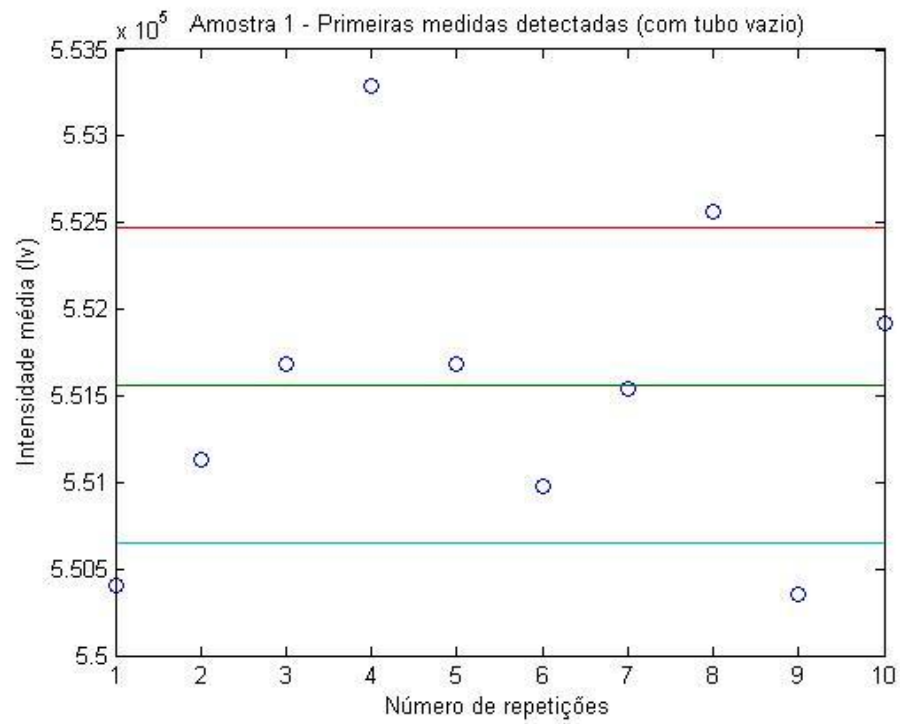


Figura 16 - Dados experimentais (concentração de sólidos – amostra 2).

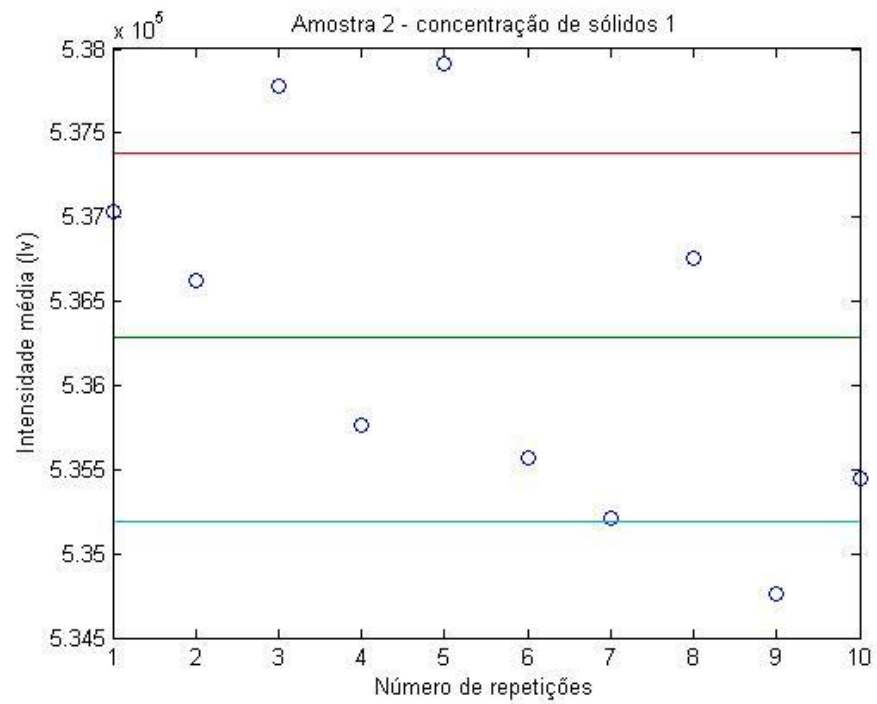


Figura 17 - Dados experimentais (concentração de sólidos – amostra 3).

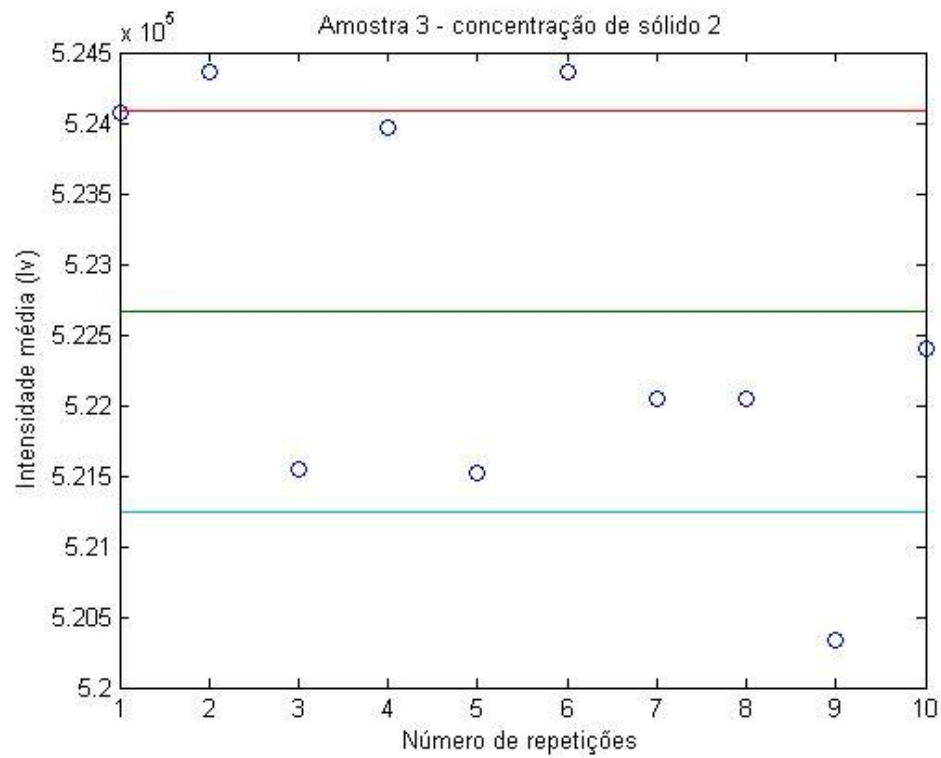


Figura 18 - Dados experimentais (concentração de sólidos – amostra 4).

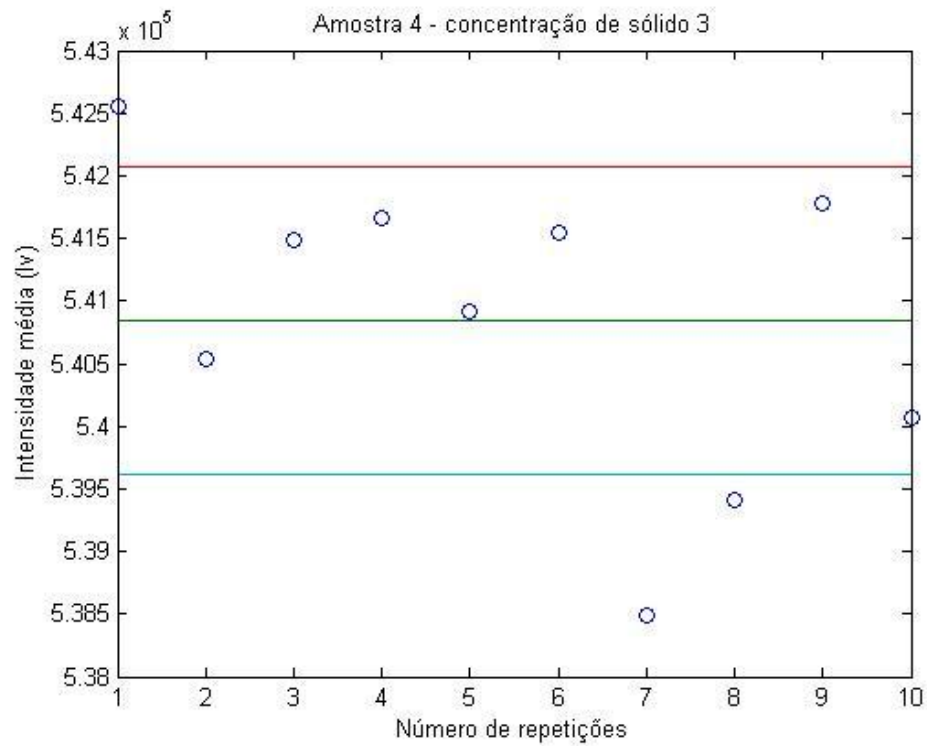


Figura 19 - Dados experimentais (concentração de sólidos – amostra 5)

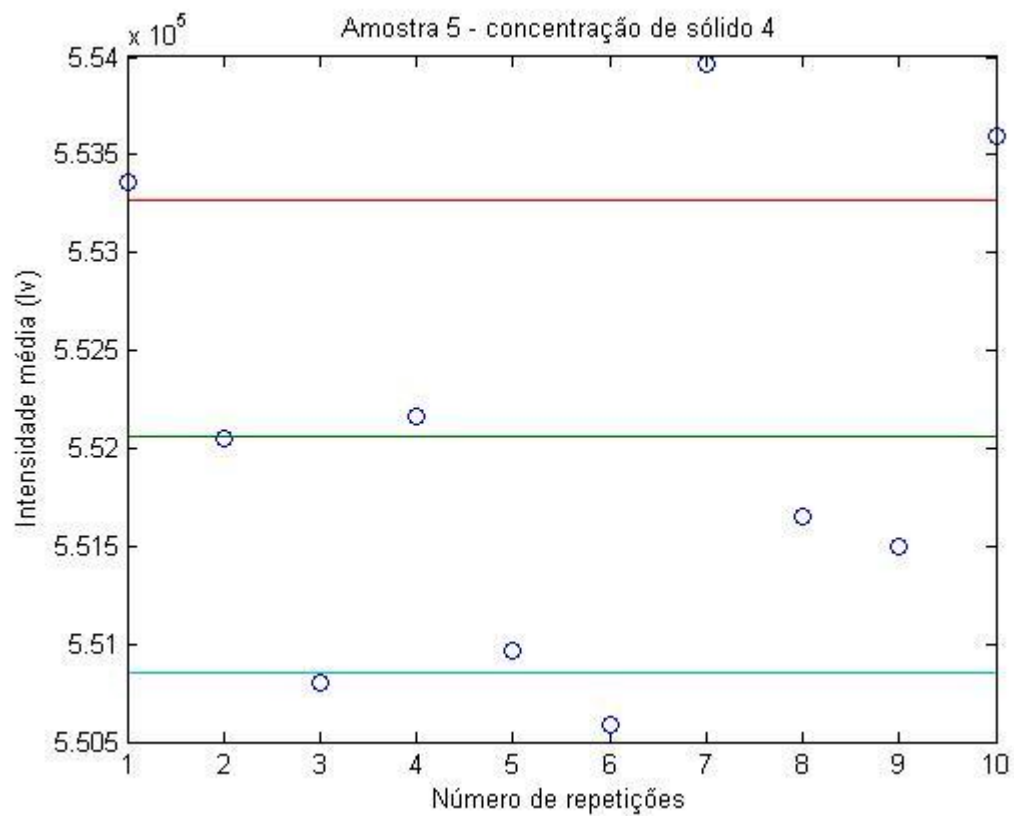


Figura 20 - Médias da concentração das cinco amostras observadas.

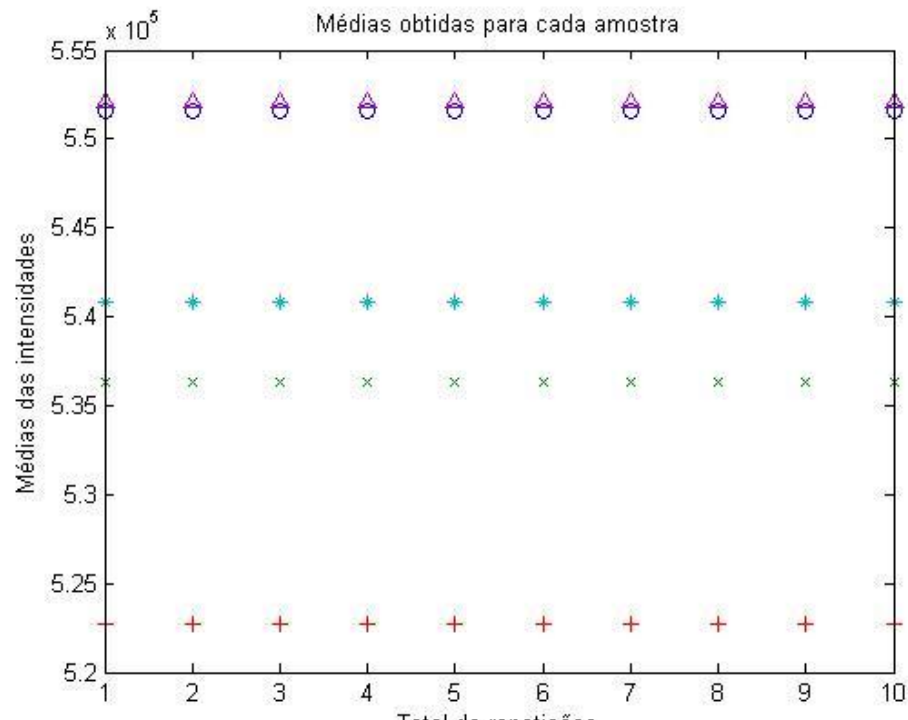


Figura 21 - Incerteza padrão relativa versus as médias de IV em círculo e de quatro concentrações do catalisador.

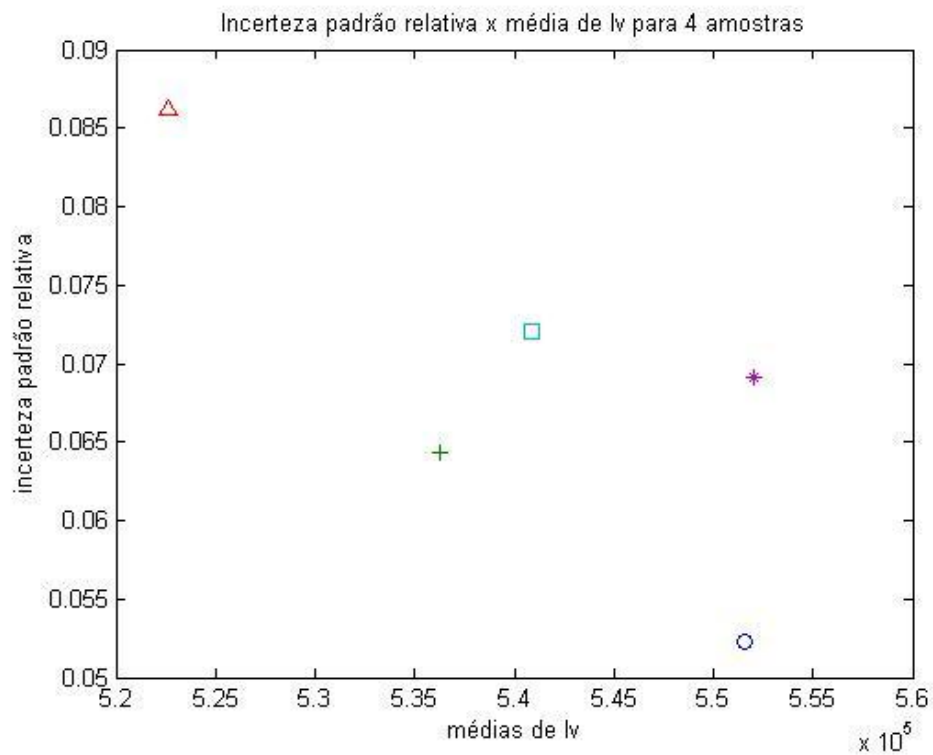
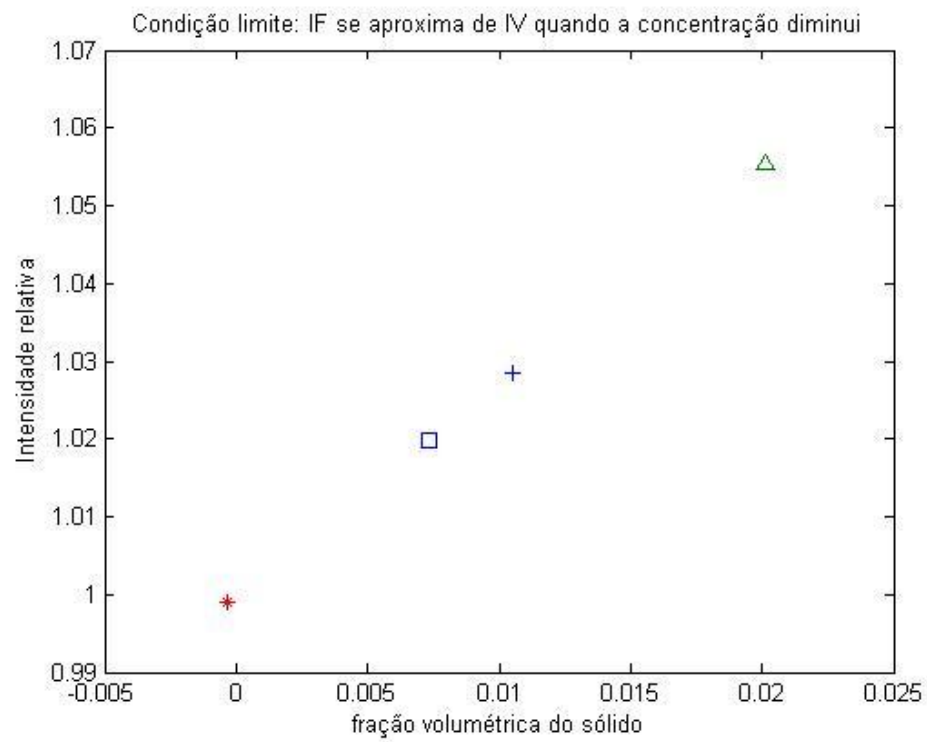


Figura 22 - Intensidade relativa para concentração de sólidos de 4 amostras



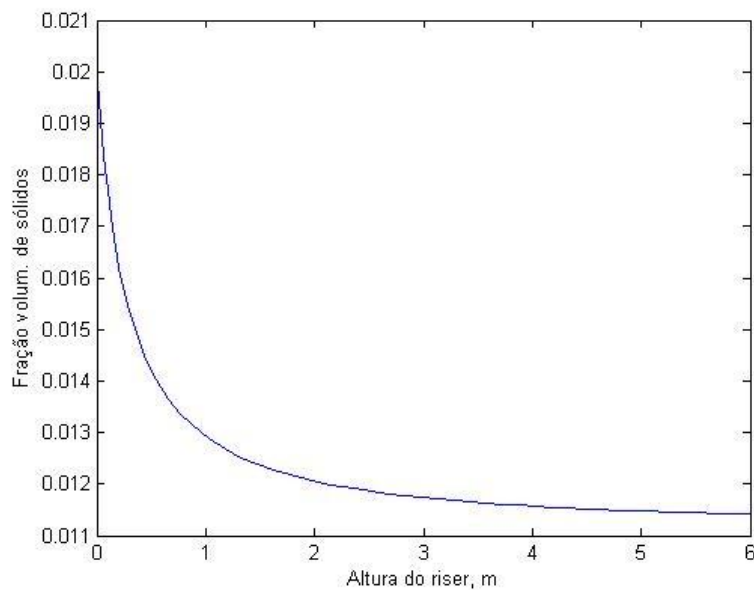
4.4.2 Resultados da simulação do modelo fluidodinâmico estocástico

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos com a simulação do modelo fluidodinâmico estocástico.

Uma vez que tem-se as seguintes variáveis: ϵ_s , U_g e U_s que são mostradas nas Figuras 24,25 e 26, poderíamos expressar os resultados da modelagem fluidodinâmica estocástica em relação ao fator de slip (fator de deslizamento), que é dado pela seguinte relação:

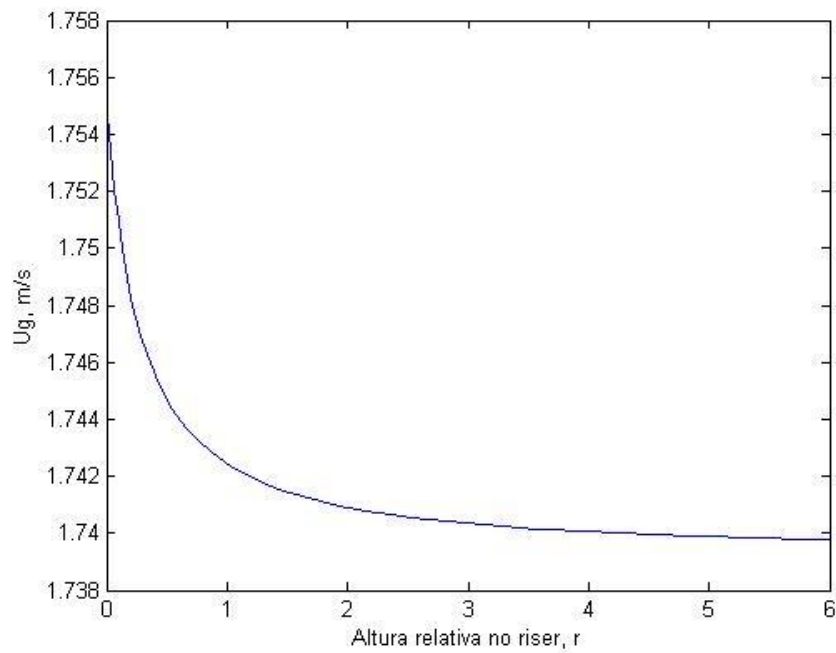
$$\gamma = \frac{U_g}{\epsilon U_s} \quad (\text{fator de arraste}). \quad (74)$$

Figura 23 -A fração volumétrica de sólidos ao longo do riser.



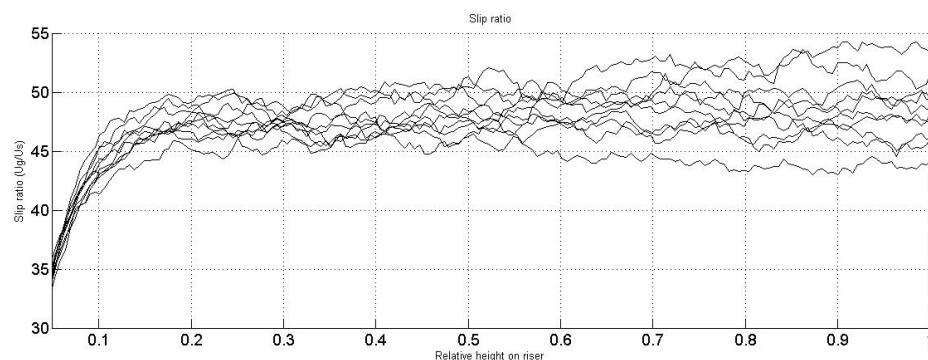
Na Figura 23 observamos que a fração volumétrica tende a decrescer a medida que avançamos no riser como esperado fisicamente dado que a ação da gravidade tende a acelerar o material particulado do qual é composto o catalisador no fundo do riser.

Figura 24 - Velocidade da fase gasosa (U_g)



Na Figura 24 observamos que a fase gasosa sofre uma redução de velocidade no início do processo, após esta desaceleração, a região de escoamento completamente desenvolvida começa a prevalecer e a velocidade do gás se estabiliza.

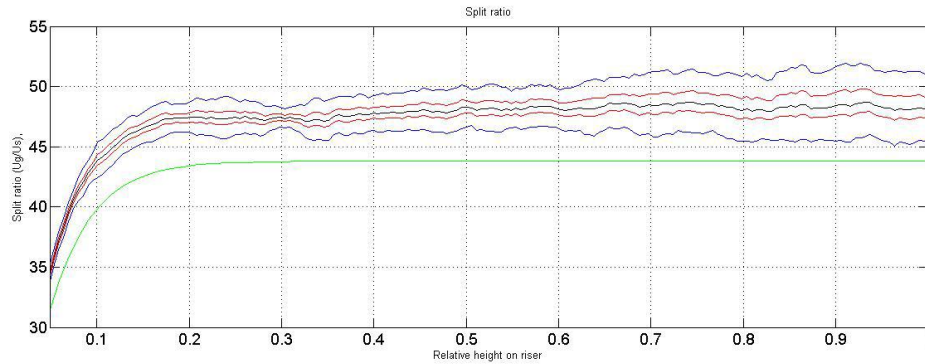
Figura 25 - Exemplo de uma solução numérica para a dinâmica do riser (1º resultado).



A Figura 25 representa a fração $\frac{U_g}{U_s}$ que é exibida para 10 simulações feitas com $\sigma = 0,01$ em função da altura normalizada do riser. Observe que a dispersão das trajetórias se acumula à medida que se avança no riser. Isto é esperado como comportamento numérico da solução

uma vez que a velocidade do sólido (U_s) tende a aumentar tornando pequenas variações do denominador de $\frac{U_g}{U_s}$ como uma grande dispersão no valor da expressão.

Figura 26 - Exemplo de uma solução numérica para a dinâmica do riser (2º resultado).



Temos que na Figura 26 a curva verde representa a relação $\frac{U_g}{U_s}$ para o modelo determinístico.

Com relação a essa curva observa-se que o seu início corresponde à distância de partida do modelo determinístico. Na mesma figura o modelo estocástico é representado da seguinte forma:

- A linha preta no centro, se refere ao comportamento padrão médio da relação $\frac{U_g}{U_s}$ para 100 simulações com desvio padrão de 1% ($\sigma = 0,01$), usando o método de Euler-Maruyama, conforme descrito na seção 2.7.
- As linhas azuis ao lado da curva preta representam a distância de um desvio padrão do valor médio;
- As linhas vermelhas se referem ao desvio da incerteza $\frac{\sigma}{\sqrt{\text{número de simulações}}}$ (LIMA, et al., 2014).

5. CONCLUSÕES

A incerteza em modelos discretos que calculam a fração volumétrica de sólidos por meio do perfil de pressão e de transmissão gama foi avaliada e comparada com dados experimentais.

A simulação do modelo contínuo permite estimar incerteza na dinâmica do riser. Antes de tudo a implementação simples de um método estocástico por meio da computação numérica de um algoritmo clássico Runge-Kutta, com um software como Matlab motiva a continuação da investigação, por exemplo, de um modelo bidimensional. Em simulações fluidodinâmicas o método apresentado pode ser uma alternativa ao CFD na avaliação da incerteza devido a simplicidade operacional. A compreensão dos fenômenos envolvidos pode ser aprofundada pela simplicidade da comparação com dados experimentais.

REFERÊNCIAS

- ASSUNÇÃO, P. M.; PEREIRA, F. F.; FREIRE, F. B.; ROMERO, O. J. **Simulação do craqueamento catalítico de óleos pesados no interior de um riser**. 5º Congresso brasileiro de P&D em petróleo e gás, Fortaleza, 2009.
- BARKER, R. M., M. G. Cox, A. B. Forbes and P. M. Harris, "**Discrete Modelling and Experimental Data Analysis**", Software Support for Metrology, Best Practice. Guide N. 4, NPL, April 2004.
- BARTHOLOMEW, R. N. and CASAGRANDE, R. M. Measuring solids Concentration in Fluidized Systems by Gamma Ray Absorption, **Industrial and Engineering Chemistry**, Vol. 49, N.3, 1957, p. 428-431.
- BROCK, W.A. and M.J.P. "**Dynamics Under Uncertainty**", *ECONOMETRICA* 47, 843-868. MaGill (1979).
- BROCK, William A. , Durlauf, Steven N., West, Kenneth D., "**model uncertainty and policy evaluation: some theory and empirics**", *Journal of Econometrics* 136 (2007) 629-664.
- CHOI J; HWANG E; SO H-Y; KIM B. (2003). **An uncertainty evaluation for multiple measurements by GUM, II**. *Accred Qual Assur*, 8:13– 15.
- COX, M.; DANTON, M. and HARRIS, P. M. **Uncertainty and Statistical Modelling. Software Support for Metrology**. Best Practice Guide N° 6, National Physical Laboratory, 2001.
- DANTAS, C. C.; V. A. dos Santos; Melo, A.C.B.A.; R. Van Grieken; **Precise gamma ray measurement of the radial distribution of a cracking catalyst at diluted concentrations in a glass riser**. Department of Nuclear Energy, Federal University of Pernambuco – UFPE, Av. Prof. Luiz Freire 1000, 2006.
- DANTAS, C. C.; MELO S. B.; OLIVEIRA E. F.; SIMÕES, F.P.M.; DOS SANTOS, M.G.; DOS SANTOS, V.A. **Measurement of density distribution of a cracking catalyst in experimental riser with a sampling procedure for gamma ray tomography**. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 266 (2008) 841–848.
- DANTAS, C.C.; MOURA, A.E.; LIMA FILHO, H.J.B.; MELO, S.B.; SANTOS, V.A.; LIMA, E.A.O. **Uncertainty evaluation by gamma transmission measurements and CFD model comparison in a FCC cold pilot unit**. *J. Metrol. Qual. Eng.* v 4, p. 9–15 (2013).
- LIMA, Emerson A de Oliveira ; Melo, Sílvio ; DANTAS, C. C. ; Francisco A. S. Teles . **Uncertainty Evaluation of Fluid Dynamic Simulation with One-Dimensional Riser Model by Means of Stochastic Differential Equations**. In: *Advanced Mathematical and Computational Tools in Metrology and Testing (AMCTM 2014)*, 2014, St. Petersburg, Russia. Programme talks abstracts. St. Petersburg: IMEKO, 2014. v. 1.
- DUDUKOVID M. P.; AL-DAHMAN M. H.; ROY S.; KEMOUN A. **Experimental validation of computational fluid dynamic codes (CFD) for liquid-solid risers in clean alkylation processes**. *Chemical ind.* Vol.56, 2002, p. 497-505.
- FARIAS, G. S. **Análise de sensibilidade do modelo fluidodinâmico de um riser através do formalismo diferencial perturbativo**. 2007. Dissertação (Mestrado) - Curso de Pós-graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares, UFPE, Recife, 2007.

GUIDE to the Expression of Uncertainty in Measurement, BIPM, IEC, ISO, IUPAC, and OIML, ISBN 92-67-10188-9, Second Edition, 2003.

G. J. LORD and L. WEIGHT. **Uncertainty Evaluation in Continuous Modelling**. NPL Report CMSC 31/03, December 2003.

GUM SUPPL. 1. **Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement (GUM) – Supplement 1: numerical methods for the propagation of distributions**. In accordance with the ISO/IEC Directives, Part 1, 2001, Clause A5, this draft is submitted to the ISO national bodies for approval. International Organization for Standardization, 2004.

HIGHAM, Desmond J. **An Algorithmic Introduction to Numerical Simulation of Stochastic Differential Equations** — August 1, 2001.

INMETRO. “**Guia para a Expressão da Incerteza de Medição**”, 3ª. edição brasileira, Rio de Janeiro, Brasil, 2003.

JCGM 100:2008. **Evaluation of measurement data - Guide to the expression of uncertainty in measurement**, Joint Committee for Guides in Metrology (JCGM/WG 1).

JONGBUM KIM, SUNGHEE JUNG AND JINSUP KIM. **A Study On Industrial Gamma Ray CT With A Single Source-Detector Pair**. Nuclear Engineering And Technology, Vol.38 No.4 June 2006.

LIMA FILHO, H. J. B. **Validação de modelos CFD bi e tridimensionais de um riser piloto a frio com auxílio de medidas de transmissão gama**. 2014. Tese (Engenharia Química) – Universidade Federal de Pernambuco, 2014, Recife.

MALLADI, M. P. H.; OTERO-SCHIPPER. F. J. An analysis of gas solid transport in small and large diameter riser reactor. Mobil Research & Develop. Corp., Research department, March 2, 1983.

MATHELIN, L.; HUSSAINI, M.Y. and ZANG, T.A. (2005). “**Stochastic approaches to uncertainty quantification in CFD simulations**”, Numerical Algorithms 38, 209–236.

MELO, A. C. B. A. **Validação de modelos matemáticos para descrever a fluidodinâmica de um riser utilizando atenuação gama**. Tese de Doutorado. 140 p. Programa de Pós-graduação em Tecnologias Energéticas e Nucleares. Departamento de Energia Nuclear da Universidade Federal de Pernambuco. Recife, 2004.

M. SOLAGUREN-BESCOA FERNÁNDEZ; J. M. ALEGRE CALDERÓN.; P. M. BRAVO DIEZ. **Implementation in MATLAB of the adaptive Monte Carlo method for the evaluation of measurement uncertainties**. Springer-Verlag, 2008.

P. KLOEDEN AND E. PLATEN. **Solução Numérica de Equações Diferenciais Estocásticas**. Springer-Verlag, Berlin, 1999.

R KACKER AND A JONES. **On use of Bayesian statistics to make the Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement Consistent**, Metrology 40 (2003) 235–248.

SANTOS, V. A, dos; DANTAS, C. C.; FINKLER, C. L. L.; SOUZA, J. E. G. **Principal component analysis in an experimental cold flow model of a fluid catalytic cracking unit by gammametry**. Progress in Nuclear Energy, v. 53 p. 1114-1118 (2011).

SOUZA NETTO, W. F.; BRITO, M. F. P.; DANTAS, C. C. ; SILVA, J. M. F.; SANTOS, V. A.; FREITAS, R. B.; BARBOSA, E. S. **A Fluid Dynamic Model for Catalyst Flow in Riser of a FCC Cold Pilot Unity is Validated by Gama Ray Transmission Measurements.** International Nuclear Atlantic Conference, 2013, Recife. Resumos... Recife: Associação Brasileira de Energia Nuclear, 2013.

TREVOR, ESWARD; GABRIEL LORD and LOUISE WRIGHT. **Model Validation in Continuous Modelling**, NPL Report CMSC 29/03, September 2003.

WIRTH, K. E.; MOLERUS, O.; SEITER, M. Feststoffkonzentration und -geschwindigkeiten in wandnahen Bereichen zirkulierender Wirbelschichten. **VGB-Kraftwerkstechnik** Vol. 10, 1991, p.925-929.

APÊNDICE A – TRABALHOS APRESENTADOS EM CONGRESSOS

UNCERTAINTY EVALUATION OF FLUID DYNAMIC MODELS AND VALIDATION BY GAMMA RAY TRANSMISSION MEASUREMENTS OF THE CATALYST FLOW IN A FCC COLD PILOT UNITY.

**Francisco A. S. Teles¹, Ebenezer F. Santos¹, Carlos C. Dantas¹, Silvio B. Melo²,
Valdemir A. dos Santos³, Emerson A. O. Lima⁴**

¹Departamento de Energia Nuclear

Centro de Tecnologia e Geociências

Universidade Federal de Pernambuco – UFPE

50740-540 Recife, PE

francisco.teles@ufpe.br

²Centro de Informática, CIN,

Universidade Federal de Pernambuco – UFPE

Recife, sbm@cin.ufpe.br

³Departamentode Química - Universidade Católica de Pernambuco - UNICAP

Rua do Príncipe 526, Boa Vista

50050-410, Recife– PE

vas@unicap.br

⁴Escola Politécnica, POLI

Universidade de Pernambuco – UPE

Recife, emathematics@gmail.com

ABSTRACT

In this paper, fluid dynamics of Fluid Catalytic Cracking (FCC) process is investigated by means of a Cold Flow Pilot Unit (CFPU) constructed in Plexiglas to visualize operational conditions. Axial and radial catalyst profiles were measured by gamma ray transmission in the riser of the CFPU. Standard uncertainty was evaluated in volumetric solid fraction measurements for several concentrations at a given point of axial profile. Monitoring of the pressure drop in riser shows a good agreement with measured standard uncertainty data. A further evaluation of the combined uncertainty was applied to volumetric solid fraction equation using gamma transmission data. Limit condition of catalyst concentration in riser was defined and simulation with random numbers provided by MATLAB software has tested uncertainty evaluation. The Guide to the expression of Uncertainty in Measurement (GUM) is based on the law of propagation of uncertainty and on the characterization of the quantities measured by means of either a Gaussian distribution or a t-distribution, which allows measurement uncertainty to be delimited by means of a confidence interval. A variety of supplements to GUM are being developed, which will progressively enter into effect. The first of these supplements [3] describes an alternative procedure for the calculation of uncertainties: the Monte Carlo Method (MCM). MCM is an alternative to GUM, since it performs a characterization of the quantities measured based on the random sampling of the probability distribution functions. This paper also explains the basic implementation of the MCM method in MATLAB.

INTRODUCTION

In accordance with the ISO/IEC 17025:1999 [1] standard, all calibration or testing laboratories must have and apply procedures to evaluate uncertainty in measurements as a guarantee of their technical competence. With its publication as an ISO standard, the method for evaluating measurement uncertainties described in the ISO 98:1995 guide commonly known as the 'Guide to the expression of Uncertainty in Measurement' (GUM) [3] has been widely used and accepted by the metrological accreditation organizations. In flow measurements all models describing the calibration and assessment process are based on discrete data. The measurement of time, mass, volume and meter outputs produce discrete data sets. The use of continuous data is confined to the research and modeling area of measurement. Computational Fluid Dynamics (CFD) is, however, used extensively to predict the effect of changing flow conditions on measurement devices [3]. The GUM approach for uncertainty evaluation is the most common method for calculating uncertainty in metrology once the model linking the input quantities and output quantities has been identified, and Probability

Density Functions (PDFs) have been assigned to the input quantities. This process is based on applying the law of propagation of uncertainty and invoking the Central Limit Theorem to assign a distribution for the value of the output quantity. The procedure relies on a number of suppositions:

- The linearization of the model is appropriate;
- The representation of the distribution for the value of the output quantity in terms of a Gaussian distribution or a t-distribution is adequate;
- The Welch-Satterthwaite formula is adequate for the problem;
- The input quantities are uncorrelated.

The Monte Carlo Method (MCM) has been a practical alternative to GUM in cases in which the latter is not applicable or its validity is not clear. The fundamental difference between both methods lies in that GUM is a deterministic method based on the mathematical combination of probability distribution (propagation of uncertainty), while the MCM is a probabilistic method that performs the combination of probability distributions by numerical simulations (propagation of distributions). Metrological activities are fundamental to guarantee the quality of scientific and industrial activities. The results of such measurements must be valid, comparable, and reproducible; and their uncertainty is the quantitative measurement that expresses the quality of such results. Experimental work and uncertainty evaluation were carried out in pilot unit by gamma ray measurements with software applications that were specifically developed for calculating measurement uncertainties, and some of them use the MCM.

UNCERTAINTY EVALUATION

Uncertainty assessment consists of three main steps: formulation, calculation and summarization. At the formulation stage, metrology develops the model from information available on the process, and assigns Probability Density Functions (PDFs) to the input of the model. These distributions are obtained from the analysis of a number of indicators available. In the step of calculation, the distributions are propagated through the measurement model for the distribution of the output quantity. This distribution is used to obtain: (i) the expected value of the output (obtaining an estimate of it), (ii) the standard deviation taken as the standard uncertainty associated with the estimate, and (iii) a confidence interval corresponding to a specified probability of coverage. In the step of summarization it is obtained: (i) an input quantity in a measurement model by an estimate (expectation), (ii) associated standard uncertainty (standard deviation), and (iii) associated degrees of freedom, obtained from the probability distribution assigned to the quantity.

2.1. Formulation

This function implements the GUM uncertainty framework for uncertainty evaluation for a measurement model. In most cases the measurand Y is not measured directly, but is determined from N other quantities $X_1, X_2, \dots, X_N$ through a functional relationship f :

$$Y = f(X_1, X_2, \dots, X_N) \quad . \quad (1)$$

with a scalar output quantity and a general number of uncorrelated input quantities. An estimate of the measurand Y is obtained from equation (1) using input estimates $x_1, x_2, \dots, x_N$, for values of N magnitudes $X_1, X_2, \dots, X_N$. Thus the estimated output y , which is the result of the measurement, is given by:

$$y = f(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad . \quad (2)$$

The model contains a function for evaluating the measurement model for values of the input quantities, and calculating sensitivity coefficients [3]. Each input quantity in the measurement model is assigned a probability distribution, described by a probability density function, which may be (i) a Gaussian (or normal) distribution, (ii) a shifted t-distribution, (iii) a rectangular (or uniform) distribution.

2.2. Calculation

The model is evaluated for the estimates of the input quantities to obtain an estimate of the output quantity. The first order partial derivatives of the model with respect to the input quantities are evaluated for the estimates of the input quantities to obtain the sensitivity coefficients. The law of propagation of uncertainty is applied to obtain the standard uncertainty associated with the output quantity (measurand). The estimate is obtained by evaluating the model at the expectations of the input quantities and the associated standard uncertainty by applying the law of propagation of uncertainty. The output quantity is characterized by a Gaussian distribution or a scaled and shifted t-distribution, and the distribution is used as the basis for evaluating the confidence interval for the output quantity.

2.2.1. Standard Uncertainty

The uncertainty of the result of a measurement is expressed as a standard deviation. The standard uncertainty of y is used, where y is the estimate of the measurand Y , and thus, the measurement result is obtained by appropriate combination of standard uncertainties of the input estimates $(x_1, x_2, \dots, x_N)$.

2.2.2. Standard Uncertainty

The combined standard uncertainty $u_c(y)$ is the positive square root of the combined variance which is given by:

$$u_c^2(y) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial f}{\partial x_i} \right]^2 u_c^2(x_i) . \quad (3)$$

2.3. Summarization

If the probability distribution of the output quantity was normal, the interval defined by its standard uncertainty $u_c(y)$ would have a level of confidence of approximately 68%, the uncertainty interval is usually expressed through the expanded uncertainty.

2.3.1. Expanded Uncertainty

The expanded uncertainty is evaluated as the product of the standard uncertainty $u(y)$ and the coverage factor k_p that depends on the required coverage probability and the effective degrees of freedom.

$$U(y) = k_p * u_c(y) . \quad (4)$$

The calculation of the expanded uncertainty depends on the knowledge of the distribution that characterizes the output quantity Y . In the GUM method of uncertainty, with the t-distribution and v_{eff} degrees of freedom it is assigned to the random variable:

$$t = \frac{Y - y}{u(y)} \quad (5)$$

Where u is the estimate for the combined standard uncertainty and $k = [1,2]$ according to the GUM. The k value, called the expansion factor, is related to the degree of confidence that we have in the construction of the interval. Generally, it is 95% or 99%. The calculation of k should be based on the student-t distribution, which allows determining the expanded uncertainty from small samples. The Welch-Satterthwaite formula (WS) described in the GUM allows to calculate an effective number of degrees of freedom for the standard uncertainty associated with an estimate of measurement [3].

$$v_{\text{eff}} = \frac{u_c^4(y)}{\sum_{i=1}^N \frac{u_c^4(y)}{v_i}} \quad (6)$$

2.4. Considerations

In the following, we highlight some considerations that should be taken into account when dealing with uncertain evaluation:

- The International Organization for Standardization (ISO-GUM) recommends using the WS formula for calculating the expanded uncertainty for confidence intervals for uncertainties formed from various distributions;
- This approach facilitates the calculation of a range of expanded uncertainty for the value of the measured quantity. However, the WS formula is applicable only when the input of the measurement model with finite degrees of freedom are not correlated;
- The development of these confidence intervals requires a description of the probability distribution for the value of the measurand;
- The estimates of the input and its standard uncertainty should have a linear relationship;
- The estimates of the input must have a normal distribution;
- The ISO-GUM suggests that under certain conditions, motivated by the central limit theorem for the distribution of the measured value could be approximated by the t-distribution with effective degrees of freedom obtained from the WS equation.

APPLICATION FOR THE CALCULATION OF THE VOLUME FRACTION OF SOLID

The equation that calculates the volumetric fraction of solids ε_s is derived from the equation:

$$I = I_0 e^{-\mu_L x} \quad \text{Beer-Lambert's Law.} \quad (7)$$

That relates the intensities I_0 and I_F , with and without absorber, with linear attenuation coefficient μ_L . The equation that relates the intensities I_V , I_F , the empty tube and flow conditions in the riser, the mass attenuation coefficient μ , and returns the average density along the trajectory of the gamma radiation, is:

$$\rho_m = \frac{1}{\mu D} \ln\left(\frac{I_V}{I_F}\right) \quad (8)$$

Then the equation that calculates the volumetric fraction of the solid phase is:

$$\varepsilon_s = \frac{1}{\mu \rho D} \log\left(\frac{I_V}{I_F}\right) \quad (9)$$

Where ρ is the density of the solid circulating in the riser.

We calculate the uncertainty in the model proposed by Equation (9) using Equation (3), then we can write the following equation for calculating the combined variance (ε_s).

$$u_c^2(\varepsilon_s) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial x_i} \right]^2 u_c^2(x_i) \quad (10)$$

Each term $u^2(x_i)$ corresponds to the variance x_i that is multiplied by $\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial x_i}$ squared. By applying the volume fraction of solids expressed by Equation (9), we must consider that the equations (7) to (10) to calculate the uncertainty are set to the normal distribution, and that the intensities I_V , I_F in Equation (9) are set to the Poisson distribution, since they are derived from nuclear radiation emission. The probability in the Poisson distribution for x , number of observations, is calculated by:

$$P(x) = \frac{\lambda^x \cdot e^{-\lambda}}{x!} \quad (11)$$

Where λ is the mean and standard deviation $\sigma = \sqrt{\lambda}$ that is, the variance is equal to the average. Considering a large number N of counts of radiation, the standard deviation is $\sigma = \sqrt{N}$, because a large mean value λ and large x , Equation (11) can be approximated by the normal distribution. Then, the average given can write

$$N \cong \bar{q} \cdot n = \sum_{k=1}^n q_k \cdot \quad (12)$$

Where the condition N may represent the average scores of radiation. And the intensity I is related to the number of counts by at time t .

3.1. Applications

This section presents the implementation results of the Monte Carlo method in MATLAB, according to the system described in the previous section.

3.1.1. Matlab program Incert1

The Incert1 program calculates the uncertainty (u_c) by applying in Equation (9) the volume fraction of the solid ε_s of the equation (8). The conditions $I_V = 2 \cdot 10^5$; I_F varying 190000 by 199000; while ε_s varying from 0.05 to 0.005. The probability density function obtained by MCM and the good agreement between the best estimates from GUM and MCM, but there are differences in the confidence intervals. Figure 1 shows intensity I_F versus ε_s . In this

graph the intensity I_F grows and ε_s decreases with this simulation; one might assume that sensitivity of the determination of ε_s depends only on the intensity.

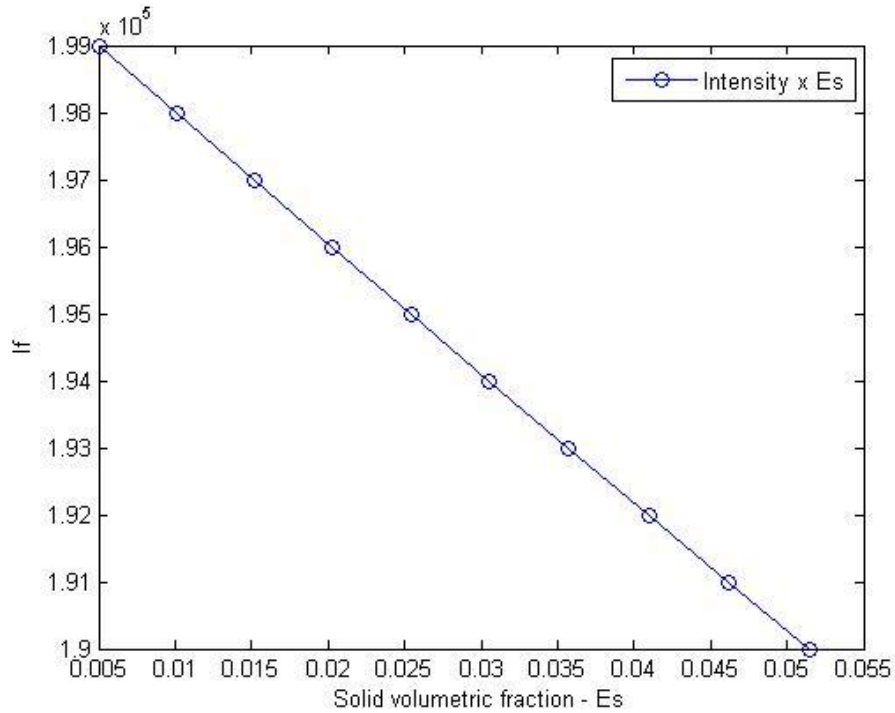


Figure 1: Incert1 - intensity vs volumetric fraction

Figure 2 shows the relative uncertainty calculated with Equation (10) versus ε_s . It shows that in the region where ε_s is less uncertainty is unreasonably high. In the Figure 2, one can also observe the relative error $(\sqrt{N}/N) \times 100$ is not significant and almost constant, slowly falling to the intensity in the opposite direction of relative uncertainty. Also, it is possible to observe the dependence of the uncertainty of the variables, that is, considering only the term I_v and I_F , in Equation (8).

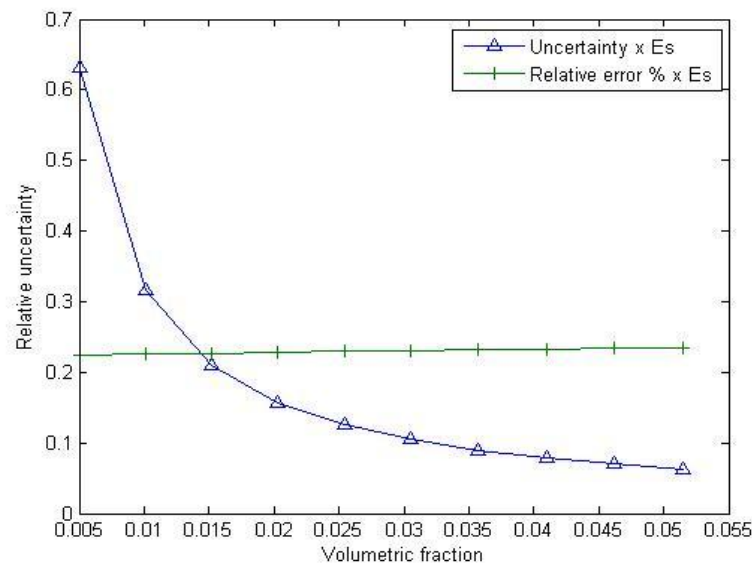


Figure 2: Incert1 – relative uncertainty $\times$ volumetric fraction

THE SUPPLEMENT 1 OF GUM (MONTE CARLO SIMULATION METHOD)

The Supplement Guide to the GUM [2] has recognized that for an increasing number of metrology problems the assumptions necessary for the application of the method outlined above do not apply. As a result, efforts have been made to introduce a more widely applicable methodology for evaluating uncertainties. This methodology can be used for validating uncertainties evaluated using the GUM approach as well as for evaluating them in cases where the approach does not apply.

4.1. Methodology

The methodology is based on the concept of propagation of distributions. The method outlined for propagation of distributions relies on Monte Carlo Simulation (MCS). MCS produces an approximation to the PDF of the output quantity from which a mean, standard uncertainty, and coverage intervals can be obtained [3]. A variation of this approach can be used to obtain something similar to sensitivity coefficients.

4.2. Monte Carlo Simulation

Monte Carlo Simulation (MCS) is based on approximating the PDF or distribution function of the output quantity by running repeated model trials with input values sampled randomly

from the joint PDF of the input quantities. The method is such that these distributions can be of a very general form so the requirement is only that it is always needed for uncertainty quantification. MCS is becoming increasingly popular for evaluation of uncertainties in discrete models due to its flexibility and generality [4]. Suppose that the model for the quantity of concern is $Y = f(X_1, X_2, \dots, X_n)$, where $X = \{X_i, i=1, 2, \dots, n\}$ are the uncertain input quantities and f could be any model, from a simple analytic relationship to a complicated model. The MCS method can be viewed as a four-step process:

1. Generate a sample vector of input quantity values x by sampling randomly from the joint of the X_i . This joint PDF will be the product of the individual PDFs if X_i are independent. Repeat this sampling M times to produce $x_1, x_2, \dots, x_M$.
2. Run the model M times to calculate $y_1=f(x_1), y_2=f(x_2), \dots, y_M=f(x_M)$.
3. Construct an approximation to the distribution function of Y from M values $y_1, y_2, \dots, y_M$.
4. Use the distribution function and the results to calculate any required statistical quantities.

4.3. Application to the Calculation of the Volume Fraction of Solids

In the following it is presented the use of the GUM and MCM techniques applied to the analysis of uncertainty in the model volume fraction of solids. Calculations conducted to evaluate the uncertainty in the model volume fraction of solids are described in Equation (9). The results are based on the procedure and the MATLAB program described in [5].

The program was implemented with the following configuration (for a steel riser with the these characteristics):

$D=16,4$ cm (internal diameter)

$\rho = 0,85$ g/cm³ (Density of catalyst)

$\mu_L = 0.0715$ cm²/g (Mass absorption coefficient of the catalyst).

$p = 0.95$ (Desired confidence level for the interval obtained for measuring).

$\text{tol} = 0.000000005 = 5.0000\text{e-}009$ (Tolerance)

Results:

The application of the developed technique is based on comparing the two methods for uncertainty assessment: the GUM method and Monte Carlo method. The methodology uses the MCM to check the validity of the method GUM applied to the model and taken as a basis

for comparing the construction of confidence intervals obtained with both methods, according to the tolerance required in the procedure.

Results obtained with the method GUM:

$$y = 0.0514626$$

$$u(y) = 1.57804e-007$$

$$U = 3.0930e-007$$

$$I(y) = [0.0514623, 0.0514629]$$

Results obtained with the MCM:

$$y = 0.0514626$$

$$u(y) = 1.578e-007$$

$$I(y) = [0.0514623, 0.0514629]$$

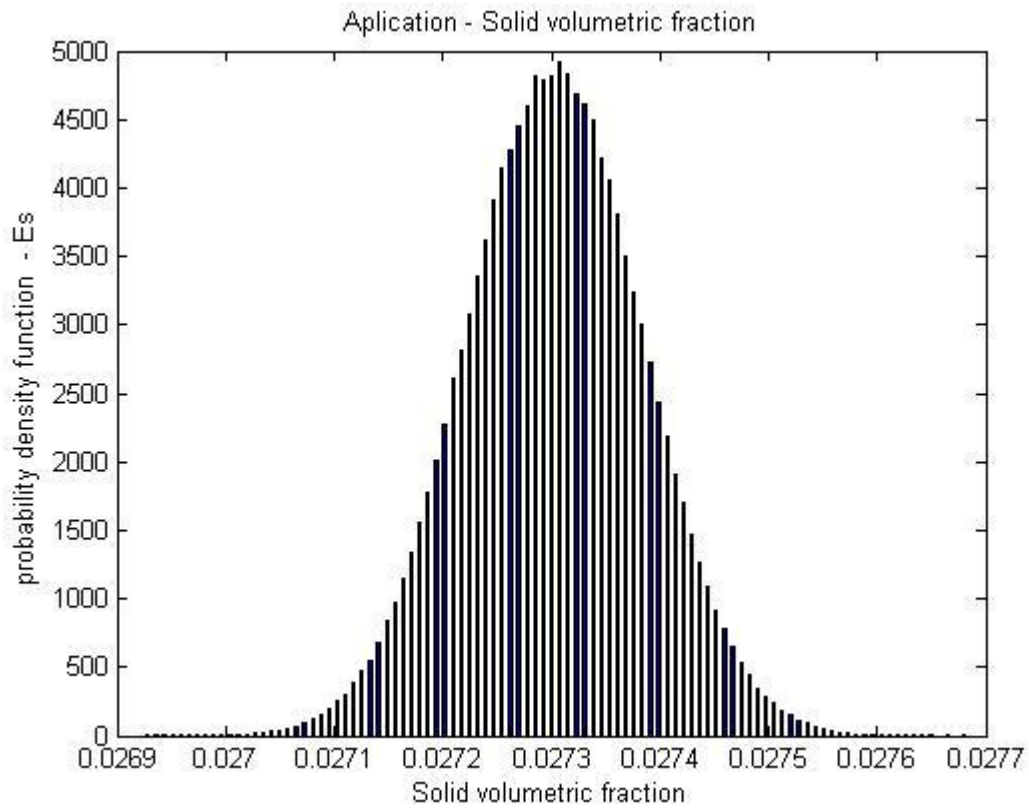


Figure 3: Simulation of the probability density function for the output quantity using GUM and MCM

CONTINUOUS MODELS

The GUM methodology should always be considered as an initial approach, since it is straightforward and well-established. In some cases it may be possible to produce a simplified version of a continuous model that can have the GUM methodology applied to it, to give a rough estimate of the uncertainty before proceeding with a more complex version of the model [6].

A number of common features of continuous models make the GUM methodology unsuitable:

- It is often very difficult to obtain the partial derivatives required for a continuous model;
- Frequently, the output quantity for a continuous model is the location and value of the maximum of some quantity. For instance, the peak stress of the maximum temperature. This type of result can produce an expression for the output quantity that is not differentiable, and so no partial derivatives can be obtained;
- Some continuous models do not depend on their input quantities in a straightforward manner. For instance, multiple solutions may exist if the model exhibits hysteresis. This means that the linearity requirement for the model and the Central Theorem is unlikely to apply.

5.1. Methods of Uncertainty Evaluation

The decision of which type of method to use for uncertainty evaluation is partly determined by the model complexity. The methods available are sampling, analytical and methods developed for particular applications according to [1].

5.2. Modeling Continuous Data.

Two adjacent edges of plate temperatures are maintained $g(x)$ and $h(y)$ where g and h are known functions defined by the x and y distances along the edges. The problem of data analysis is to determine the steady state temperature $t(x, y)$ at each point on the plate, as v coefficient of heat conduction material. The data analysis involves the solution of the heat equation, a partial differential equation subject to boundary conditions. The data is continuous in the sense that g and h are defined at every point of the edge, not a finite number of points. On the other hand, the numerical solution involves discretizing the equation to be solved [7]. For instance, consider one-dimensional heat transfer along a unit length of bar section with negligible. Suppose that one end of the rod is heat set at an inaccurate temperature and the other end loses heat at a rate inaccurate. The temperature profile satisfies:

$$\frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1$$

(13)

$$T(0) = T_0, \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=1} = Q$$

Where $T(0) = T_0$ and Q are independent inexact quantities, and λ is the (exactly known) thermal conductivity.

The analytical solution of the problem is $T = T_0 + x(Q/\lambda)$. Suppose that T_0 e Q have normal distribution with mean 0°C and 1 Wm^{-2} , respectively, and standard deviations 0.2°C and 0.1 Wm^{-2} , respectively.

S is the input quantities and T is the temperature at the middle of the bar, then $T^* = T_0 + Q/(2\lambda)$ and the GUM methodology can be applied:

Also, consider that: $T_0 \sim N(0, 0.04)$ and $Q \sim N(1, 0.01)$.

The steps in the methodology produce:

8. $\frac{\partial T^*}{\partial T_0} = 1, \quad \frac{\partial T^*}{\partial Q} = \frac{1}{2\lambda}$
9. Measurement result is $\bar{T}^* = \frac{1}{2\lambda}$
10. Sensitivity coefficients are 1 for T_0 and $1/(2\lambda)$ for Q .
11. Combined standard uncertainty associated with the measurement result is $u_c^2 = 1 \times 0.04 + 0.01/(4\lambda^2)$
12. The effective degrees of freedom ν is taken to be infinite since it is assumed that the distributions of T_0 and Q are known exactly.
13. The expanded uncertainty for 95 % confidence interval for the value of T^* is $U_c = 1.96 \times [0.04 + 0.0025/\lambda^2]^{1/2}$, a confidence interval for the value of the output quantity is $\left[\frac{1}{2\lambda} - U_c, \frac{1}{2\lambda} + U_c \right]$, and T^* will be taken to have a Gaussian distribution.

5.3. Analytical Method

The analytical methods are not so easy to understand or implement and in some cases they can only be applied to fairly simple problems. Nevertheless, they have still been applied to metrology problems successfully [1]. Some analytical methods are described and more details are given for Stochastic Differential Equations in order to promote their usage. A stochastic differential equation SDE can be thought of as an ordinary differential equation with a forcing term that is described by a random variable,[8]. For example, the velocity v of a particle in Brownian motion in terms of a differential equation of the form:

$$\frac{dv}{dt} = -\lambda v + f(t) \tag{14}$$

Where λ is a damping coefficient due to viscosity of the suspending medium and $f(t)$ is called a random force. Equation (14) is called a Langevin equation. One of the most common applications in metrology is the ability to accurately calculate the range ends.

The Diffusion Equation

$$u_t(x, t) = ku_{xx}(x, t) \quad (15)$$

The above equation it is the well known heat equation. When the source term is present, we have the following inhomogeneous equation:

$$u_t = ku_{xx} + q \quad (16)$$

Which can also describes the diffusion of a chemical, for example, a dye in a liquid. The analogue of Fourier's law of cooling is known as Fick's law of diffusion. Equation (16) also arises in the study of Brownian motion, and we can give a probabilistic interpretation to the solution of (16) [1].

The basic theory will include a Monte Carlo approach and some knowledge of Brownian motion prior to SDE computational implementation. The Monte Carlo method will use random number generation functions of the MATLAB software,[8]. The conditions for Brownian motion, or Wiener process, over a $[0, T]$, is a random variable $W(t)$ that depends continuously on $t \in [0, T]$ and satisfies the following conditions: $W(0) = 0$, with probability 1; and $W_j = W_{j-1} + dW_j$, $j=1, 2, \dots, N$.

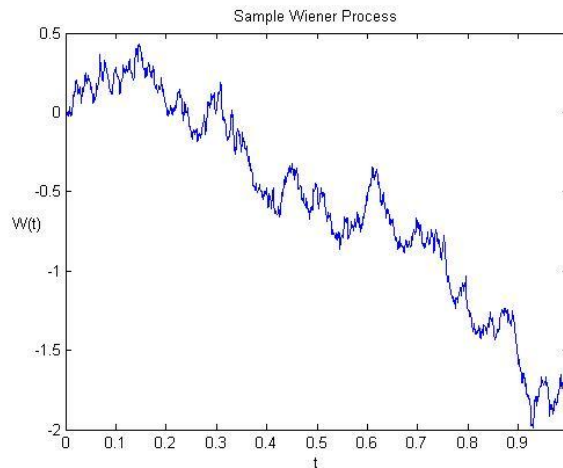


Figure 3: An example of a Wiener process

5.4. Stochastic Chain Rule.

The fundamental difference between stochastic and deterministic calculus is:

In deterministic case, if $dX/dt = f(X)$ then, for any smooth function V , the chain rule says that

$$\frac{dV(X(t))}{dt} = \frac{dV(X(t))}{dX} \frac{d(X(t))}{dt} = \frac{dV(X(t))}{dX} f(X(t)) \quad (17)$$

Now, suppose that satisfies the Itô SDE. What is the SDE analogue of (19) for $V(X)$. A reasonable guess is $dV = (dV/dX) dX$, so that

$$dV(X(t)) = \frac{dV(X(t))}{dX} (f(X(t))dt + g(X(t))dW(t)) \quad (18)$$

However, a rigorous analysis using Itô's result reveals that an extra term arises and the correct formulation is

$$dV(X(t)) = \frac{dV(X(t))}{dX} dX + \frac{1}{2} g(X(t))^2 \frac{d^2V(X(t))}{dX^2} dt \quad (19)$$

Which, by using Itô SDE , becomes

$$dV(X(t)) = (f(X(t)) \frac{dV(X(t))}{dX} + \frac{1}{2} g(X(t))^2 \frac{d^2V(X(t))}{dX^2}) dt + g(X(t)) \frac{dV(X(t))}{dX} dW(t) \quad (20)$$

To perform a numerical experiment, considering the SDE

$$dX(t) = (\alpha - X(t))dt + \beta \sqrt{X(t)} dW(t), \quad X(0) = X_0 \quad (21)$$

5.5. Uni-dimensional Fluid Dynamics

The basic equations of fluid dynamic behavior of a riser provide the mathematical model that consists of: (22) the equations of conservation of mass of the gas, (23) conservation of solid mass, (24) conservation of momentum of the mixture and (25) the volumetric fraction variation along the riser forming direct system [7]. These equations are presented as follows:

- Mass conservation equation of gas

$$\frac{dU_g}{dz} = -\frac{U_g}{\varepsilon_g} \left(\frac{d\varepsilon_g}{dz} \right) \quad (22)$$

- From the mass conservation equation of solid, obtained

$$\frac{dU_s}{dz} = -\frac{U_s}{1-\varepsilon_g} \left(\frac{d\varepsilon_g}{dz} \right) \quad (23)$$

- From the momentum conservation equation, obtained

$$\frac{dP}{dz} = \frac{d\varepsilon_g}{dz} (\rho_s U_s^2) - \frac{d\varepsilon_g}{dz} (\rho_g U_g^2) + f_w + g\rho_s - g\varepsilon_g \rho_s + g\varepsilon_g \rho_g \quad (24)$$

- From the volumetric fraction equation through the riser

$$\frac{d\varepsilon_g}{dz} = \frac{\varepsilon_g g}{U_s^2} \left(1 - \frac{\rho_g}{\rho_s} \right) \left(\frac{1 - \frac{U_s}{U_g}}{1 - S_\infty} \right)^2 - \frac{\varepsilon_g g}{U_s^2} \left(1 - \frac{\rho_g}{\rho_s} \right) \quad (25)$$

From the system of equations described above, in the program MATLAB it was obtained the results described in the Figure 5 below:

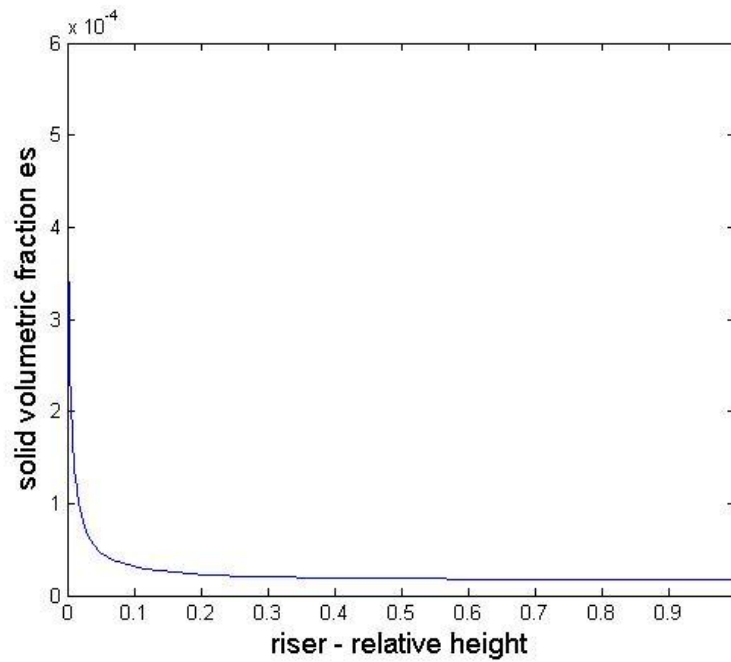


Figure 5: Solid volumetric fraction ε_s distribution along relative riser height

CONCLUSIONS

According to the MCM algorithm, applied GUM does not validate the method for evaluating the uncertainty in the model considered. That is, although the values obtained for the two methods are very close, it is recommended to apply the MCM to evaluate the uncertainty of the volume fraction of solids in the proposed model. It is observed that the values obtained in implementing the program match the values calculated algebraically without the aid of the computer. Model parameter uncertainty which can be modeled by normal probability

distributions do not necessarily lead to prediction for models nonlinear in these input parameter. The differences in the predictions of mean behavior, using the mean of the input model parameter and using the average of the Monte Carlo predictions, were very small for the examples presented. This is not always the case. For cases for which the input parameter uncertainties is not large, such as would be the case for carefully controlled validation experiments, the GUM methods can give good results, even for problems that are very nonlinear.

REFERENCES

1. ISO IEC 17025:1999 General Requirements for the Competence of Calibration and Testing Laboratories (1999) International Organization for Standardization, Geneva.
2. G J Lord, L Wright "Uncertainty Evaluation in Continuous Modelling", Report to the National Measurement System Policy Unit, Department of Trade and Industry (NPL Report CMSC, 2003).
3. GUM Suppl 1. Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement (GUM) – Supplement 1: numerical methods for the propagation of distributions. In accordance with the ISO/IEC Directives, Part 1, 2001, Clause A5, this draft is submitted to the ISO national bodies for approval. International Organization for Standardization, 2004.
4. Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement, BIPM, IEC, ISO, IUPAC, and OIML, ISBN 92-67-10188-9, Second Edition, 2003.
5. M. Solaguren-Beascoa F., J.M. A. Calderón, P.M.B. Diez, Implementation in MATLAB of the adaptive Monte Carlo method for the evaluation of measurement uncertainties, Springer-Verlag, 2008.
6. JCGM 100:2008, Evaluation of measurement data - Guide to the expression of uncertainty in measurement, Joint Committee for Guides in Metrology (JCGM/WG 1).
7. R Kacker and A Jones, On use of Bayesian statistics to make the Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement consistent, Metrologia 40 (2003) 235–248
8. Trevor Esward, Gabriel Lord, and Louise Wright , Model Validation in Continuous Modelling, NPL Report CMSC 29/03, September 2003.
9. T J Esward and L Wright, Deriving uncertainties when using simulation in Metrology, NPL REPORT DEM-ES-017, March 2007.