MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
Escola de Engenharia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais – PPGEM

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO EM MODELO FÍSICO DA ESTAÇÃO DE REFINO SECUNDÁRIO RH

Bayard Beling Morales

Dissertação para obtenção do título de Mestre em Engenharia

Porto Alegre
2008

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
Escola de Engenharia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais – PPGEM

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO EM MODELO FÍSICO DA ESTAÇÃO DE REFINO SECUNDÁRIO RH

Bayard Beling Morales
Físico

Trabalho realizado no Laboratório de Siderurgia do Centro de Tecnologia da Escola de Engenharia da UFRGS, dentro do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais – PPGEM, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Metalurgia Extrativa/Tecnologia Mineral

Porto Alegre
2008

Esta Dissertação foi julgada adequada para obtenção do Título de Mestre em Engenharia – área de concentração Metalurgia Extrativa / Tecnologia Mineral e aprovada em sua forma final, pelo orientador e pela Banca Examinadora do Curso de Pós-Graduação.

Orientador: Prof. Dr.-Ing. Antônio Cezar Faria Vilela

Banca Examinadora:

Profa. Dra. Edith Beatriz Camaño Schettini – IPH/UFRGS
Profa. Dra. Adriane Prisco Petry. – DEMEC/UFRGS
Prof. Dr. José Adilson de Castro – EEIMVR/UFF

Prof. Dr. Carlos Peres Bergmann
Coordenador do PPGEM

"If you hide your ignorance, no one will hit you and you´ll never learn."

Ray Bradbury

Farenheint 451

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS **7**
LISTA DE SÍMBOLOS **12**
RESUMO **14**
ABSTRACT **15**
1 INTRODUÇÃO **16**
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA **17**
2.1 BREVE HISTÓRICO DO REFINO SECUNDÁRIO RH 17
2.2 FUNCIONAMENTO DO RH 17
2.3 MODELAGEM FÍSICA 21
2.4 MODELAGEM MATEMÁTICA 22
2.5 MODELOS FÍSICOS VS. MODELOS MATEMÁTICOS 23
2.6 MODELAGEM DO RH 24
2.6.1 Modelos analíticos ou semi-empíricos do RH **24**
2.6.2 Modelos físicos do RH **26**
2.6.3 Modelos numéricos do RH **34**
2.6.3.1 Modelos monofásicos *35*
2.6.3.2 Escoamentos multifásicos *38*
2.6.3.2.1 MORFOLOGIA 40
2.6.3.2.2 MODELOS DE TURBULÊNCIA 41
2.6.3.2.3 TRANSFERÊNCIA DE QUANTIDADE DE MOVIMENTO 45
2.6.3.3 Modelos completos do RH *48*
2.6.3.3.1 MODELO PSEUDO-BIFÁSICO 48
2.6.3.3.2 MODELOS BIFÁSICOS 51
2.6.4 Conclusão **55**
3 METODOLOGIA **56**
3.1 INTRODUÇÃO 56
3.2 GERAÇÃO DE GEOMETRIA 56
3.3 CONSTRUÇÃO DA MALHA 58
3.4 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA DE CONTORNO 59
3.4.1 Hipóteses fundamentais **59**
3.4.2 Condições de contorno e propriedades físicas **59**
3.4.3 Modelagem das equações governantes **63**

3.4.3.1 Modelagem da turbulência *65*
3.4.3.2 Coeficiente de arrasto *66*
3.4.3.3 Forças de não-arrasto *68*
3.5 SOLUÇÃO NUMÉRICA 69
3.6 PÓS-PROCESSAMENTO 71
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO 73
4.1 ESCOAMENTO NA PANELA 73
4.2 TAXA DE CIRCULAÇÃO 74
4.2.1 Influência do modelo de turbulência 74
4.2.2 Influência do coeficiente de arrasto 80
4.2.3 Influência das forças de não-arrasto 82
4.2.3.1 Força de massa virtual *82*
4.2.3.2 Força de sustentação *83*
4.2.3.3 Força de dispersão turbulenta *84*
5 CONCLUSÕES 85
6 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS 87
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 88
APÊNDICE A 93

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Esquema ilustrativo de uma estação de refino secundário RH-KTB – corte transversal (Adaptado da fonte: RIZZO, 2006). 18
Figura 2 – Relação entre taxa de circulação e vazão de gás. Símbolos para diferentes diâmetros de perna. Símbolos denotam medidas em planta (Adaptado da fonte: SUMIDA et al., 1983). 20
Figura 3 – Distribuição de gás na perna de subida do RH, observando a superposição das plumas. Corte transversal. (Adaptado da fonte: PARK et al., 1998) 20
Figura 4 – Comparação entre dados da literatura e previsões da equação (1) para: a) modelos físicos e b) equipamento industrial (Adaptado da fonte: KUWABARA et al., 1988). 25
Figura 5 – Comparação entre os resultados numéricos, da equação de Kuwabara e dados experimentais (Adaptado da fonte: AHRENHOLD; PLUSCHKELL, 1998). 26
Figura 6 – Ilustração dos experimentos com três níveis de imersão das pernas (Adaptado da fonte: SESHADRI e COSTA, 1986). 27
Figura 7 – Taxa de circulação em função da vazão de gás para os três níveis hidrostáticos (Adaptado da fonte: SESHADRI; COSTA; 1986). 28
Figura 8 – a) Posição dos tubos de Pitot na perna de descida, vista do fundo do vaso; b) perfis de velocidade para diferentes níveis de líquido no vaso: I – 20 mm; II – 40 mm; III – 60 mm; IV – 80 mm. (Adaptado da fonte: HANNA et al., 1994) 29
Figura 9 – Taxa de circulação em função de: a) vazão de gás, para diferentes diâmetros de pernas; b) profundidade do nível de injeção (vazão de gás fixa em 200 Nl/min); c) número de injetores (vazão de gás fixa em 200 Nl/Min). (Adaptado da fonte: HANNA et al., 1994). 29
Figura 10 – Teor de carbono após refino na estação RH utilizando: a) seis injetores, pernas com diâmetro de 500 mm; b) dez injetores, pernas com diâmetro de 500 mm; c) dez injetores, pernas com diâmetro de 550 mm. (Adaptado da fonte: HANNA et al., 1994). 30
Figura 11 – visualização do escoamento na panela do modelo físico: a) sobre o plano que passa sobre o centro das pernas; b) sobre plano normal ao anterior. A perna de descida encontra-se à esquerda na figura 11a. (Adaptado da fonte: WEI et al., 2006). 31
Figura 12 – a) Taxa de circulação em função da vazão de gás para quatro diâmetros de injetor; b) constante cinética da reação de dessorção de CO_2 em função da vazão de gás. (Adaptado da fonte: NASCIMENTO et al., 2007) 32

Figura 13 – Ocupação de gás na perna de subida, com vazão de gás de 300Nl/min, para diâmetro de bico injetor de: a) 1 mm; b) 1,5 mm; c) 2,8 mm. As regiões mais escuras apresentam maior concentração de gás. (Adaptado da fonte: NASCIMENTO et al., 2007)...32
Figura 14 – Configuração da injeção de gás no modelo físico. (Adaptado da fonte: SESHADRI et al., 2006) 33
Figura 15 – Comparação entre as configurações sem e com injeção na panela: a) taxa de circulação em função da vazão de gás na perna de subida; b) parâmetro cinético da reação (KA/2.303V) em função da taxa de circulação. (Adaptado da fonte: SESHADRI et al., 2006). 33
Figura 16 – Evolução da simulação numérica do RH. 35
Figura 17 – resultado numérico do escoamento na panela de 150 toneladas, com taxa de circulação de 36 t/min: a) linhas de corrente; b) campo de velocidade. (Adaptado da fonte: NAKANISHI et al., 1975). 36
Figura 18 – Campo de velocidades na panela sobre plano que passa pelo centro das pernas (plano 1) e plano perpendicular (plano 2) para velocidades de entrada de 1 m/s (a e b) e 0,5 m/s (c e d). (Adaptado da fonte: TSUJINO et al., 1989)....37
Figura 19 – Diagrama dos pontos-chave na descrição dos escoamentos dispersos líquido-gás. 40
Figura 20 – Regime de formato de bolhas, conforme número de Reynolds, Eötvös e Morton. (Adaptado da fonte: CLIFT et al., 1978)....46
Figura 21 –a) Taxa de circulação e velocidade média na perna de descida: comparação entre simulação e modelo físico; b) Taxa de circulação: simulação para unidade industrial. (Adaptado da fonte: PARK et al., 2000). 49
Figura 22 – Vista superior do: a) RH com duas pernas e b) RH com três pernas de subida e uma de descida. (Adaptado da fonte: LI e TSUKIHASHI, 2000). 50
Figura 23 – Taxa de circulação em função da vazão de gás, para sistema com duas e multi pernas. (Adapatado da fonte: LI e TSUKIHASHI, 2000). 50
Figura 24 – Resultado da simulação numérica: fração volumétrica de gás na perna de subida, plano central paralelo ao eixo e dois planos transversais. a) modelo físico; b) equipamento industrial. (Adaptado da fonte: WEI e HU, 2005). 52
Figura 25 – Taxa de circulação em função da vazão de gás no modelo físico. Medidas e simulação, para diâmetros de pernas iguais (60 mm) e com perna de descida de 70 mm. (Adaptado da fonte: WEI e HU, 2005) 52

Figura 26 – a) mapa de fração volumétrica de gás sobre plano de simetria; b) detalhe na região inferior do vaso (topo das pernas), com vetores de velocidade (Adaptado da fonte: KISHAN e DASH, 2006). 53
Figura 27 – Taxa de circulação em função da vazão de gás simulada numericamente e obtida através da equação de balanço proposta por Seshadri e Costa (1986) (Adaptado da fonte: KISHAN e DASH, 2006). 54
Figura 28 – a) Taxa de circulação em função da vazão de gás; b) Comparação entre a distribuição de gás observada experimentalmente e a simulada. (Adaptado da fonte: MORALES et al., 2008) 55
Figura 29 – Etapas da metodologia. 56
Figura 30 – a) foto do modelo físico; b) geometria inteira do modelo físico; c) porção do modelo considerada na simulação numérica. 57
Figura 31 – a) malha inteira de 230 mil nós; b) detalhe da perna de subida; c) seção transversal da malha da perna de subida. 59
Figura 32 – Condições de contorno e posição dos injetores. 60
Figura 33 – Formato esperado das bolhas (região amarela). 62
Figura 34 – Posição dos injetores de ar sobre a seção transversal da perna de subida. 62
Figura 35 – Modelos utilizados na solução do escoamento. 64
Figura 36 – Oscilações típicas observadas na taxa de circulação durante o processo de solução numérica. 70
Figura 37 – Localização dos planos de visualização do escoamento. 71
Figura 38 – Perfil de velocidade sobre o plano de simetria (S) na região da panela, com vazão de 300l/min. 73
Figura 39 – Taxa de circulação em função de vazão de gás. Resultados numéricos (k-ε e k-ω), da equação (1) e do experimento de Nascimento et. al (2007). Simulação numérica com coeficiente de arrasto de Grace e sem forças de não-arrasto. 74
Figura 40 – Distribuição de gás na perna de subida (plano B) para os modelos de turbulência k-ε e k-ω, com vazões de 50l/min, 150l/min, 300l/min e 450 l/min. 75
Figura 41 – Ocupação de gás na perna de subida: fotos do modelo físico e simulação numérica, para vazões de 50 l/min, 300 l/min e 500 l/min. 76
Figura 42 – Vetores de velocidade da fase líquida no plano A para as vazões de 250 l/min, 300 l/min e 350 l/min; comparativo entre os dois modelos de turbulência. 77
Figura 44 – Viscosidade turbulenta da água na perna de subida (plano A), vazão de 350 l/min: a) modelo k-ε; b) modelo k-ω. 79

Figura 45 – Taxa de circulação em função da vazão de gás para os coeficientes de arrasto de Ishii-Zuber, Grace e do experimento. Modelo de turbulência k-ε, sem forças de não-arrasto. 80
Figura 46 – Vetores de velocidade da fase líquida na perna de subida (plano A): a) coeficiente de arrasto Ishii-Zuber, vazão de 250 l/min; b) coeficiente de arrasto Grace, vazão de 350 l/min. 81
Figura 47 – Coeficiente de arrasto (C_D) na perna de subida (plano A): a) coeficiente de arrasto Ishii-Zuber, vazão de 250 l/min; b) coeficiente de arrasto Grace, vazão de 350 l/min..... 81
Figura 49 – Taxa de circulação em função da vazão de gás, sem a presença da força de sustentação e com três diferentes coeficientes (Cl). Modelo de turbulência k-ε, coeficiente de arrasto Grace. 83
Figura 50 – Taxa de circulação em função da vazão de gás, com e sem a presença da força de dispersão turbulenta. Modelo de turbulência k-ε, coeficiente de arrasto Grace. 84
Figura 51 – Fotos do vaso do modelo físico, com vazão de gás de 500 l/min, em diversos instantes de tempo – a água foi colorida com permanganato de potássio. 94
Figura 52 – Taxa de circulação em função da vazão de gás para as quatro malhas analisadas. 96
Figura 53 – Fração volumétrica de ar no plano B. Vazão de gás de 300 l/min. 97

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Números adimensionais utilizados na determinação do regime de formato. 46
Tabela 2 – Dimensões da geometria utilizada na simulação numérica. 58
Tabela 3 – Condições de contorno. 60
Tabela 4 – Propriedades físicas dos fluidos simulados. 60
Tabela 5 – Parâmetros e números adimensionais relativos ao regime de formato do modelo físico do RH. 61
Tabela 6 – Combinações dos modelos analisadas 64
Tabela 7 – Coeficientes utilizados para cada força de não-arrasto. 69
Tabela 8 – Localizações dos planos de análise e variáveis observadas. 72
Tabela 9 – Número de nós das malhas utilizadas. 93
Tabela 10 – Modelagem matemática utilizada na análise de independência de malha. 94
Tabela 11 – Condições de escoamento utilizadas e resultados da comparação entre formulação transiente e estacionária. 95

LISTA DE SÍMBOLOS

Q	Taxa de circulação
K	Constante da equação de Kuwabara
G	Vazão de gás de arrasto
D	Diâmetro das pernas
P_1	Pressão na altura de injeção de gás
P_2	Pressão na atmosfera do vaso
i, j, k	Componentes nas direções x, y, z (índice)
u_i	Velocidade na direção i
U_i	Componente média da velocidade na direção i
u'_i	Componente turbulenta da velocidade na direção i
τ_{ij}	Tensões de Reynolds
ρ	Densidade
x_i	Posição na direção i
μ_t	Viscosidade dinâmica turbulenta
μ_{ef}	Viscosidade dinâmica efetiva
μ_l	Viscosidade dinâmica laminar do líquido
Re_b	Número de Reynolds da bolha
U_{rel}	Velocidade relativa entre as fases
ρ_l	Densidade do líquido
d_b	Diâmetro da bolha
Eo	Número de Eötvös
σ	Tensão interfacial
ρ_g	Densidade do gás
g	Módulo da aceleração da gravidade
M	Número de Morton
α_g	Fração volumétrica de gás (fase dispersa)
C_D	Coeficiente de arrasto
U_g	Velocidade da fase gasosa
A_{inj}	Área da seção transversal do injetor de gás
U_{il}	Componente média da velocidade do líquido na direção i
U_{ig}	Componente média da velocidade do gás na direção i
α_l	Fração volumétrica de líquido
α_g	Fração volumétrica de gás
ν_{ef}	Viscosidade cinemática efetiva
F_{int}	Força de interface
S	Termo fonte de massa da equação da continuidade
p	Pressão

k	Energia cinética de turbulência
$\sigma_k, \sigma_{\varepsilon,} C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}$	Constantes do modelo de turbulência k-ε
P_k	Termo de produção de turbulência por cisalhamento
ε	Dissipação turbulenta por unidade de massa
$\sigma_k^*, \beta', \sigma_\omega, \gamma, \beta$	Constantes do modelo de turbulência k-ω
ω	Taxa de dissipação turbulenta por unidade de volume
F_D	Força de arrasto
F_{ND}	Força de não-arrasto
U_{term}	Velocidade terminal da bolha
J	Parâmetro auxiliar 1 – modelo de Grace
H	Parâmetro auxiliar 2 – modelo de Grace
μ_{ref}	Viscosidade dinâmica de referência
Re_m	Número de Reynolds da mistura
E	Função auxiliar 1 – modelo de Ishii-Zuber
f	Função auxiliar 2 – modelo de Ishii-Zuber
μ_m	Viscosidade dinâmica da mistura
μ_*	Viscosidade dinâmica corrigida
F_{MV}	Força de massa virtual
C_{VM}	Coeficiente da força de massa virtual
F_S	Força de sustentação
U_l	Velocidade da fase líquida
C_S	Coeficiente da força de sustentação
F_{DT}	Força de dispersão turbulenta
C_{DT}	Coeficiente da força de dispersão turbulenta
Sc_t	Número de Schmidt turbulento
ν_t	Viscosidade cinemática turbulenta

RESUMO

Este trabalho possui como objetivo a realização da simulação numérica do escoamento no interior de um modelo físico da estação de refino secundário Rurhstal-Heraeus (RH). Busca-se estabelecer uma metodologia que, utilizando as ferramentas da fluidodinâmica computacional, reproduza as principais características de tal escoamento, especialmente a taxa de circulação e a distribuição de gás na perna de subida. A literatura sobre a modelagem do RH, tanto experimental quanto matemática, é revisada e comentada, com destaque para os principais desafios na simulação dos escoamentos multifásicos. Na simulação do escoamento, foi avaliada a influência de três aspectos da modelagem numérica: modelo de turbulência (modelos k-ε e k-ω), coeficiente de arrastos (modelos de Ishii-Zuber e Grace) e forças de não-arrasto (massa virtual, sustentação e dispersão turbulenta). O escoamento é solucionado para diversas combinações de tais modelos e seus resultados são comparados com dados da literatura. Dessa comparação concluiu-se que a solução numérica é altamente dependente do modelo de turbulência – foram verificadas grandes alterações na distribuição de gás na perna de subida. O emprego do modelo k-ε mostrou proporcionou maior concordância com o experimento. Em contraste, as alterações na solução numérica em função de diferenças no coeficiente de arrasto e presença de forças de não-arrasto foram pouco significativas. Em todos os casos simulados, a taxa de circulação calculada numericamente diferiu dos dados experimentais. Observou-se o fenômeno de saturação de tal taxa, mas, no entanto, acredita-se que o mecanismo visto na solução numérica e no experimental possuam naturezas distintas.

ABSTRACT

The purpose of the present work is to evaluate the numerical simulation of the flow in a physical model of secondary refining station Rurhstal-Heraeus (RH). Employing computational fluid dynamics tools, a set of methods is sought in order to reproduce the main features of such flow, focusing mainly the circulation rate and the gas holdup in the upleg. Both physical and mathematical modeling literature are reviewed and commented, highlighting the main challenges of multiphase flow modeling. The effects of three aspects of numerical simulation are weighted: turbulence modeling (k-ε and k-ω models), drag force coefficient (Ishii-Zuber and Grace models) and non-drag forces (virtual mass, lift and turbulent dispersion). The flow is solved using several combinations of those models and the results are subjected to comparison with experimental data. From this comparison, it is verified a major dependence between the numerical solution and the turbulence model adopted – remarkable differences were observed on the gas holdup in the upleg. The employment of k-ε model shown better agreement with experimental data. The influence of different drag coefficients and action of non-drag forces was by far less important. In every numerically solved flow condition, the circulation rate was in disagreement with the experimental data. The saturation behavior has been observed in the numerical solution, although in a diverse fashion of the physical model.

1 INTRODUÇÃO

Desde que o aço assumiu a posição de liga metálica mais importante para a humanidade procura-se otimizar sua produção. Cada aplicação do aço, bem como os processos de transformação aos quais é submetido, requer características químicas, térmicas e mecânicas específicas. Na obtenção de uma liga que atenda a essas demandas, é fundamental a etapa de ajuste de composição química e homogeneização. Essa etapa, que ocorre após a realização do refino primário (oxidante) no convertedor ou forno elétrico, é conhecida pelo nome de refino secundário.

O rendimento de uma estação de refino secundário está intimamente ligado com o escoamento do aço líquido no seu interior. Isso se deve ao acoplamento existente entre as reações químicas e os campos de velocidade, pressão etc. Portanto, o conhecimento destes é subsídio à operação ótima do equipamento.

O estudo fluidodinâmico acerca do escoamento no interior dos equipamentos siderúrgicos é fortemente embaraçado por dificuldades técnicas na experimentação em planta. Condições de altas temperaturas, periculosidade e mesmo inadequação das ferramentas de medição dificultam esse tipo de trabalho. Todavia, a necessidade de entender o funcionamento das estações de refino incentivou a pesquisa, optando-se pela construção de modelos físicos e modelos matemáticos.

Por meio desses modelos é possível obter valiosa informação qualitativa e quantitativa acerca do escoamento na estação de refino. Entretanto, o fato de não reproduzirem perfeitamente a condição real – devido a aproximações inerentes à sua construção – conduz à necessidade de confrontar dados de diversas fontes para a validação das conclusões. Assim, destaca-se o caráter complementar das técnicas de modelagem.

Nesta dissertação é realizada a simulação numérica de um modelo físico da estação de refino secundário RH utilizando ferramentas de fluidodinâmica computacional. Pretende-se expor a metodologia, discutindo a escolha e aplicabilidade dos modelos matemáticos empregados e seus parâmetros. Por fim, realiza-se a comparação dos resultados com dados experimentais, a fim de avaliar a conformidade das previsões.

Considera-se o presente trabalho como etapa preliminar para a simulação numérica do escoamento em uma unidade industrial.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 BREVE HISTÓRICO DO REFINO SECUNDÁRIO RH

A introdução dos processos de desgaseificação a vácuo na década de 50 permitiu a redução de custos associados à produção de aços com baixa concentração de gases, em especial o hidrogênio. A partir da década de 1980, observou-se grande crescimento no uso desse tipo de refino. Hoje, um grande número de usinas siderúrgicas possui estações de desgaseificação a vácuo (FRUEHAN, 1990). Dentre elas encontra-se as que utilizam o processo Rurhstal-Heraeus (RH).

A estação do tipo RH é uma estação de refino secundário que visa, principalmente, diminuir a concentração de gases dissolvidos no aço líquido. Isso ocorre através da circulação do aço entre a panela e um reservatório secundário. Ele foi concebido com o intuito principal de remover hidrogênio mas, com o passar do tempo, o desenvolvimento tecnológico do equipamento acabou flexibilizando sua utilização. Hoje, essa estação figura como peça fundamental na descarburação, visando à obtenção de aços de ultra-baixo carbono (com concentrações menores do que 20 ppm) (UETANI; BESSHO, 2001).

2.2 FUNCIONAMENTO DO RH

O princípio operacional do processo RH é a exposição do aço líquido a uma atmosfera rarefeita, através de sua circulação entre a panela e uma câmara de vácuo. O aço entra na câmara, onde acontece a maior parte das reações de refino, e volta para a panela com menor concentração de gases dissolvidos - de maneira que todo o banho passe pela câmara diversas vezes durante o tratamento.

A estação, ilustrada na figura 1, é composta da panela e o RH. Este é constituído pela junção dos *snorkels* (pernas), que são imersos no banho, e do vaso (câmara de vácuo), na extremidade superior das pernas.

Ao chegar à estação, a panela é elevada até que as pernas rompam a camada de escória e fiquem imersas no banho. Para que o aço da panela chegue até o vaso, este é evacuado até

pressões da ordem de 1 mbar, o que causa a elevação do nível do aço na perna, atingindo o vaso. A circulação de aço entre panela e vaso se estabelece por meio da injeção de gás, chamado gás de arrasto, em uma das pernas na direção do centro desta, perpendicularmente à parede. A diferença de densidade entre o gás e o aço provoca a aceleração das bolhas de gás para cima. Ao subirem até a superfície do banho no vaso, as bolhas arrastam o líquido, provocando o movimento do aço.

Além de promover a movimentação do aço, o gás injetado desempenha papel fundamental nas reações de refino. Sendo estas, na maior parte, heterogêneas (que ocorrem com a transferência de massa entre duas fases), as bolhas presentes no seio do banho proporcionam sítios favoráveis à remoção dos elementos dissolvidos.

A circulação do aço no vaso e seu retorno à panela ocorrem diversas vezes durante o tratamento, promovendo a homogenização química e térmica do banho. A lança de oxigênio e a lança KTB (*Kawasaki Top* Blowing) permitem a descarburação e a pós-combustão do CO, respectivamente. Também pode ser realizada a adição de ligas e a desoxidação do aço líquido.

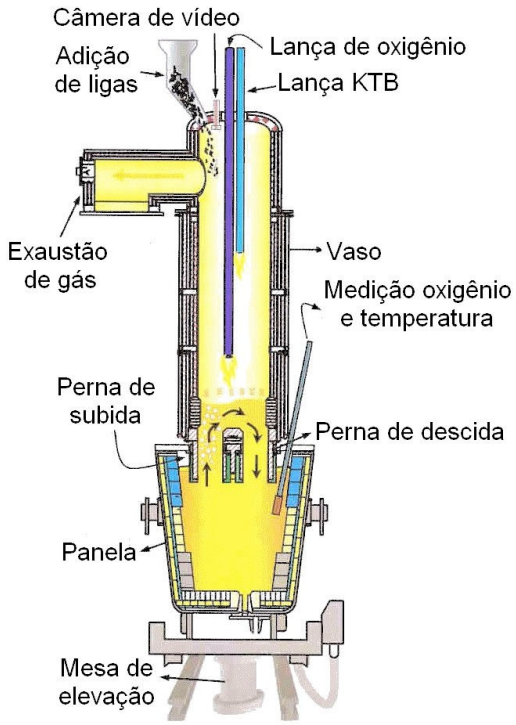

Figura 1 – Esquema ilustrativo de uma estação de refino secundário RH-KTB – corte transversal (Adaptado da fonte: RIZZO, 2006).

A quantidade de aço que passa pelo vaso em um intervalo de tempo é um relevante parâmetro no funcionamento da estação. Tal quantidade, denominada *taxa de circulação*,

constitui-se na mais importante parâmetro deste tipo de estação de refino.

Taxa de circulação

Está bem estabelecida a relevância da taxa de circulação no funcionamento da estação RH. Verifica-se, no desenvolvimento dos modelos teóricos que prevêem as taxas de remoção de hidrogênio, nitrogênio e carbono do banho metálico, que ela deve ser considerada no cálculo da taxa da reação de refino (SUMIDA et al., 1983; FRUEHAN, 1998; WEI; YU, 2002). De forma geral, observa-se que o aumento na taxa de circulação aumenta a eficiência do RH.

Diversos fatores influenciam a taxa de circulação, mas não há consenso sobre a relação entre eles e essa taxa. Dentre os parâmetros operacionais, a vazão de gás de arrasto é vista como principal fator para alterar a taxa de circulação. Intuitivamente, imagina-se que o aumento da vazão de gás acarreta o acréscimo da taxa de circulação – visto que o empuxo do gás é a fonte de movimento do sistema. Entretanto, diversos autores relatam que a partir de certa vazão de gás a taxa de circulação para de aumentar e, eventualmente, pode até cair (SUMIDA et al., 1983; HANNA et al., 1994; AHRENHOLD; PLUSCHKELL, 1998; PARK et al., 2000). Esse fenômeno é conhecido como *saturação* da taxa de circulação.

Resultados da pesquisa em condições industriais de Sumida et al. (1983), que exemplificam a saturação, podem ser vistos na figura 2. Foi observada, também, a dependência da taxa de circulação em relação ao diâmetro das pernas.

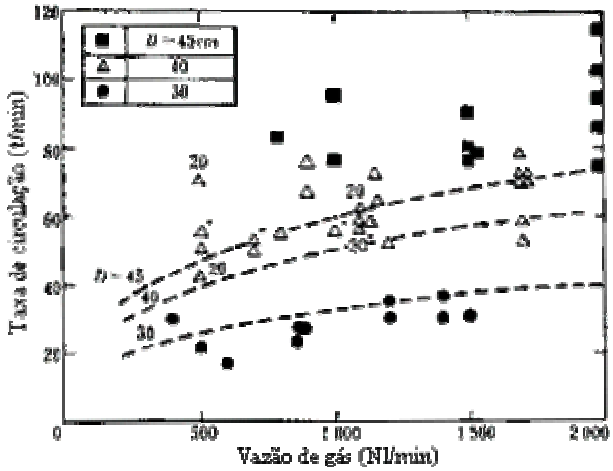

Figura 2 – Relação entre taxa de circulação e vazão de gás. Símbolos para diferentes diâmetros de perna. Símbolos denotam medidas em planta (Adaptado da fonte: SUMIDA et al., 1983).

O mecanismo da saturação ainda não é plenamente conhecido. Acredita-se que ele possua relação com a distribuição de gás na perna de subida. Park et al. (1998), ao realizarem simulações numéricas, propuseram explicar a saturação através da superposição das trajetórias (pluma) do gás na perna de subida – como ilustra a figura 3.

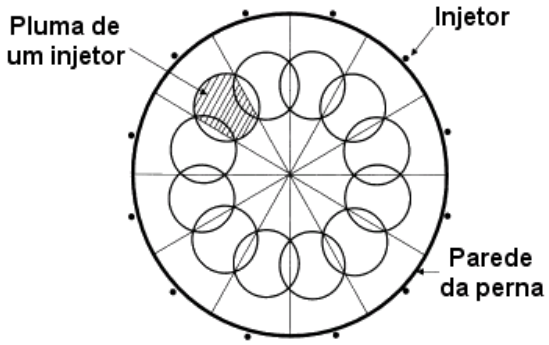

Figura 3 – Distribuição de gás na perna de subida do RH, observando a superposição das plumas. Corte transversal. (Adaptado da fonte: PARK et al., 1998)

À medida que o volume da pluma de um injetor aumenta, ocorre a superposição, causando a diminuição do volume total da pluma (soma dos volumes individuais de cada pluma menos o volume superposto). Ao diminuir a área de contato entre gás e líquido, a força que age sobre o fluido diminuiria mesmo com maior vazão de gás.

Outra interpretação foi proposta por Wei e Yu (2005), também ao realizarem simulações numéricas. Considerou-se que, em vazões de gás mais elevadas, a penetração de gás na

direção do centro da perna de subida aumenta ligeiramente, mas a coalescência das bolhas de gás ocorreria de forma muito intensa nessas vazões, diminuindo a área de contato entre gás e metal e, por conseqüência, a transferência de quantidade de movimento entre as fases.

A determinação do ponto de saturação e de uma vazão de gás ótima é fundamental, pois possibilitaria economizar insumos e aumentar a eficiência de uso do equipamento.

A medição da taxa de circulação em unidades industriais pode ser realizada através da injeção de traçadores radioativos no banho metálico, como realizado por Nakanishi et al. (1975). Nesse procedimento, é injetada uma quantidade determinada de material radioativo sob forma de um pulso único, medindo-se na perna de descida a concentração de material através de um cintilógrafo. Partindo desses dados, é construída uma curva de concentração em função de tempo, por meio da qual é possível calcular a taxa de circulação.

Contudo, os autores desse estudo ressaltam dificuldades encontradas no experimento: a limitação na quantidade de material radioativo injetado, por motivo de segurança, incorre em um sinal fraco medido no cintilógrafo.

De forma similar, Park et al. (2000) realizaram medidas em planta, através da injeção de material radioativo e da determinação do tempo de mistura. Com isso (e com auxílio de uma correlação entre a taxa de circulação e o tempo de mistura), foi determinada a taxa de circulação para três vazões de gás.

Conclui-se, portanto, que a determinação da taxa de circulação por medição direta em planta é tecnicamente difícil. Dessa forma, a pesquisa foi orientada para métodos que pudessem prevê-la sem interferir no processo de refino. Nesse contexto são encaixados os modelos físicos e os modelos matemáticos.

2.3 MODELAGEM FÍSICA

A modelagem física é uma ferramenta largamente utilizada em todas as áreas da física e engenharia, não sendo exceção a metalurgia. Uma definição foi proposta por Sedov (SEDOV, 1993):

> *Modelagem [física] é a substituição da pesquisa de um fenômeno particular na natureza pelo estudo de um fenômeno análogo em um modelo de maior ou menor escala, geralmente sob condições de laboratório controladas.*

A questão fundamental na modelagem física é estabelecer a analogia entre o experimento

e o fenômeno que é objeto do estudo. Isso ocorre através do estudo da similaridade dos sistemas.

Segundo Szekely (1979), no estudo de mecânica de fluidos, as classes mais importantes de similaridade são a geométrica, a cinemática, a térmica e a dinâmica. Ao estudar um escoamento isotérmico, as similaridades geométrica e dinâmica representam papel preponderante.

A similaridade entre dois sistemas pode ser mensurada através da comparação de seus números adimensionais. Esses números podem ser encontrados ao adimensionalizar as equações que relacionam variáveis do sistema ou através da aplicação do teorema π de Buckingham (SZEKELY, 1979). Cada um deles é construído por relações entre variáveis do escoamento e parâmetros físicos dos fluidos. Como exemplo mais conhecido tem-se o número de Reynolds, obtido da razão entre forças inerciais e forças viscosas.

Na prática da simulação física para siderurgia é muito difícil obter a completa similaridade entre protótipo e modelo. Ao conceber um modelo físico é, portanto, necessário privilegiar alguns critérios de similaridades em detrimento de outros.

A simulação física do escoamento de aço é realizada, na maioria das vezes, utilizando água. Além de grande disponibilidade e fácil manuseio, a água possui viscosidade cinemática muito próxima à do aço.

2.4 MODELAGEM MATEMÁTICA

Segundo Szekely (1988), um modelo matemático é um conjunto de equações, algébricas e/ou diferenciais, que pode ser usado para representar e predizer determinado fenômeno. A palavra modelo, ao invés de lei, enfatiza a sua natureza de aproximação e não descrição exata.

Uma categoria especialmente importante desse tipo de modelagem é a fluidodinâmica computacional (CFD, *Computational Fluid Dynamics*). Ela consiste, essencialmente, em implementar e resolver, com auxílio do computador, problemas de contorno que descrevam o escoamento de fluidos através de equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia.

Esse tipo de abordagem é especialmente útil para a siderurgia, em vista das grandes dificuldades práticas na medição de variáveis do escoamento em equipamentos siderúrgicos. Como pode ser visto ainda no mesmo artigo de Szekely (1987), a relevância dessa ferramenta

para o setor siderúrgico era amplamente reconhecida já na década de 1980.

É possível sintetizar a metodologia da CFD através de etapas que estão, mesmo que implicitamente, presentes em todos os trabalhos que a utilizam:

1. Geração de geometria: limitação do domínio em que estarão presentes os fluidos, de acordo com o escoamento estudado.
2. Discretização do domínio: a implementação computacional de um problema matemático requer a transformação dos domínios contínuos em domínios discretos – processo conhecido como discretização da geometria ou geração da malha. Nessa etapa, é definido um conjunto finito de pontos distribuídos na geometria, nos quais as funções a serem calculadas estarão definidas.
3. Construção do problema de contorno: escolha das equações a solucionar e constantes utilizadas, definição das condições de contorno e iniciais. Nessa etapa é determinado, por exemplo, o modelo de turbulência utilizado.
4. Processamento: solução numérica do sistema de equações algébricas decorrente da discretização das equações diferenciais que descrevem o problema e da aplicação das condições iniciais e de contorno.
5. Pós-processamento: visualização de variáveis do escoamento (como velocidade, pressão etc.) a partir dos dados gerados na etapa anterior.

A metodologia da CFD pode ser implementada através da construção de programas em qualquer linguagem de programação. Entretanto, grande parte dos estudos com aplicação industrial utiliza programas comerciais, em vista da versatilidade e praticidade destes.

2.5 MODELOS FÍSICOS VS. MODELOS MATEMÁTICOS

Como visto nas seções anteriores, as modelagens físicas e matemáticas são essencialmente diferentes na suas metodologias. O uso conjunto das duas técnicas, todavia, permite preencher lacunas decorrentes das limitações inerentes a cada uma delas e corroborar seus resultados. Ao reunir dados oriundos dessas duas fontes com dados de planta, a compreensão de um fenômeno é amplamente favorecida (SZEKELY, 1979).

Conforme será visto mais adiante, os modelos físicos são muitas vezes utilizados para *validar* os resultados de um modelo matemático. Embora o objetivo último do modelo matemático seja prever resultados de planta, ao comparar seus resultados com os obtidos de

um modelo físico a metodologia utilizada no modelo matemático pode ser avaliada. Entende-se que, se o modelo físico possui similaridade com o processo industrial, a reprodução de seus resultados pelo modelo matemático aponta para a correta elaboração deste.

De forma similar, a modelagem matemática pode funcionar como um estudo prévio a alterações nos modelos físicos, prevendo efeitos de modificações no próprio experimento.

Ressalta-se, portanto, o caráter complementar entre os dois tipos de abordagem.

2.6 MODELAGEM DO RH

A modelagem da estação RH busca determinar características do funcionamento do processo – como taxa de circulação, tempo de mistura, taxa de remoção de carbono etc – em função de parâmetros geométricos e de operação (vazão de gás, pressão no vaso etc).

Desde que o processo foi concebido, diversas metodologias foram utilizadas com esta finalidade. É possível classificar os estudos em três vertentes: modelos analíticos ou semi-empíricos, modelos físicos e modelos numéricos.

2.6.1 Modelos analíticos ou semi-empíricos do RH

Os modelos analíticos (ou semi-empíricos) formam uma classe dentro dos modelos matemáticos. Partindo de considerações teóricas e observações empíricas, são obtidas equações que descrevam as variáveis de interesse.

Diversos modelos dessa classe foram propostos para descrever o processo de descarburação no RH ou mensurar os efeitos de parâmetros operacionais sobre ele (YAMAGUCHI et al., 1992; INOUE et al., 1992; TAKAHASHI et al., 1995; WEI; YU, 2002). O foco principal destes trabalhos foi estabelecer relações entre a taxa de descarburação e características do escoamento – como a taxa de circulação ou a área interfacial gás-líquido. Nestes trabalhos, entretanto, a determinação dos últimos não é realizada. Assim, tais modelos ficam na dependência da estimativa destes valores através de outros métodos.

Modelos semi-empíricos com a finalidade de calcular a taxa de circulação em função de parâmetros operacionais e geométricos também foram concebidos. O mais célebre dentre eles

é o desenvolvido por Kuwabara et al. (1988). Nesse artigo, é apresentada (em uma dedução sintética) uma equação (1) que relaciona a taxa de circulação (Q) à vazão de gás (G, em Nl/min), ao diâmetro das pernas (D, em metros) e à razão entre pressão no vaso (P_1) e no ponto de injeção de gás (P_2). Esta equação, conhecida como equação de Kuwabara, é dada por:

$$Q = KG^{1/3} D^{4/3} \left(\ln\left\{ \frac{P_1}{P_2} \right\} \right)^{1/3} \tag{1}$$

A popularidade conquistada por este modelo justifica-se em face da forte validação, tanto para modelos físicos como em planta, como pode ser visto na figura 4a e 4b, respectivamente.

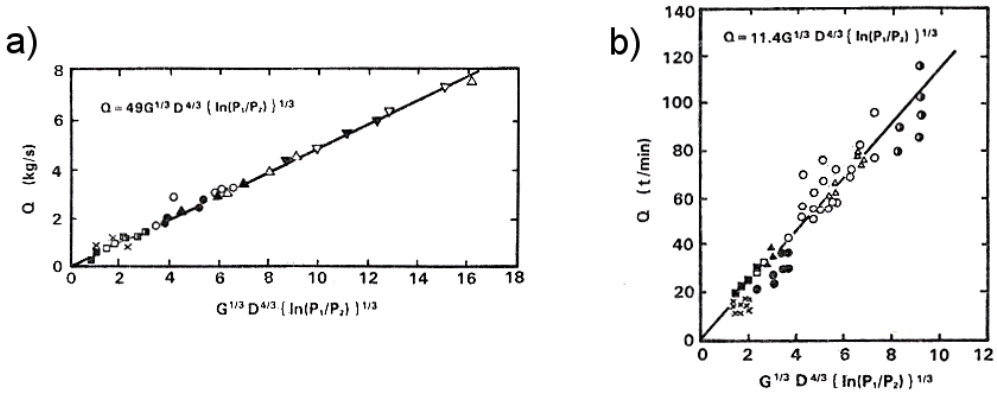

Figura 4 – Comparação entre dados da literatura e previsões da equação (1) para: a) modelos físicos e b) equipamento industrial (Adaptado da fonte: KUWABARA et al., 1988).

Não obstante sua validação, a equação de Kuwabara possui um importante limitante na sua utilização. É visível que a equação (1) não contempla nenhum mecanismo de saturação – o valor da taxa de circulação cresce monotonamente. Logo, ao relacionar vazão de gás e taxa de circulação de forma não realista, é impossível determinar a vazão de gás crítica.

Em 1998, Ahrenhold e Pluschkell (1998) propuseram uma alternativa para o cálculo da taxa de circulação. Partindo do teorema de Bernoulli, os autores desenvolveram um sistema de cinco equações algébricas que pode ser solucionado numericamente. Os resultados são ilustrados na figura 5.

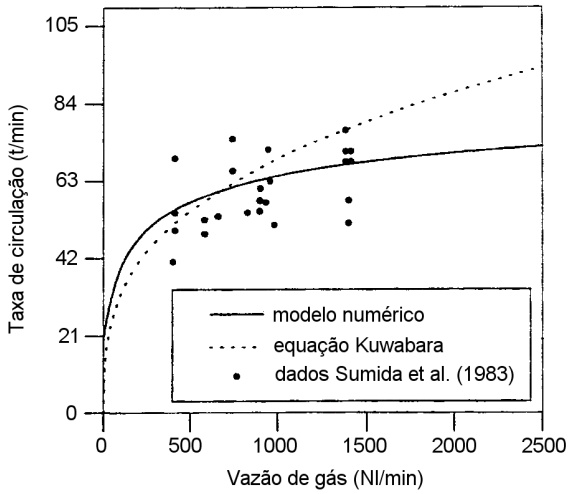

Figura 5 – Comparação entre os resultados numéricos, da equação de Kuwabara e dados experimentais (Adaptado da fonte: AHRENHOLD; PLUSCHKELL, 1998).

Como visto na figura 5, o crescimento da taxa de circulação em função da vazão de gás previsto pelo modelo de Ahrenhold e Pluschkell é muito menor do que o previsto pela equação (1). Apesar disso, deve-se ressaltar que sua validação é bastante precária – só há a comparação com os dados de Sumida et al. (1983) para um diâmetro de perna. Ainda, devido a pouca praticidade de implementação do sistema de equações, tal estudo não teve grande influência nas pesquisas em RH: não foram encontrados outros artigos que comparassem seus resultados com os desse modelo.

Outras equações empíricas foram propostas no contexto de modelagem física (SESHADRI; COSTA, 1986; WEI et al., 2006), mas possuindo aplicabilidade restrita aos equipamentos estudados. Conclui-se, então, que não foi encontrada uma equação simples e confiável que possa ser aplicada em um equipamento RH qualquer.

2.6.2 Modelos físicos do RH

A modelagem física do RH tem se mostrado uma abordagem muito prolífica, principalmente ao fornecer informações qualitativas a respeito do escoamento na estação. Todos os estudos até então reportados empregam métodos bastante similares: substituição do sistema aço-gás pelo sistema água-ar, escoamento isotérmico e regime estacionário. O fator de escala geométrica usual é ao redor de 1:5. Os trabalhos aqui apresentados são comentados

com foco principal em seus resultados fluidodinâmicos, em vista do contexto.

Em 1975, Nakanishi et al., em trabalho que também contemplou simulação numérica e medições em planta, realizaram uma das primeiras modelagens físicas da estação RH. Foram realizadas medições de taxa de circulação, acompanhando a trajetória de pedaços de serragem com fotos seqüenciais, e observações do comportamento da dispersão de um traçador colorido na água. Embora os resultados quantitativos de tal trabalho não possuam grande importância para as pesquisas posteriores, as descrições do equipamento e a metodologia da modelagem física contidas no artigo conferem-lhe relevância.

Seshadri e Costa (1986) realizaram testes em modelo físico para analisar a influência do nível de imersão das pernas no líquido contido na panela. Foi fixada a altura da coluna hidrostática e testados três níveis de imersão, conforme ilustra a figura 6.

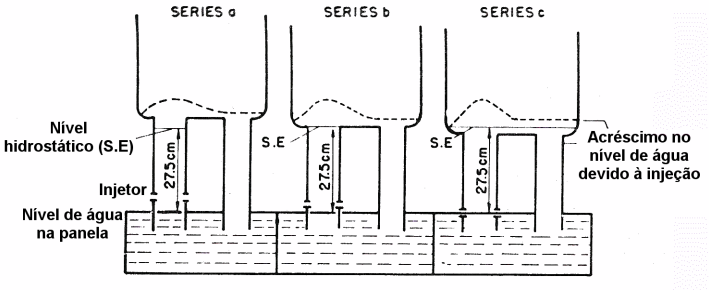

Figura 6 – Ilustração dos experimentos com três níveis de imersão das pernas (Adaptado da fonte: SESHADRI e COSTA, 1986).

A medição da taxa de circulação foi realizada através do método da condutividade elétrica – que viria a tornar-se bastante popular na modelagem física de RH. Ele consiste em injetar um material que se dissolva na água e altere sua condutividade de forma proporcional à sua concentração. Ao medir sua concentração na perna de descida, é possível calcular a taxa de circulação.

Os resultados desse experimento são ilustrados na figura 7.

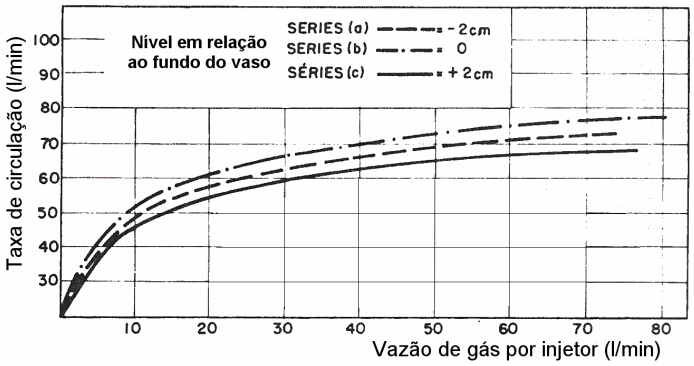

Figura 7 – Taxa de circulação em função da vazão de gás para os três níveis hidrostáticos (Adaptado da fonte: SESHADRI; COSTA; 1986).

Observa-se que a maior taxa de circulação foi obtida na série b, na qual o nível hidrostático inicial (antes da injeção de gás) é igual ao comprimento da perna. Segundo os autores, isso se deve ao fato de que essa configuração maximiza o caminho percorrido pelo gás dentro da perna de subida. Esse trecho seria responsável pela maior parte da transferência de quantidade de movimento do gás para o líquido. Dessa forma, conclui-se que o ponto de injeção de gás deve ser colocado à maior distância possível do fundo do vaso.

Hanna et al. (1994) publicaram um amplo estudo sobre a relação dos parâmetros geométricos do RH com a taxa de circulação. Além disso, observaram o impacto de alterações em uma estação industrial no processo de descarburação. Nesse estudo, utilizou-se um método alternativo para medir a taxa de circulação. Foram distribuídos tubos de Pitot sobre o diâmetro da perna de descida, próximos à sua extremidade inferior (figura 8a). A taxa de circulação foi calculada considerando a média das velocidades medidas. Verificou-se que o perfil de velocidade na perna de descida não é uniforme, podendo apresentar assimetrias, como as ilustradas na figura 8b.

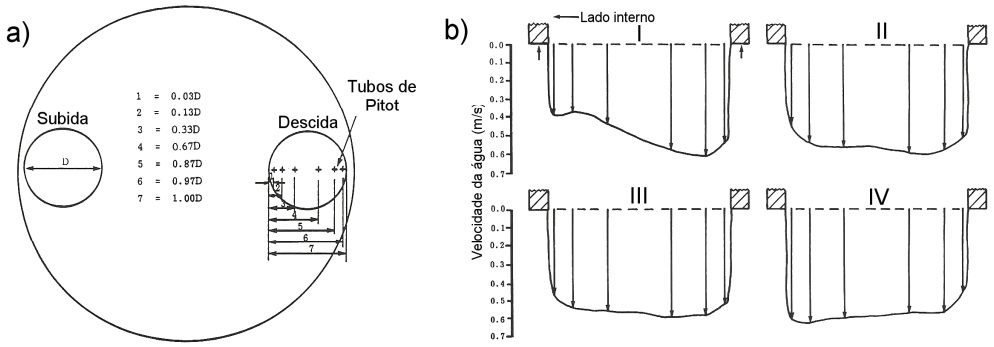

Figura 8 – a) Posição dos tubos de Pitot na perna de descida, vista do fundo do vaso; b) perfis de velocidade para diferentes níveis de líquido no vaso: I – 20 mm; II – 40 mm; III – 60 mm; IV – 80 mm. (Adaptado da fonte: HANNA et al., 1994)

Foi observado o aumento da taxa de circulação com o aumento do diâmetro das pernas, assim como a dependência entre essa taxa e o número de injetores, bem como em relação à profundidade destes na perna de subida. Esses resultados são ilustrados na figura 9.

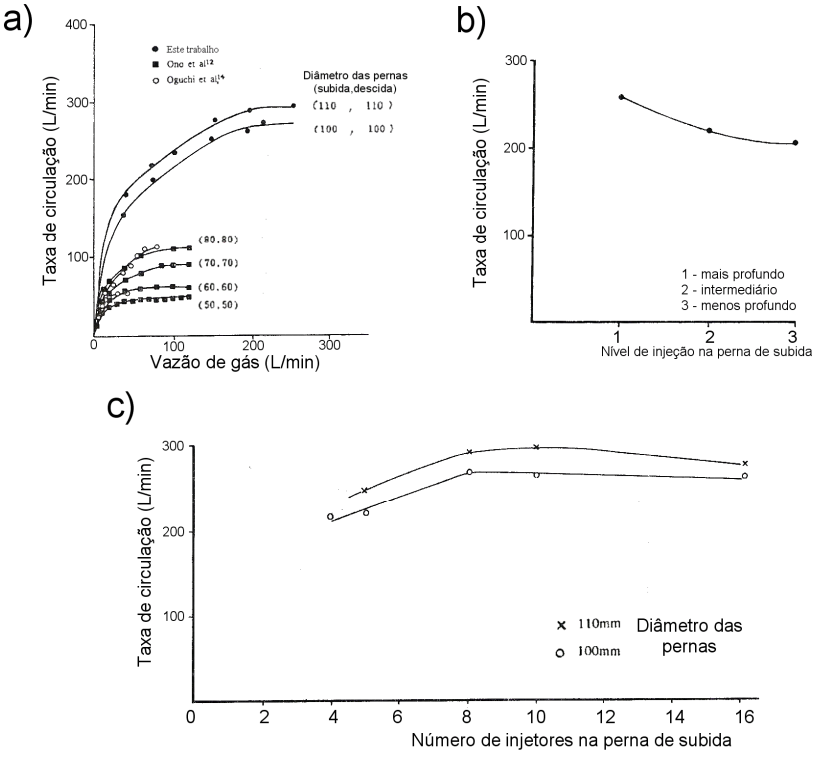

Figura 9 – Taxa de circulação em função de: a) vazão de gás, para diferentes diâmetros de pernas; b) profundidade do nível de injeção (vazão de gás fixa em 200 Nl/min); c) número de injetores (vazão de gás fixa em 200 Nl/Min). (Adaptado da fonte: HANNA et al., 1994).

Partindo dos resultados da modelagem física, foram propostas alterações em uma unidade industrial, como alargamento das pernas e aumento do número de injetores. Tais modificações produziram efeitos bastante positivos no processo de descarburação, como pode ser visto pela redução do teor médio de carbono atingido ao término do tratamento (figura 10).

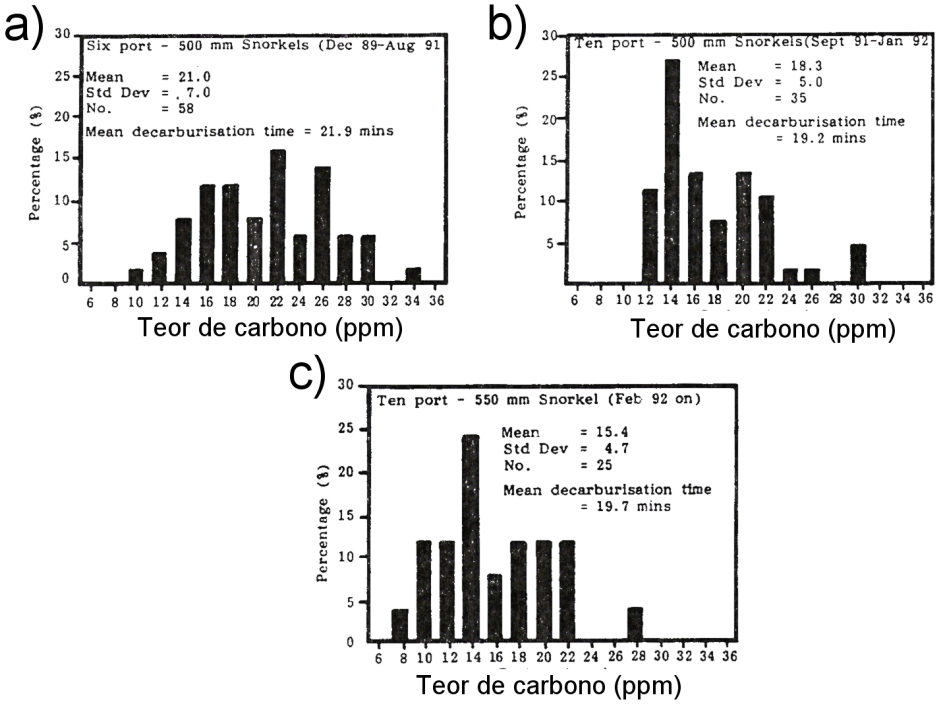

Figura 10 – Teor de carbono após refino na estação RH utilizando: a) seis injetores, pernas com diâmetro de 500 mm; b) dez injetores, pernas com diâmetro de 500 mm; c) dez injetores, pernas com diâmetro de 550 mm. (Adaptado da fonte: HANNA et al., 1994).

Em 2006, Wei *et. al.* conduziram experimentos em um modelo físico a fim de averiguar a influência do diâmetro dos bicos injetores no escoamento, em especial sobre a taxa de circulação. Apesar do foco neste aspecto, um dos resultados mais interessantes obtidos foi a caracterização qualitativa do escoamento na panela, através de sua visualização.

Este procedimento foi realizado colocando partículas de poliestireno (isopor não-expandido) imersas em água e incidindo um laser sobre o escoamento. Fotos dessa visualização são vista na figura 11. Imagens semelhantes foram obtidas para várias vazões de gás.

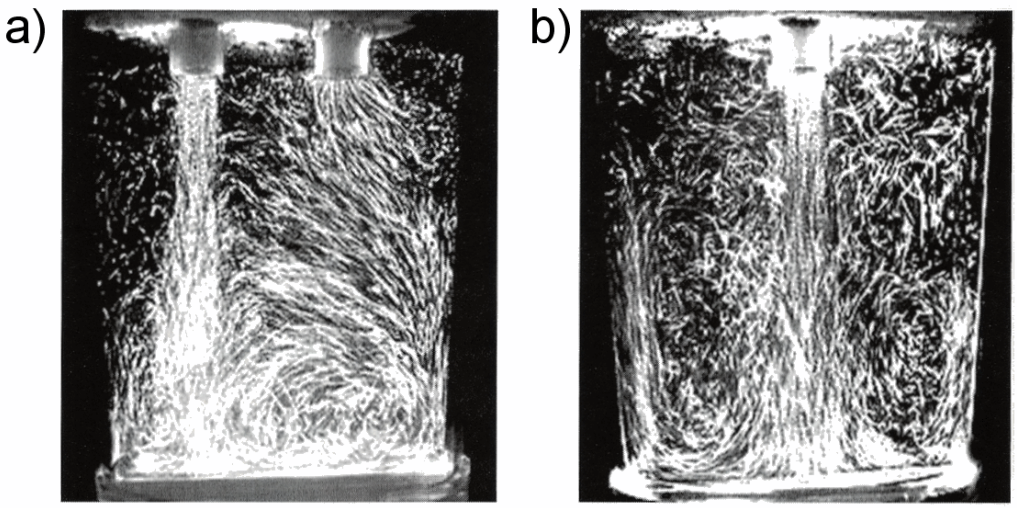

Figura 11 – visualização do escoamento na panela do modelo físico: a) sobre o plano que passa sobre o centro das pernas; b) sobre plano normal ao anterior. A perna de descida encontra-se à esquerda na figura 11a. (Adaptado da fonte: WEI et al., 2006).

Na figura 11a é observado um fluxo descendente fortemente concentrado oriundo da perna de descida, que atinge o fundo do reservatório. Um vórtice principal é formado próximo ao fundo da panela, bem como um pequeno vórtice à esquerda do fluxo descendente. Na figura 11b, fica clara a formação de vórtices no plano perpendicular ao da figura anterior, demonstrando claramente a natureza tridimensional do escoamento dentro da panela. É possível ver, em ambas as figuras, que a zona próxima à superfície livre da panela possui uma movimentação muito menor do que as regiões próximas ao fundo.

Foi relatado, também, o aumento da taxa de circulação com aumento do diâmetro dos bicos injetores, assim como do diâmetro das pernas e da profundidade de injeção de gás.

Além de informação acerca dos aspectos fluidodinâmicos do equipamento, através da modelagem física é possível mensurar o efeito das configurações de injeção de gás sobre a cinética das reações de refino (em especial, a descarburação). Com essa finalidade reações similares são induzidas no modelo físico, como a dessorção de CO_2 de uma solução alcalina (SESHADRI et al., 2006; NEVES, 2008).

Utilizando tal método, Nascimento et al. (2007) buscaram observar a influência do diâmetro dos bicos injetores e da vazão de gás na taxa de circulação e na cinética da descarburação. Apesar das taxas de circulação mais elevadas obtidas com bicos de injeção maiores, os maiores coeficientes de transferência de massa foram obtidos para uma configuração intermediária (figuras 12a e 12b).

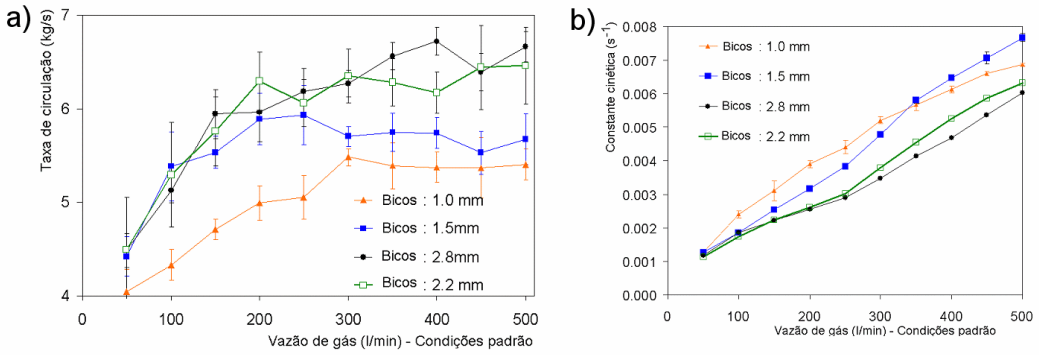

Figura 12 – a) Taxa de circulação em função da vazão de gás para quatro diâmetros de injetor; b) constante cinética da reação de dessorção de CO_2 em função da vazão de gás. (Adaptado da fonte: NASCIMENTO et al., 2007)

Outro resultado apresentado no mesmo artigo foi a visualização da ocupação de gás na perna de subida, observando-a por baixo do fundo da panela de acrílico. Ela é exemplificada na figura 13.

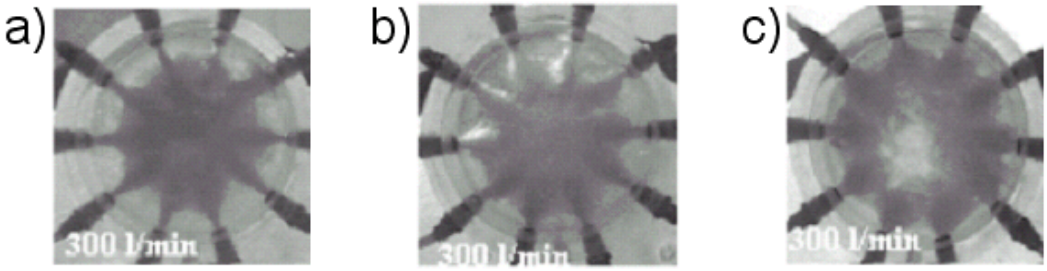

Figura 13 – Ocupação de gás na perna de subida, com vazão de gás de 300Nl/min, para diâmetro de bico injetor de: a) 1 mm; b) 1,5 mm; c) 2,8 mm. As regiões mais escuras apresentam maior concentração de gás. (Adaptado da fonte: NASCIMENTO et al., 2007)

Vê-se, do ilustrado na figura 13, que o gás penetra tanto mais para o centro da perna quanto menor for o bico injetor. Tal comportamento é óbvio, visto que a velocidade na direção do centro da perna é maior para injetores mais estreitos. Como discutido anteriormente, é possível que ele seja o responsável pela saturação da taxa de circulação.

Vários autores vêm buscando formas diferentes de realizar a injeção de gás no RH. Essa tendência se fundamenta na tentativa de aumentar a área interfacial gás-líquido disponível para as reações de refino e para a remoção de inclusões sem, no entanto, prejudicar a taxa de circulação.

Seshadri et al. (2006) propuseram uma destas configurações alternativas de injeção, realizando-a através de um plugue poroso situado no fundo da panela, como visto na figura 14.

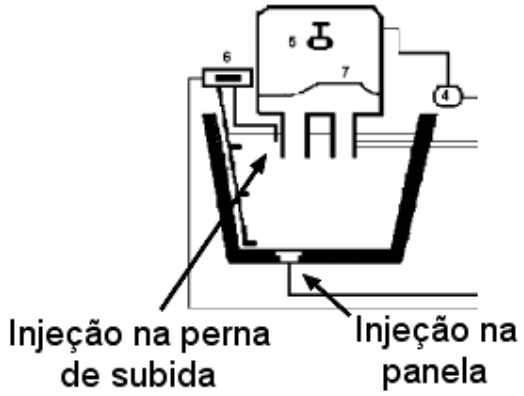

Figura 14 – Configuração da injeção de gás no modelo físico. (Adaptado da fonte: SESHADRI et al., 2006)

Os autores deste estudo compararam a taxa de circulação (figura 15a) e um parâmetro cinético da reação (figura 15b) sem injeção de gás na panela e com duas diferentes vazões na panela. É visível o incremento na taxa de circulação com a injeção na panela, em especial quando a vazão de gás na perna é baixa. A medição do parâmetro cinético da reação, todavia, demonstrou que a injeção pelo plugue não a favorece de maneira apreciável – as configurações com injeção na panela precisaram atingir taxas de circulações mais altas para equiparar o valor desse parâmetro ao caso sem injeção no plugue.

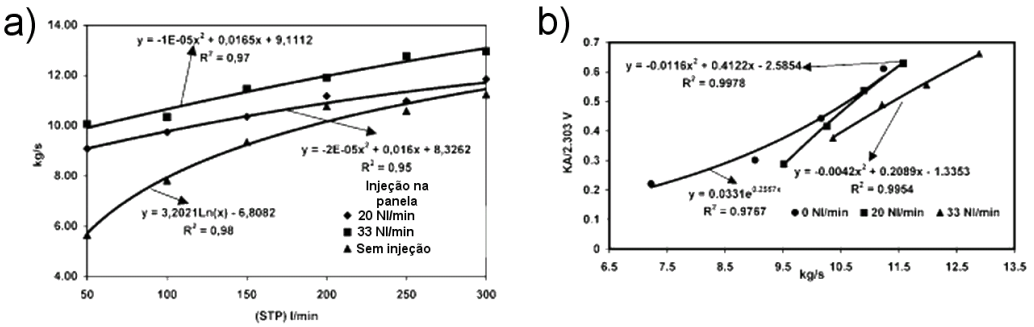

Figura 15 – Comparação entre as configurações sem e com injeção na panela: a) taxa de circulação em função da vazão de gás na perna de subida; b) parâmetro cinético da reação (KA/2.303V) em função da taxa de circulação. (Adaptado da fonte: SESHADRI et al., 2006).

Ainda no mesmo artigo, é relatado o aumento da taxa de circulação e o favorecimento da cinética da dessorção com o alargamento da perna de descida. A principal informação obtida nesse trabalho foi sobre o pequeno aumento na eficiência do processo de refino proporcionado pela injeção de gás na panela, não obstante o acréscimo da taxa de circulação.

Neves (2008) propôs outra configuração de injeção de gás fora da perna: foram

colocados bicos de injeção de gás ao redor da junção da perna de subida com o fundo do vaso, direcionados para cima. A vazão constante de 500 Nl/min foi distribuída entre os injetores da perna de subida e do vaso. Do ponto de vista da taxa de circulação, não foram encontrados benefícios no uso da injeção de gás no vaso. Recorrendo à reação de dessorção de CO_2 anteriormente comentada, também se verificou pouco impacto sobre a cinética da reação.

Em vista do grande volume e relevo de resultados apresentados fica evidenciada a importância da modelagem física para otimização do processo RH. Não obstante as limitações inerentes ao método, as informações oriundas deste tipo de abordagem compõem uma fonte comprovadamente útil de dados para modelos matemáticos e para a indústria. É possível, por fim, prever que os trabalhos de simulação física continuem a prosperar com vigor nos próximos anos.

2.6.3 Modelos numéricos do RH

A simulação numérica do escoamento de aço em equipamentos siderúrgicos já possui uma longa história – no caso do RH, os primeiros trabalhos surgiram na década de 1970. Apesar do relativo longo tempo desde o seu advento e do imenso aumento na capacidade computacional disponível desde então, a evolução das simulações numéricas voltadas para o RH andou de forma mais lenta do que os estudos sobre outras estações de refino, em particular quando comparada com as focadas no fenômeno de agitação da panela.

Essa defasagem se explica em parte pelo menor número de estações RH e em parte pelo próprio mecanismo físico de funcionamento, que impôs dificuldades à pesquisa teórica da estação.

A evolução da simulação numérica do RH é ilustrada na figura 16, onde cada caixa representa uma inovação na abordagem ao problema.

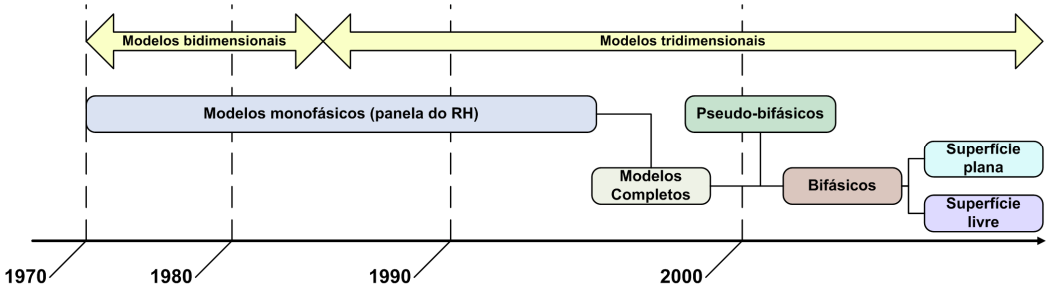

Figura 16 – Evolução da simulação numérica do RH.

Embora a figura 16 apresente "categorias" de abordagens, em algumas delas há poucos exemplos, quando não somente um. Isso demonstra claramente a escassez de estudos.

2.6.3.1 Modelos monofásicos

Os modelos monofásicos (modelos da panela do RH) foram os primeiros a ser propostos. Sua característica fundamental é resolver o escoamento somente na região da panela, desprezando o que ocorre nas pernas e no vaso.

Nesse tipo de modelo, os perfis de velocidade na perna de descida (entrada de aço) e perna de subida (saída de aço) devem ser introduzidos como condições de contorno. Ao realizar isso a taxa de circulação também fica pré-determinada.

A fixação dessas condições gera, no mínimo, duas fontes de erro. Primeiramente, o perfil de velocidade na saída da perna de descida pode ser não-uniforme, como observado por Hanna et. al. (1994) através de modelagem experimental (ver figura 8). Tais perfis de velocidade podem afetar os fenômenos de mistura que ocorrem dentro da panela. Adicionalmente, é preciso garantir que a taxa de circulação utilizada na simulação numérica seja obtida de fonte confiável – medida em planta, modelo físico ou calculada através de correlação. Se existe imprecisão na fonte, a simulação fica comprometida. Um exemplo disso seria a utilização da equação de Kuwabara (equação 1) em vazões para as quais sua previsão falha.

Apesar das limitações, esse tipo de modelagem dominou amplamente o ramo até meados da década de 1990 – tanto pelo valor de seus resultados quanto pela falta de alternativas viáveis. Ainda é possível reportar o seu uso recente (AJMANI et al., 2004).

Uma das primeiras soluções numéricas do RH apresentadas foi a de Nakanishi et al.

(1975), já anteriormente citado pelas medidas industriais e experimentais. Nesse estudo, os autores utilizaram um domínio bidimensional, composto pelo plano que passa pelo centro das pernas. A velocidade de entrada de metal foi estimada com base nas medições da taxa de circulação realizadas em uma unidade industrial. Foram solucionadas as equações de conservação de quantidade de movimento e massa, além do transporte de um traçador.

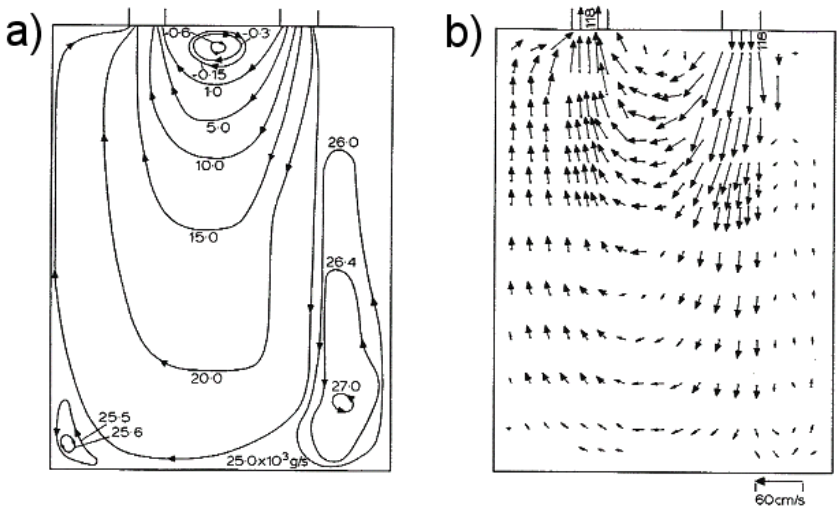

Figura 17 – resultado numérico do escoamento na panela de 150 toneladas, com taxa de circulação de 36 t/min: a) linhas de corrente; b) campo de velocidade. (Adaptado da fonte: NAKANISHI et al., 1975).

Na figura 17, é visível que o fluxo de metal oriundo da perna de descida apresenta a tendência de se direcionar para a perna de subida tão logo entra na panela. Tal fenômeno foi chamado de "escoamento em curto-circuito" pelos autores. Como discutido no artigo, esse comportamento deve indicar que a modelagem numérica realizada não é representativa do escoamento real. Tal conclusão se deve ao fato de que, se assim ocorresse na realidade, o fenômeno de mistura no RH deveria ser imensamente prejudicado – por ocorrer o "curto-circuito", a transferência de massa e calor na panela seria mínima. Os autores apontaram que a principal possível causa seria a utilização de um domínio bidimensional. Hoje, em vista dos resultados de modelagem física de Wei et al. (2006) (figura 11), é fácil concordar com tal conclusão. Devido às suas limitações inerentes e ao avanço dos recursos computacionais – tanto de hardware quanto software -, os modelos bidimensionais foram abandonados.

A década de 1980 presenciou a incremento substancial nos recursos à simulação numérica. Além de melhorias no equipamento, a popularização de softwares comerciais de CFD com amplo espectro de aplicação e maior acessibilidade (como PHOENICS, FLUENT etc) impulsionou sua utilização na pesquisa siderúrgica (SZEKELY, 1988).

Nesse contexto, são introduzidos os modelos tridimensionais da panela do RH. A inclusão da terceira dimensão teve o desígnio de corrigir os problemas de "curto-circuito" apresentados anteriormente.

O trabalho de Tsujino et al. (1989) demonstra que tal metodologia obteve sucesso. De forma similar a Nakanishi et al. (1975), foram resolvidas as equações de conservação de massa e quantidade de movimento para o aço líquido e um traçador injetado na perna de descida. Testou-se a influência da taxa de circulação (com diâmetro de pernas fixo) e da distância entre o centro das pernas sobre o escoamento.

Os resultados ilustrados na figura 18 mostram que o escoamento calculado utilizando um domínio tridimensional se aproxima qualitativamente do obtido via simulação física (WEI et al., 2006), contendo estruturas de vórtices tridimensionais.

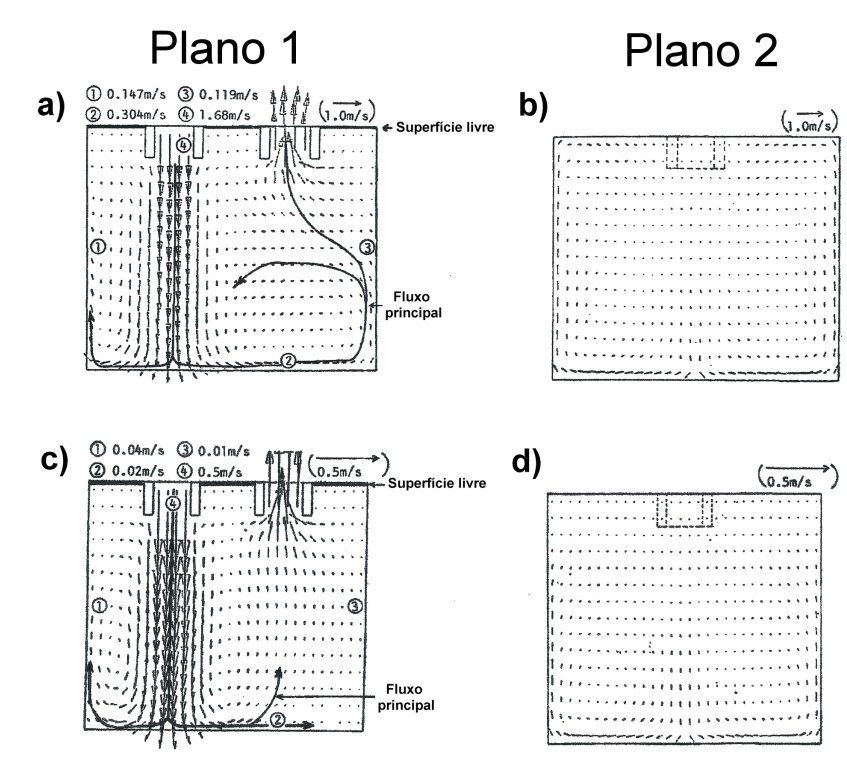

Figura 18 – Campo de velocidades na panela sobre plano que passa pelo centro das pernas (plano 1) e plano perpendicular (plano 2) para velocidades de entrada de 1 m/s (a e b) e 0,5 m/s (c e d). (Adaptado da fonte: TSUJINO et al., 1989)

Observa-se que ao reduzir pela metade a vazão de líquido não ocorre a formação do curto-circuito observado na simulação bidimensional. Os autores também demonstraram que

mesmo aproximando as pernas de subida e descida não há o *by-pass* de líquido de uma para outra. Dessa forma, ficou esclarecido que tal deformação no escoamento da panela do RH era um efeito da simulação bidimensional.

A simulação da dispersão de traçador mostrou, novamente, que o aumento da taxa de circulação favoreceu a homogenização do banho.

Kato et al. (1993) e Ajmani et al. (2003) publicaram outros artigos investigando os fenômenos de mistura na panela, utilizando metodologia similar a usada por Tsujino et al. (1989). Apesar do valor de seus resultados, não são introduzidas inovações relevantes na forma de solucionar o escoamento.

Como ilustrado no diagrama da figura 16, o desenvolvimento subseqüente na simulação numérica do RH foi o advento dos modelos completos. A principal característica destes modelos é considerar pernas e vaso (o último, total ou parcialmente) na solução do escoamento, além da panela. Essa alteração no ataque ao problema modifica radicalmente a forma de resolver o escoamento.

Ao considerar pernas e vaso, o domínio passa a contemplar regiões nas quais coexistem aço e gás, o que não ocorre na panela. O problema a resolver torna-se, portanto, bifásico. Dobrando o número de fases envolvidas na solução, as dificuldades teóricas e os requisitos computacionais tornam-se muito maiores.

Antes de analisar o desenvolvimento e resultados das simulações bifásicas do RH, é necessário definir mais claramente o problema multifásico e entender a origem dos embaraços enfrentados pelos pesquisadores.

2.6.3.2 Escoamentos multifásicos

Os escoamentos com duas ou mais fases podem ser encontrados em praticamente todos os ramos industriais. A interação entre as fases, por meio da transferência de massa, quantidade de movimento e calor, faz parte do mecanismo de muitos processos produtivos. Na aciaria podem ser encontrados diversos exemplos: a injeção de gás no refino secundário, a flotação de inclusões no distribuidor e o fenômeno de emulsificação de escória no lingotamento contínuo, entre outros.

Os principais tipos de escoamentos multifásicos são:

- Gás-líquido;
- Gás-sólido;
- Líquido-sólido;
- Líquido-líquido.

As atenções do presente trabalho estarão voltadas para os escoamentos gás-líquido, em vista do funcionamento do RH.

Ao estudá-los, podem-se encontrar as fases distribuídas sob duas formas: contínua ou dispersa. Um exemplo de escoamento multifásico com duas fases contínuas é o canal aberto, no qual existe uma separação (*interface*) única e bem definida entre o líquido e o gás acima dele. Em contraste, bolhas de ar na água exemplificam um escoamento com uma fase dispersa (ar) em uma fase contínua (água).

Embora vários autores (PORTELA; OLIEMANS, 2006 e CROWE et al., 1998) utilizem esse tipo de classificação, é importante observar que muitas vezes uma mesma fase pode se apresentar tanto sob forma contínua quanto sob forma dispersa em um mesmo escoamento. A emulsificação entre fases estratificadas exemplifica essa situação. Apesar disso, ao estudar um escoamento multifásico é comum analisar prioritariamente um aspecto específico, recorrendo a simplificações em relação a outros fenômenos que ocorrem simultaneamente. Seria possível, portanto, falar de fases "majoritariamente" dispersas ou contínuas.

No RH, a fase gasosa pode ser encontrada tanto dispersa (bolhas) como estratificada (atmosfera do vaso). Ao estudar o escoamento de aço neste equipamento, entretanto, a relevância da interação bolha-líquido é muito maior do que a dos fenômenos interfaciais na superfície livre. Assim, o foco das pesquisas com o RH volta-se para o aspecto disperso do escoamento líquido-gás.

Mesmo que exista enorme número de trabalhos sobre escoamentos dispersos, tanto de modelagem matemática quanto experimental, seu entendimento representa enorme desafio. Ao consultar alguns trabalhos dos últimos 10 anos, observa-se que seus autores (JAKOBSEN et al. 1997, CROWE et al. 1998, HUA; WANG, 2000, JAKOBSEN et al. 2005, PORTELA; OLIEMANS, 2006) convergem na opinião de que um longo caminho ainda há de ser percorrido até obter uma descrição robusta e consensual.

Na figura 19, encontra-se um esquema dos principais pontos de discussão sobre escoamentos dispersos líquido-gás, com as abordagens mais utilizadas.

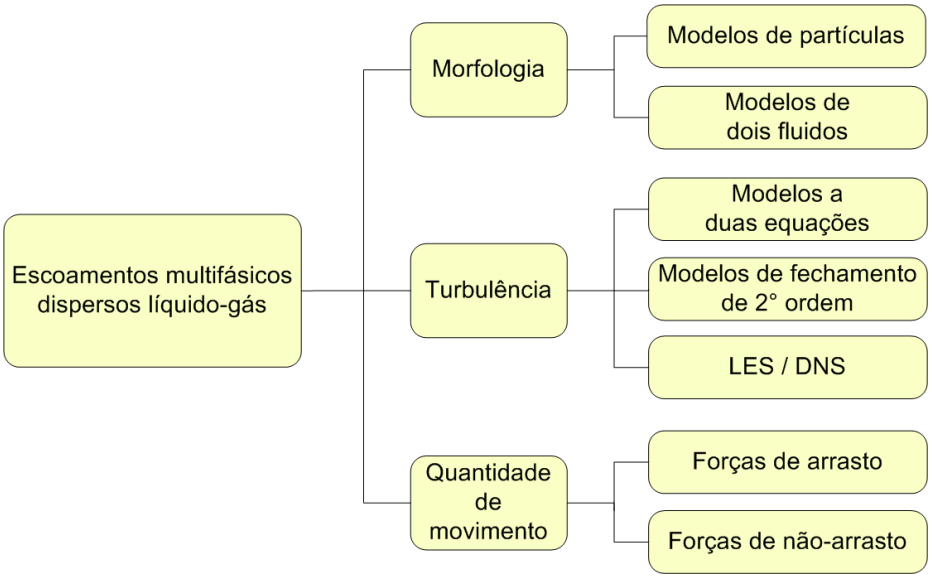

Figura 19 – Diagrama dos pontos-chave na descrição dos escoamentos dispersos líquido-gás.

2.6.3.2.1 MORFOLOGIA

A formulação matemática de um escoamento com fase dispersa depende da ótica sob a qual ele é observado. Isso se traduz nas descrições apresentadas no primeiro ramo da figura 19. Embora descrevam o mesmo fenômeno, existem diferenças fundamentais nas hipóteses para construir cada uma delas, assim como diferentes aplicabilidades.

Ainda que existam alternativas (como o *Algebraic Slip Model* (MANNINEN et al., 1996)), a maioria dos estudos com aplicação industrial recorrem aos modelos apresentados a seguir.

Modelos de partículas

A formulação matemática dos modelos de partícula baseia-se na idéia de que a fase dispersa é constituída por um número finito de corpos. Dessa forma, cada volume de controle contém a fase contínua – cujo comportamento é regido pelas equações da conservação de massa e Navier-Stokes – e um conjunto de partículas que obedece às leis de Netwon. Essa formulação é conhecida como formulação Euler-Lagrange.

Segundo Jakobsen et al. (1997), essa abordagem é conceitualmente simples e eficaz, pois a composição da fase dispersa por partículas torna fácil descrever as forças que agem nessa fase, bem como as interações partícula-partícula e partícula-fluido. Ainda, é possível simular escoamentos considerando uma dispersão no tamanho das partículas com facilidade, além de fenômenos de quebra e aglomeração de partículas.

Apesar disso, a aplicabilidade de tal método é dificultada nos escoamento com grande concentração de gás: neles, o número de partículas consideradas na simulação pode aumentar em demasia, exigindo um poder computacional muito grande.

Modelos de dois fluidos

Também conhecida por formulação Euler-Euler, essa descrição considera que tanto a fase dispersa quanto a fase contínua obedecem às equações da continuidade e de Navier-Stokes. Isso decorre da concepção de que as fases são meios contínuos – no sentido de que as menores escalas espaciais do escoamento são muito maiores do que o livre caminho médio molecular (DREW, 1983).

Através da formulação de dois fluidos é possível abarcar escoamentos nos quais ocorrem grandes concentrações de fase dispersa, visto que isso não aumenta a demanda computacional.

Um dos principais, senão o maior, dos problemas apresentados por essa descrição é a dificuldade em descrever os termos de interação entre as fases. Outra dificuldade é a simulação de uma fase dispersa com partículas de vários tamanhos – nesta formulação, para cada tamanho seria necessário um conjunto de equações adicionais, incorrendo em custo computacional.

2.6.3.2.2 MODELOS DE TURBULÊNCIA

A discussão subseqüente apresentada concerne tanto aos escoamentos monofásicos como multifásicos.

Ao observar escoamentos que ocorrem a elevados números de Reynolds (situação

encontrada em grande parte dos escoamentos de interesse industrial), nota-se muitas vezes um comportamento irregular – presença de vórtices que surgem e são destruídos, variações de pressão e velocidade sem aparente periodicidade. Esse tipo de comportamento denomina-se turbulência e é considerado um dos maiores problemas teóricos dentro da física clássica (WILCOX, 2000).

A definição de Hinze (1959), ainda citada como referência modernamente (WILCOX, 2000), pode ser evocada para esclarecer seu conceito:

A turbulência é uma condição irregular do escoamento na qual várias quantidades físicas [velocidade, pressão etc] apresentam variações aleatórias em função do tempo e espaço, de forma que valores médios estatisticamente distintos podem ser discernidos.

Solucionar de forma analítica as equações da mecânica de fluidos para escoamentos turbulentos tem se mostrado um desafio considerável, quando não insuperável. Embora as equações de Navier-Stokes contenham toda a informação acerca da transferência de quantidade de movimento, é muito difícil formular matematicamente problemas de contorno que contemplem todas as condições e escalas de um escoamento turbulento. Assim, a modelagem dessas equações culminou em diversas abordagens distintas, dentre as quais se destacou a decomposição de Reynolds.

Decomposição de Reynolds

Ao observar que a turbulência ocorre em muitas escalas temporais e espaciais e possui caráter estatístico, os pesquisadores buscaram descrevê-la através de médias temporais e/ou espaciais. A mais famosa abordagem desse gênero é conhecida como decomposição de Reynolds (WILCOX, 2000). Ela considera que as variáveis do escoamento são compostas por uma parte relativa ao campo "médio" do escoamento e uma parte "flutuante", sendo a última relativa à turbulência, conforme a equação (2).

$$u_i = U_i + u'_i \tag{2}$$

Ao introduzir a nova variável na equação de Navier-Stokes e tomar a média temporal, obtém-se uma equação que descreve as grandezas do escoamento em função de termos

médios e turbulentos. Essa equação é conhecida pela sigla RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*).

Neste processo surgem termos – denominados tensões de Reynolds – formados pelo produto das partes turbulentas da velocidade – equação (3). *A priori*, não existem equações para calculá-los e, portanto, acaba-se obtendo um sistema com mais incógnitas do que equações. É, portanto, necessário *modelar* equações para calcular esses novos termos.

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u_i' u_j'} \tag{3}$$

Esse problema, conhecido como *problema de fechamento*, é um dos pontos cruciais na descrição da turbulência. Nessa conjuntura são apresentados os dois primeiros desdobramentos do ramo "Turbulência" da figura 19.

Modelos de duas equações

A modelagem da turbulência pelos modelos de duas equações assume a validade da hipótese de Boussinesq (WILCOX, 2000). Essa hipótese consiste em relacionar linearmente as tensões de Reynolds às variáveis do escoamento "médio", conforme equação (4). Nessa relação, é introduzido o conceito de viscosidade turbulenta μ_{turb}, baseado na idéia de que a turbulência causaria um aumento aparente na viscosidade do fluido. Assim, a viscosidade efetiva do fluido é constituída por uma parcela laminar (ou molecular) μ e outra turbulenta (equação 5).

$$-\rho \overline{u_i' u_j'} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \tag{4}$$

$$\mu_{ef} = \mu + \mu_t \tag{5}$$

Os modelos de turbulência a duas equações relacionam μ_{turb} com duas grandezas características: a energia cinética de turbulência (k) e uma taxa de dissipação (ε) dessa energia. São resolvidas equações de transporte para cada uma dessas grandezas. Diferenças no cálculo da taxa de dissipação (e, portanto, na viscosidade turbulenta) distinguem os diversos modelos a duas equações.

Entretanto, existe uma grande gama de escoamentos no qual a hipótese de Boussinesq pode ser inválida e, dessa forma, é necessária uma descrição alternativa.

Modelos de fechamento de 2ª ordem

Ao abandonar a hipótese de Boussinesq, é necessário encontrar uma outra maneira de calcular as tensões de Reynolds. Isso pode ser feito se multiplicarmos a equação de Navier-Stokes por essas pelas variáveis flutuantes da decomposição de Reynolds – esse processo é conhecido como fechamento de 2ª ordem (WILCOX, 2000).

Dessa maneira, será possível encontrar um novo sistema de equações para as tensões de Reynolds, que supostamente seria mais acurado do que a solução obtida via Boussinesq.

Entretanto, ao construir o novo sistema, são obtidas novas variáveis, envolvendo produtos triplos de variáveis flutuantes – assim, uma modelagem para esses termos é necessária, introduzindo mais empirismo. Além disso, o número de equações cresce em relação aos modelos de duas equações.

Ressalta-se que o aumento de complexidade destes modelos nem sempre é recompensado com uma descrição mais próxima do escoamento. Assim, tais modelos possuem aplicação mais restrita no âmbito da pesquisa em engenharia.

LES / DNS

Indo em direção à fronteira da pesquisa em turbulência, encontram-se as técnicas LES (*Large Eddy Simulation* – Simulação de grandes vórtices) e a DNS (*Direct Numerical Simulation* – Simulação numérica direta) (WILCOX, 2000).

A primeira baseia-se em uma espécie de decomposição das variáveis do escoamento: considera-se que cada uma delas é composta por uma parcela referente às grandes escalas do escoamento, a ser resolvida de forma direta, e uma parcela das pequenas escalas, modelada.

A DNS busca solucionar o escoamento considerando as equações de Navier-Stokes e da continuidade de forma direta, sem modelagem em qualquer escala.

Ambas as abordagens ainda são consideradas distantes da pesquisa aplicada, em especial

pelo enorme poder computacional requerido. Isso se deve a necessidade de discretizar o domínio de forma muito detalhada. Dessa maneira, elas permanecem como formas de verificação dos outros modelos apresentados anteriormente.

2.6.3.2.3 TRANSFERÊNCIA DE QUANTIDADE DE MOVIMENTO

A evidente e mais notável característica de um escoamento multifásico é a troca de propriedades (físicas e químicas) entre as fases. Como comentado anteriormente, o RH (e diversos outros equipamentos siderúrgicos) baseiam seu funcionamento nessas interações.

Em termos da transferência de quantidade de movimento entre as fases, a literatura separa de forma clara a força de arrasto das restantes, devidamente denominadas de "não-arrasto". Tal dicotomia decorre do fato de que a primeira está sempre presente de forma apreciável, enquanto a importância das últimas pode ser minorada em certas condições (MÉNDEZ et al., 2005).

Nesse processo de transferência, a forma que a fase dispersa assume é de extrema importância. Considerando uma bolha de gás imersa em um líquido newtoniano, esta se deformará até que todas as tensões sobre a bolha se equilibrem. Ao alterar seu formato, as interações bolha-líquido são afetadas. Percebe-se, portanto, que conhecer o formato que assume a fase dispersa é fundamental para o estudo dos escoamentos dispersos – daí introduz-se o conceito de regime de formato.

O conceito de regime de formato fundamenta-se na hipótese de que é possível determinar o formato das partículas dispersas conhecendo alguns números adimensionais do escoamento. Tal idéia serve de suporte para a construção de modelos de troca de propriedades entre as fases. É importante observar que esse conceito foi construído desprezando as interações bolha-bolha (como a coalescência, por exemplo).

O regime de formato pode ser sintetizado na célebre figura de Clift et al. (1978) – figura 20 -, na qual o formato da fase dispersa é relacionado com os números de Reynolds, Eötvös e Morton (tabela 1).

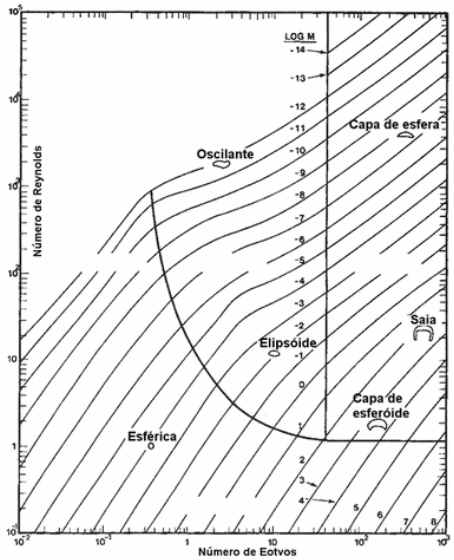

Figura 20 – Regime de formato de bolhas, conforme número de Reynolds, Eötvös e Morton. (Adaptado da fonte: CLIFT et al., 1978)

Tabela 1 – Números adimensionais utilizados na determinação do regime de formato.

	Definição		Significado físico
Número de Reynolds	$\mathrm{Re}_b = \dfrac{\rho_l d_b \lvert U_{rel} \rvert}{\mu_l}$	(6)	Razão entre forças inerciais e viscosas
Número de Eötvös	$Eo = \dfrac{g(\rho_l - \rho_g) d_b^{\,2}}{\sigma}$	(7)	Razão entre forças de empuxo e de tensão interfacial
Número de Morton	$M = \dfrac{g\mu_l^{\,4}(\rho_l - \rho_g)}{\rho_l^{\,2}\sigma^3}$	(8)	Razão entre o produto de forças viscosas com empuxo e de tensão interfacial

Ao estimar o valor dos números apresentados na tabela 1, é possível localizar na figura 20 o formato mais provável que irá assumir uma bolha. Essa informação serve de base para o desenvolvimento dos modelos para o cálculo do coeficiente de arrasto.

Força de arrasto

Em qualquer escoamento multifásico no qual exista diferença de velocidade entre a fase contínua e a dispersa estará presente a força de arrasto, oriunda do campo de tensões entre as fases atrito e do campo de pressão.

Como comenta Drew (1983), a descrição da força de arrasto (F_D) é expressa pela equação (9):

$$F_D = \frac{3}{8}\frac{\alpha_g \rho_l C_D}{d_b} U_{rel} \left| U_{rel} \right| \tag{9}$$

O parâmetro C_D, conhecida por coeficiente de arrasto, tem sido determinada analítica e experimentalmente desde o início da pesquisa em mecânica de fluidos. Não há um valor universal para tal coeficiente. Existem diversas correlações para seu cálculo, cada qual possuindo uma aplicabilidade distinta.

Como visto na seção anterior, a deformação das bolhas, bem como a presença de outras bolhas, pode alterar o valor de C_D. É necessário, portanto, estabelecer formas de calculá-la considerando tais efeitos.

Forças de não-arrasto

É possível encontrar na literatura grande variedade de forças que surgem entre as fases do escoamento multifásico disperso e não são oriundas do arrasto entre as fases. As chamadas *forças de não-arrasto* possuem origens e efeitos diferentes.

Uma das mais conhecidas é a força de sustentação (*lift force*), oriunda da assimetria do campo de velocidade (e, portanto, de pressão), ao redor de uma partícula imersa. Outras comumente consideradas nos escoamentos bifásicos são as forças de massa virtual e a de dispersão turbulenta (MÉNDEZ et al., 2005).

Segundo Méndez et al. (2005), embora a força de arrasto seja preponderante, as forças de não-arrasto podem desempenhar papel importante, principalmente se a determinação da

dispersão de gás e sua velocidade são relevantes. No caso do RH, a literatura considera que o fenômeno de saturação da taxa de circulação é intimamente ligado à distribuição de gás na perna de subida. É, portanto, interessante estimar os efeitos das forças de não-arrasto neste escoamento.

Cada uma das forças de não-arrasto possui um coeficiente, análogo ao da força de arrasto, que pondera sua influência. Não existem valores que sejam aplicáveis de forma universal, sendo, portanto, passíveis de ajuste para cada escoamento.

Conclui-se, do diagrama da figura 19 e da discussão apresentada, que a simulação numérica dos escoamentos bifásicos é complexa e que nela está presente muito empirismo. No entanto, inúmeros trabalhos que utilizaram esses métodos e modelos produziram conhecimento útil acerca de processos industriais. A simulação do escoamento no RH é realizada tendo tal experiência prévia em mente.

2.6.3.3 Modelos completos do RH

De volta à simulação numérica do RH, encontra-se então a etapa posterior aos modelos de panela: a simulação do RH completo. Conforme a figura 16, a próxima abordagem introduzida foi a de simulação pseudo-bifásica.

2.6.3.3.1 MODELO PSEUDO-BIFÁSICO

A abordagem pseudo-bifásica representa o passo intermediário entre os modelos monofásicos – de panela – e os bifásicos plenos.

É possível considerar que o trabalho pioneiro nesse ramo de simulação foi realizado por Miki et al. (1997). Em um trabalho acerca da remoção de inclusões no RH, foi solucionado o escoamento no RH. Em vista do foco do trabalho, pouca atenção foi dada para aspectos da influência do gás e não foi apresentada nenhuma validação. Assim, pouca informação sobre o escoamento pôde ser obtida nesse artigo.

Apresentada de forma mais detalhada por Park et al. (2000), a abordagem pseudo-bifásica considera como domínio a estação RH inteira – panela, pernas e vaso – e o fluido de

densidade variável, como uma mistura gás-líquido. Dessa maneira, a taxa de circulação pode ser determinada em função da vazão de gás. É importante ressaltar que a interface superior do líquido com o gás, no vaso, é considerada como uma parede plana através da qual o gás deixa o domínio.

No entanto, para calcular o empuxo proporcionado pelas alterações de densidade, é preciso que a distribuição de gás na perna de subida seja calculada durante o escoamento ou determinada previamente. Nesse ponto justifica-se o prefixo "pseudo": a forma do cone de gás é calculada através de um modelo semi-empírico, não sofrendo alterações em função do escoamento do metal. A solução do escoamento foi calculada através de uma formulação euleriana monofásica.

Park et al.(2000) utilizaram tal metodologia para calcular a taxa de circulação em um modelo físico (escala 1:10), bem como em uma unidade industrial. Os resultados são sintetizados na figura 21.

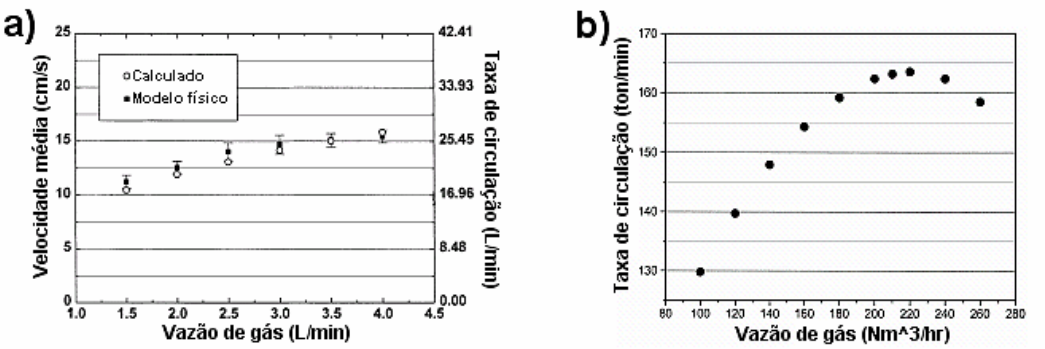

Figura 21 –a) Taxa de circulação e velocidade média na perna de descida: comparação entre simulação e modelo físico; b) Taxa de circulação: simulação para unidade industrial. (Adaptado da fonte: PARK et al., 2000).

Observa-se, na figura 21a a boa concordância entre simulação e modelo físico. A característica mais notável dessa simulação é, no caso industrial, observar o fenômeno de saturação, como visto na figura 21b. Como anteriormente discutido, foi proposta uma interpretação física para sua ocorrência baseado na superposição dos cones. A queda na taxa de circulação observada na figura 21b é, no entanto, inesperada, podendo apontar para um comportamento diferente entre simulação e o equipamento real.

Ainda no mesmo ano, Li e Tsukihashi (2000) apresentaram uma nova simulação do escoamento no RH com metodologia similar à de Park et al. (2000). Seu trabalho foi proposto com a finalidade de analisar as vantagens de uma estação RH com três pernas de subida em relação às convencionais, com uma única perna de subida (figura 22).

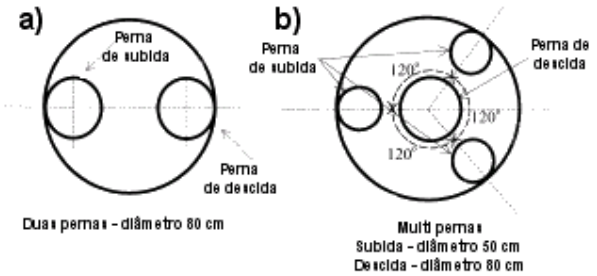

Figura 22 – Vista superior do: a) RH com duas pernas e b) RH com três pernas de subida e uma de descida. (Adaptado da fonte: LI e TSUKIHASHI, 2000).

Em termos de formulação, a diferença fundamental entre este trabalho e o anterior é a forma de calcular a distribuição de gás na perna de subida. No caso presente, uma relação obtida mais recentemente substitui a utilizada por Park et al. (2000).

A validação da simulação mostrou-se bastante acurada (figura 23), embora não tenha sido observada a saturação da taxa de circulação de forma explícita.

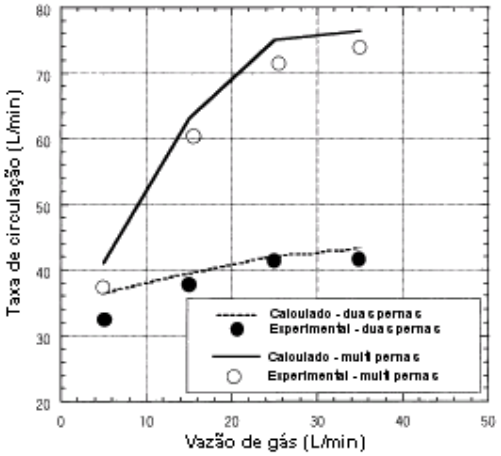

Figura 23 – Taxa de circulação em função da vazão de gás, para sistema com duas e multi pernas. (Adapatado da fonte: LI e TSUKIHASHI, 2000).

Pelo demonstrado na figura 23 fica claro que o RH com quatro pernas apresenta vantagens frente ao convencional. Em outra simulação, os autores compararam a mistura de um traçador nas duas estações, sendo demonstrada a melhoria no sistema de quatro pernas.

Embora a metodologia pseudo-bifásica tenha atingido um novo patamar em termos de cálculo da taxa de circulação, a necessidade de fixar *a priori* o formato do cone de gás como condição inicial acaba parecendo forçada, visto que implica em eliminar as forças interfaciais.

Dessa maneira, um novo esforço foi feito em prol do desenvolvimento dos modelos bifásicos plenos.

2.6.3.3.2 MODELOS BIFÁSICOS

A diferença fundamental entre essa e a metodologia anterior é considerar que a fase gasosa está presente no escoamento sob forma de pequenas "partículas de fluido", imiscíveis com o fluido contínuo. Há, portanto, uma interface entre as duas fases.

Uma das grandes motivações atrás de sua utilização é que ela pode levar à implementação de modelos de transferência de massa entre as fases, possibilitando simular a influência do escoamento nas reações de refino (SICORSKI et al., 2007).

O trabalho de Wei e Hu (2005) é, no conhecimento do autor, a primeira publicação que demonstra o uso desta metodologia. Os autores simularam numericamente o escoamento em um modelo físico. Após a validação, foi realizada a simulação para um equipamento em escala industrial.

Em termos de geometria utilizada, o domínio é completo e possui uma parede na interface líquido-gás do vaso, sendo, portanto, um modelo de superfície plana (ver figura 16).

A descrição matemática do escoamento consiste nas equações de conservação para cada uma das fases – configurando um modelo de dois fluidos. Os fluidos foram considerados incompressíveis, o diâmetro de bolha fixo e somente a força de arrasto foi incluída. O coeficiente de arrasto foi calculado através do modelo desenvolvido por Kuo e Wallis (1988). Considerou-se que apenas a fase contínua apresentava comportamento turbulento, adotando-se o modelo k-ε.

Tanto em termos de taxa de circulação bem como em relação à distribuição de gás na perna de subida a simulação obteve resultados bastante próximos aos do experimento (figuras 24 e 25).

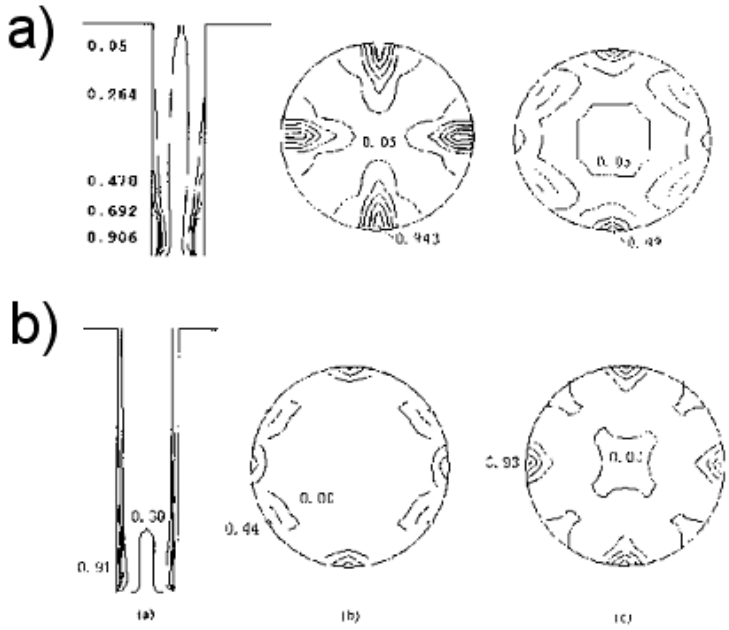

Figura 24 – Resultado da simulação numérica: fração volumétrica de gás na perna de subida, plano central paralelo ao eixo e dois planos transversais. a) modelo físico; b) equipamento industrial. (Adaptado da fonte: WEI e HU, 2005).

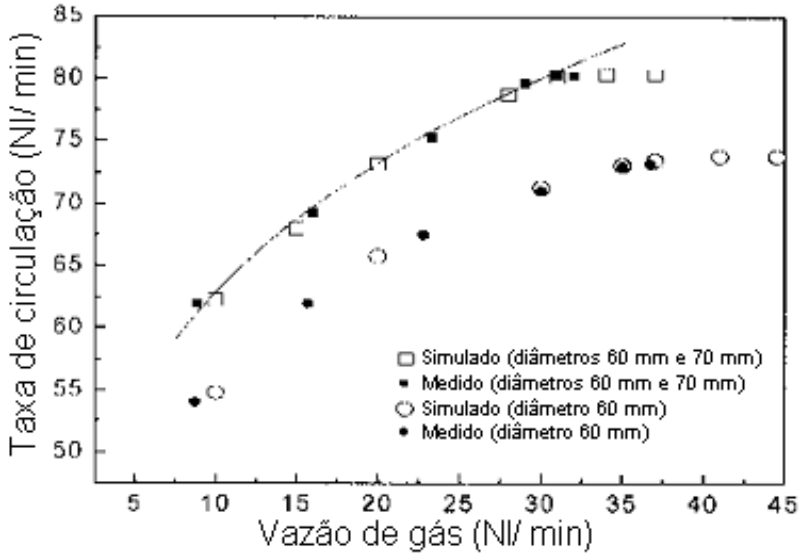

Figura 25 – Taxa de circulação em função da vazão de gás no modelo físico. Medidas e simulação, para diâmetros de pernas iguais (60 mm) e com perna de descida de 70 mm. (Adaptado da fonte: WEI e HU, 2005)

Na figura 24a, verificou-se que, na simulação do modelo físico, o cone gasoso formado permanece próximo às paredes da perna. A causa disso seria a rápida perda de quantidade de movimento do gás na direção radial – esse comportamento também foi observado na simulação do equipamento industrial, mas com intensidade muito maior (figura 24b).

O modelo construído por Wei e Hu provou, dessa forma, ser possível a simulação numérica do RH através da formulação Euler-Euler. A principal realização desta foi a validação da taxa de circulação, sendo observada sua saturação.

No ano seguinte, Kishan e Dash (2006) realizaram, também utilizando a abordagem Euler-Euler, a simulação de uma estação em escala plena. Preliminarmente, o modelo matemático foi testado via comparação com resultados experimentais de vazão em um sistema recirculatório simplificado, obtendo bons resultados.

As principais diferenças entre esse trabalho e o anterior são vistas na consideração de uma interface líquido-gás livre (deformável) no vaso – ou seja, existe uma atmosfera de gás acima da fase contínua, e não mais uma parede – e na escolha de um coeficiente de arrasto diferente, baseada na hipótese de que as bolhas são bastante pequenas e, portanto, esféricas. Também foram levadas em consideração as forças de não-arrasto, desprezadas anteriormente.

Os resultados da simulação do RH em escala plena são apresentados nas figuras 26 e 27.

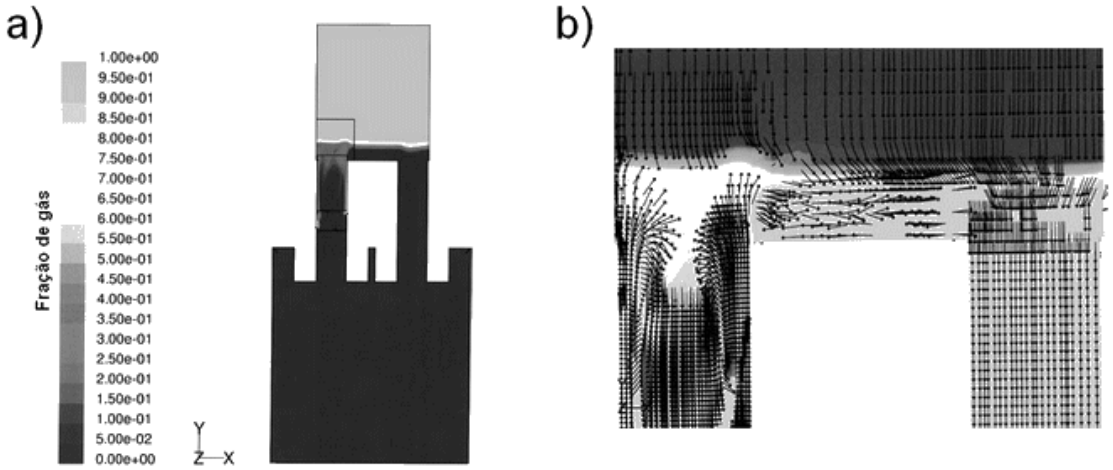

Figura 26 – a) mapa de fração volumétrica de gás sobre plano de simetria; b) detalhe na região inferior do vaso (topo das pernas), com vetores de velocidade (Adaptado da fonte: KISHAN e DASH, 2006).

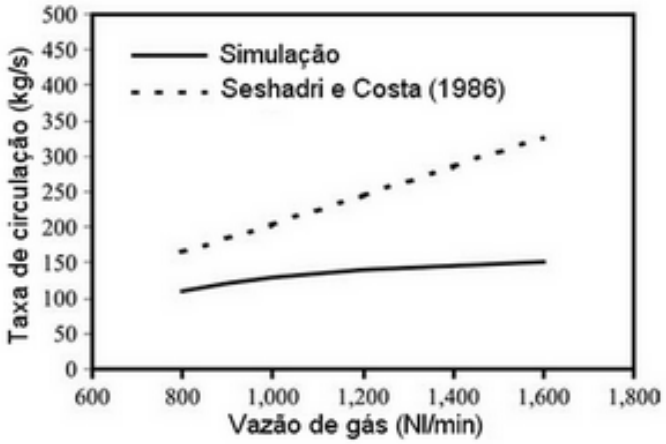

Figura 27 – Taxa de circulação em função da vazão de gás simulada numericamente e obtida através da equação de balanço proposta por Seshadri e Costa (1986) (Adaptado da fonte: KISHAN e DASH, 2006).

A figura 26a mostra, como já observado por Wei e Hu (2005), que o gás sobe até o vaso próximo à parede das pernas de subida. Na figura ao lado (26b) observa-se a formação de um contra-fluxo (vetores no sentido negativo de X) na região do vaso entre as pernas.

Já na figura 27, observa-se que a taxa de circulação calculada pela simulação foi bastante baixa quando comparada com a calculada através da equação proposta por Seshadri e Costa (1986). Ela estabelece o balanço de energia entre o gás que ingressa no RH e as perdas de energia do fluido, possibilitando estimar tal taxa. Conforme os autores, um dos principais motivos pelo qual a taxa simulada é baixa seria a consideração de um gás de densidade fixa (no caso, em condições normais de temperatura e pressão). Tanto por efeito de pressão como por efeito de temperatura, a densidade do gás se alteraria, o que poderia resultar em empuxo aumentado.

Morales et al. (2008) simularam numericamente o escoamento de um modelo físico utilizando uma metodologia Euler-Lagrange. Os principais resultados podem ser vistos na figura 28.

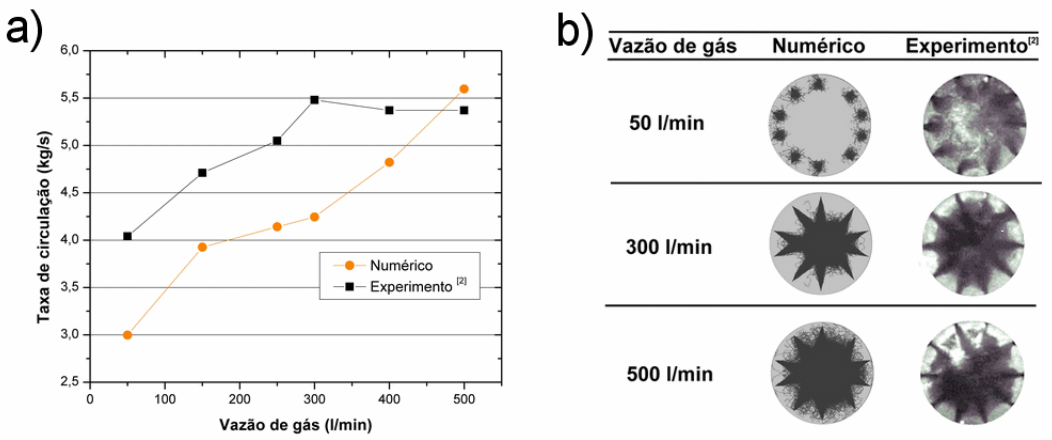

Figura 28 – a) Taxa de circulação em função da vazão de gás; b) Comparação entre a distribuição de gás observada experimentalmente e a simulada. (Adaptado da fonte: MORALES et al., 2008)

Qualitativamente, é evidente que a ocupação de gás na perna de subida obtida numericamente se aproxima do observado experimentalmente (figura 28b), com maior concentração de gás no centro da perna para as vazões de 300 Nl/min e 500 Nl/min. No entanto, o comportamento da taxa de circulação em função da vazão de gás divergiu das medidas no modelo físico – em particular, não foi observada a saturação. Uma provável explicação para isso pode ser a das interações bolha-bolha no referido modelo.

2.6.4 Conclusão

Tanto experimentalmente quanto computacionalmente o escoamento no RH tem sido alvo de estudos. Ambas as abordagens vêm proporcionando grande acréscimo no conhecimento sobre o funcionamento da estação. No entanto, a abordagem numérica, por limitações de sua formulação, parece ainda não possuir um método único que possa reproduzir razoavelmente as características físicas do equipamento.

Dessa forma, conclui-se que ainda há espaço para aperfeiçoamento dos modelos numéricos bifásicos, sendo fundamental a validação de seus resultados por meio de modelagem física ou observações em planta.

3 METODOLOGIA

3.1 INTRODUÇÃO

Este trabalho tem como objetivo simular numericamente o escoamento de um modelo físico do RH, avaliando a adequação dos modelos disponíveis às características do fenômeno e comparando os resultados computacionais com dados oriundos do modelo físico.

Com esse desígnio, é analisada a influência de modelos de turbulência, da utilização de diferentes formas de cálculo do coeficiente de arrasto e da presença das forças de não-arrasto na solução numérica.

A metodologia empregada baseia-se nas ferramentas de CFD, já discutidas anteriormente. As etapas são sintetizadas pelo diagrama apresentado na figura 29 e são detalhadas nas seções subseqüentes.

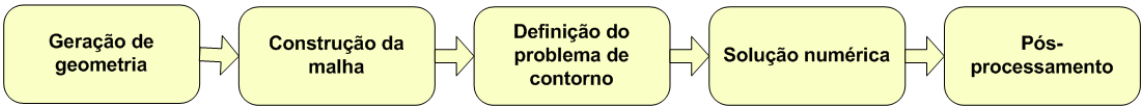

Figura 29 – Etapas da metodologia.

3.2 GERAÇÃO DE GEOMETRIA

A escolha do modelo físico a ser simulado recaiu sobre o equipamento do grupo de pesquisa LaSiP (Laboratório de Simulação de Processos) Escola de Engenharia da Universidade Federal de Minas Gerais. A escala geométrica é 1:5 em relação ao equipamento real. A injeção de gás é realizada através de um anel de 10 injetores distribuídos uniformemente ao redor de uma das pernas.

Na figura 30 são mostrados o modelo físico e sua correspondente geometria computacional. Em vista da simetria do equipamento em relação ao plano que passa pelo centro dos *snorkels*, foi considerada somente metade desse na simulação numérica, resultando em economia de tempo de cálculo.

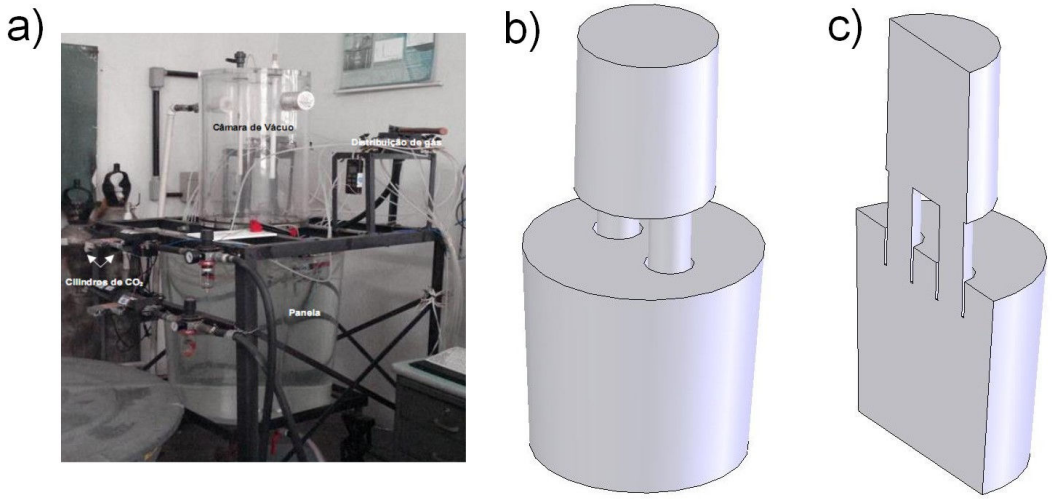

Figura 30 – a) foto do modelo físico; b) geometria inteira do modelo físico; c) porção do modelo considerada na simulação numérica.

Na tabela 3 são apresentadas as dimensões utilizadas na simulação. As dimensões diferem ligeiramente das constantes na publicação de Nascimento et al. (2007). Tais diferenças se devem às correções nas medidas realizadas durante visita do autor ao grupo LaSip. A diferença entre a altura do vaso na simulação e a constante na publicação original é decorrente da observação de que no experimento não há escoamento (sob a forma de projeção de líquido) relevante acima de 40 cm do fundo do vaso. Dessa forma, optou-se por diminuir em 20 cm a altura total do vaso na simulação para economizar recursos computacionais.

Tabela 2 – Dimensões da geometria utilizada na simulação numérica.

Panela	**mm**
Diâmetro inferior da panela	648,0
Diâmetro superior da panela	720,0
Altura da panela com líquido (excluindo borda livre)	656,0
Pernas	
Diâmetro interno	126,0
Comprimento	312,0
Profundidade de imersão	120,0
Distância entre centros	270,0
Espessura da parede	11,5
Injetores	
Diâmetro do bico	1,0
Altura de injeção (distância em relação ao topo da perna)	148,0
Vaso	
Diâmetro	420,0
Altura	500,0

3.3 CONSTRUÇÃO DA MALHA

A discretização da geometria foi realizada utilizando o software Ansys ICEM CFD 10.0. Através deste, é possível construir malhas não-estruturadas compostas por elementos hexaédricos ou tetraédricos. Foram escolhidos os primeiros devido à relativa regularidade da geometria.

Os nós foram distribuídos não-uniformemente, como ilustra a figura 31. A perna de subida recebeu maior atenção, em vista de que nesta região ocorre a interação gás-líquido que impulsiona todo o escoamento.

Após a construção da primeira malha, foi conduzida a análise de independência de malha. Por não ser essencial ao entendimento do trabalho, ela é apresentada no **Apêndice I**. A malha utilizada para obtenção dos resultados finais apresentados nesse trabalho possui, aproximadamente, 230 mil nós.

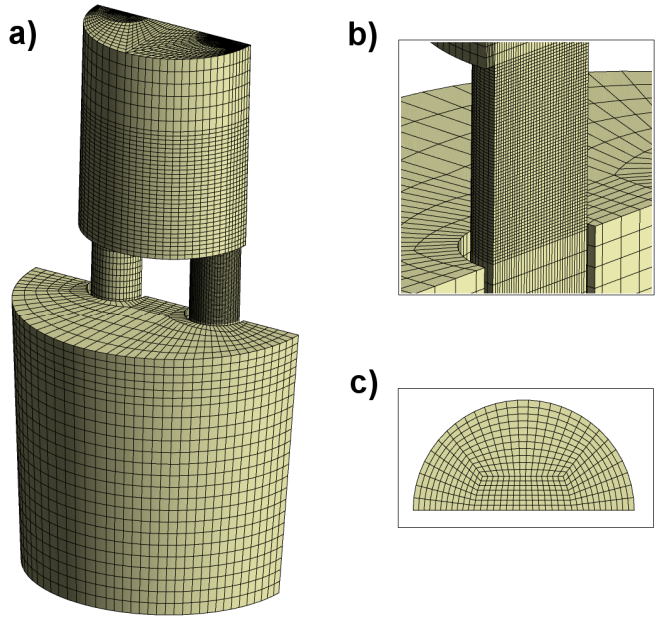

Figura 31 – a) malha inteira de 230 mil nós; b) detalhe da perna de subida; c) seção transversal da malha da perna de subida.

3.4 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA DE CONTORNO

3.4.1 Hipóteses fundamentais

O problema a ser simulado é um escoamento bifásico, composto por uma fase líquida (água) e uma gasosa (ar). O comportamento de cada uma das fases pode ser descrito através das equações de Navier-Stokes e da continuidade. Utiliza-se, portanto, uma formulação Euler-Euler.

3.4.2 Condições de contorno e propriedades físicas

A figura 32 apresenta as condições de contorno utilizadas. Na tabela 4 constam as interpretações físicas de cada condição.

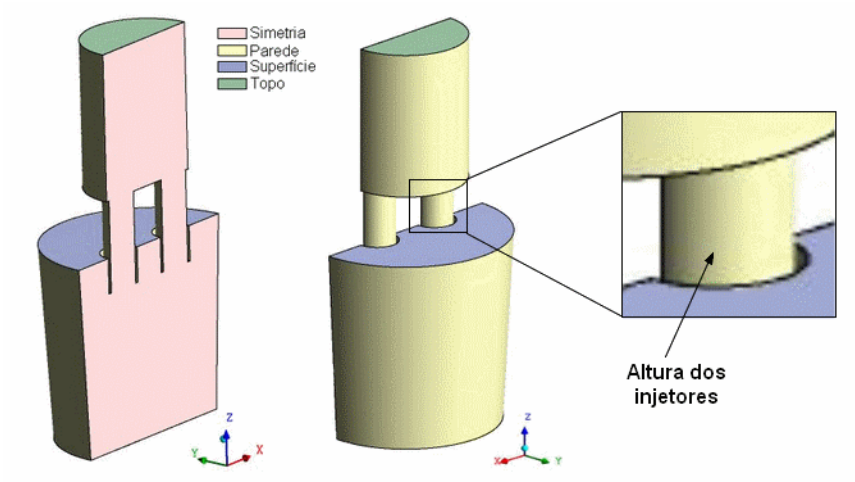

Figura 32 – Condições de contorno e posição dos injetores.

Tabela 3 – Condições de contorno.

Região	**Condição**
Simetria	Componentes normais dos campos vetoriais e gradientes dos campos escalares nulos.
Parede	Não-escorregamento.
Superfície	Parede sem atrito
Topo	Saída de gás

A pressão de vácuo utilizada foi de 0,986 mbar, o que corresponde a uma altura de líquido no vaso de 92 mm, aproximadamente.

A utilização da condição *Superfície* como uma parede sem atrito é feita por não ser simulada a superfície livre do líquido nta panela. De fato, observa-se no modelo físico que esta região é quase estagnante e não apresenta nenhuma oscilação importante.

As propriedades físicas relevantes dos fluidos simulados são apresentadas na tabela 4.

Tabela 4 – Propriedades físicas dos fluidos simulados.

	Densidade (kg m^{-3})	**Viscosidade dinâmica (kg m^{-1} s^{-1})**	**Tensão superficial (N m^{-1})**
Ar	1,185	1,831 x 10^{-5}	0,072
Água	997	8,899 x 10^{-4}	

Considera-se que sejam válidas as seguintes hipóteses sobre o escoamento:

- Ambas as fases escoam de forma incompressível. Ressalta-se que o gradiente de pressão hidrostática é muito pequeno, de forma que as variações na densidade do gás causadas por ele podem ser desprezadas.
- O escoamento é isotérmico: considera-se que o modelo físico apresenta temperatura constante (298 K) em todo o domínio.
- O escoamento é turbulento: definindo o número de Reynolds com o raio das pernas, a velocidade média da fase contínua (obtida pelo experimento) na perna, a densidade e a viscosidade dinâmica da água, são calculados valores maiores do que 10.000 para qualquer vazão.
- A fase dispersa possui diâmetro fixo: considera-se, devido a limitações da formulação Euler-Euler, que as bolhas possuem diâmetro fixo. São desprezados os efeitos de quebra e coalescência das bolhas.

Ao utilizar a formulação euleriana para a fase dispersa, é forçoso fixar um diâmetro médio para as bolhas de ar. Não sendo possível medir diretamente tal dimensão, é necessário estimá-la. Através de fotografias da perna de subida, estimou-se que o diâmetro médio deve ser situado em torno de 5 mm.

Utilizando também as estimativas de velocidade terminal de bolhas de ar em água apresentadas por Clift et al. (1978, p.172), são calculados os números adimensionais que caracterizam o regime de formato no modelo físico.

Tabela 5 – Parâmetros e números adimensionais relativos ao regime de formato do modelo físico do RH.

Diâmetro de bolha (mm)	5
Velocidade terminal relativa (m/s)	0,2 – 0,4
Número de Reynolds da bolha	1120 - 2240
Número de Eötvos	3,39
Logaritmo do número de Morton	-10,78

Dos dados apresentados na tabela 5, determina-se qual o formato esperado das bolhas, conforme a figura 33. No presente caso, o formato é oscilante.

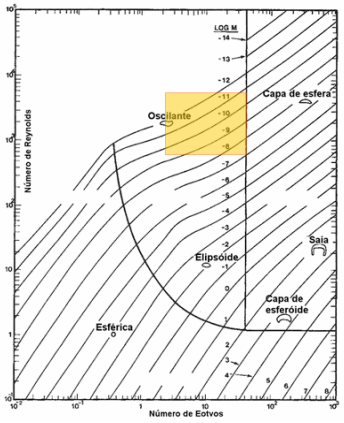

Figura 33 – Formato esperado das bolhas (região amarela).

A informação contida na figura 33 fornece auxílio na determinação do coeficiente de arrasto.

A entrada de gás no domínio é feita através de fontes pontuais de massa localizadas sobre a parede da perna de subida (vide figura 34). Os tubos de injeção não fazem parte do domínio computacional. Dessa maneira, é necessário definir como condição de contorno dos injetores a vazão mássica e a velocidade de ingresso do ar no domínio.

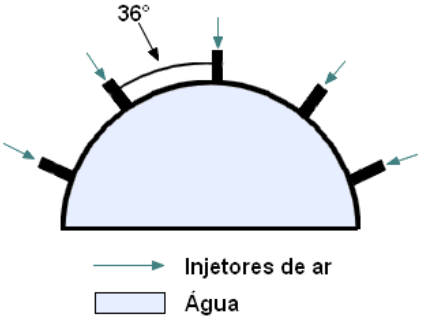

Figura 34 – Posição dos injetores de ar sobre a seção transversal da perna de subida.

Conforme o artigo de Nascimento et al. (2007), a vazão de gás utilizada variou entre 50 L/min e 500 L/min, com incrementos de 50 L/min. A medição do volume de gás injetado foi realizada, no experimento, considerando o gás sob condições de 298 K e 1 atm. Com tais informações, é possível calcular a condição de vazão mássica para cada injetor. Através da equação (9) chega-se à velocidade de injeção, relacionando a vazão mássica, a área do injetor e a densidade do gás.

$$G = U_g A_{inj} \rho_g \tag{9}$$

3.4.3 Modelagem das equações governantes

O comportamento de ambos fluidos é descrito pelas equações de Navier-Stokes e da continuidade (Ansys, 2007).

Na obtenção das equações (10) até (13) são consideradas a incompressibilidade do escoamento e a hipótese de Boussinesq, além de ser realizada a decomposição de Reynolds. Dessa maneira, observa-se que somente as componentes médias da velocidade estão presentes.

As equações de conservação de massa (11 e 13), no caso incompressível, se transformam em equações de conservação de fração volumétrica. O domínio está preenchido pelos fluidos, de forma que a soma das frações volumétricas é um (equação (14)). Ainda, o campo de pressão é compartilhado pelos fluidos (equação (15)).

Fase líquida

$$\frac{\partial(\alpha_l U_{il})}{\partial t}+\frac{\partial(\alpha_l U_{il} U_{jl})}{\partial x_j}=-\frac{\alpha_l}{\rho_l}\frac{\partial p}{\partial x_i}+\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\alpha_l \nu_{ef}\left(\frac{\partial U_{jl}}{\partial x_i}+\frac{\partial U_{il}}{\partial x_j}\right)\right]+\alpha_l \rho_l g+F_{\text{int}} \tag{10}$$

$$\frac{\partial(\alpha_l)}{\partial t}+\frac{\partial(\alpha_l U_{il})}{\partial x_i}=S \tag{11}$$

Fase gasosa

$$\frac{\partial(\alpha_g U_{ig})}{\partial t}+\frac{\partial(\alpha_g U_{ig} U_{jg})}{\partial x_j}=-\frac{\alpha_g}{\rho_g}\frac{\partial p}{\partial x_i}+\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\alpha_g \nu_{ef}\left(\frac{\partial U_{jg}}{\partial x_i}+\frac{\partial U_{ig}}{\partial x_j}\right)\right]+\alpha_g \rho_g g-F_{\text{int}} \tag{12}$$

$$\frac{\partial(\alpha_g)}{\partial t}+\frac{\partial(\alpha_g U_{ig})}{\partial x_i}=S \tag{13}$$

Relações auxiliares

$$\alpha_l+\alpha_g=1 \tag{14}$$

$$p_l=p_g=p \tag{15}$$

Ao considerar que o escoamento é turbulento e a presença de forças interfaciais entre as fases, torna-se necessária a inclusão de modelos que descrevam tais fenômenos.

Foi analisada a influência de tais modelos a fim de determinar uma metodologia capaz de reproduzir numericamente o escoamento do modelo físico. Foram empregados, conforme a figura 35, diferentes modelos de turbulência, coeficientes de arrasto e forças de não-arrasto.

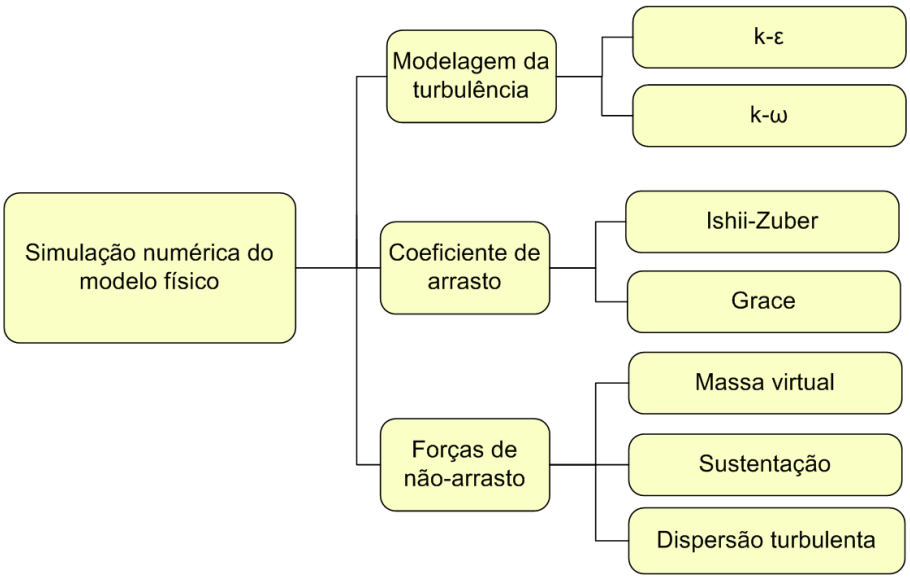

Figura 35 – Modelos utilizados na solução do escoamento.

Ao realizar a simulação utilizando os modelos de cada ramo da figura 35, optou-se por fixar os modelos dos ramos restantes, de forma a verificar isoladamente a influência de cada um.

Tabela 6 – Combinações dos modelos analisadas

	Modelagem de turbulência	Coeficiente de arrasto	Forças de não-arrasto
Modelagem da turbulência	k-ε k-ω	Grace	Nenhuma
Coeficiente de arrasto	k-ε	Ishii-Zuber Grace	Nenhuma
Forças de não-arrasto	k-ε	Grace	Sustentação Massa virtual Dispersão turbulenta

3.4.3.1 Modelagem da turbulência

Tanto k-ε quanto k-ω se encaixam sob a categoria de modelos a duas equações. A diferença fundamental entre eles é a forma de cálculo da viscosidade turbulenta μ_t. Isso decorre de diferenças conceituais na determinação da dissipação da energia cinética turbulenta (k), o que leva a escolha de diferentes parâmetros na sua descrição (ε e ω).

Existem diversas variantes de cada um destes modelos. Neste trabalho, são empregados modelos já implementados no pacote numérico Ansys CFX 11.0 (Ansys, 2007). As equações para cada um deles são apresentadas a seguir.

Modelo k-ε

$$\frac{\partial k}{\partial t}+\frac{\partial (U_i k)}{\partial x_i}=\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_i}\right]+\frac{P_k}{\rho}-\varepsilon \tag{16}$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}+\frac{\partial (U_i \varepsilon)}{\partial x_i}=\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i}\right]+\frac{\varepsilon}{\rho k}\left(C_{\varepsilon 1}P_k-\rho C_{\varepsilon 2}\varepsilon\right) \tag{17}$$

$$P_k=\mu_t\frac{\partial U_j}{\partial x_i}\left(\frac{\partial U_j}{\partial x_i}+\frac{\partial U_i}{\partial x_j}\right) \tag{18}$$

$$\mu_t=C_\mu \rho\frac{k^2}{\varepsilon} \tag{19}$$

$$\sigma_k=1 \tag{20}$$

$$\sigma_\varepsilon=1{,}3 \tag{21}$$

$$C_{\varepsilon 1}=1{,}44 \tag{22}$$

$$C_{\varepsilon 2}=1{,}92 \tag{23}$$

$$C_\mu=0{,}09 \tag{24}$$

Modelo k-ω

$$\frac{\partial k}{\partial t}+\frac{\partial(U_i k)}{\partial x_i}=\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k^*}\right)\frac{\partial k}{\partial x_i}\right]+\frac{P_k}{\rho}-\beta' k\omega \tag{25}$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t}+\frac{\partial(U_i \omega)}{\partial x_i}=\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_\omega}\right)\frac{\partial \omega}{\partial x_i}\right]+\frac{\omega}{\rho k}\left(\gamma P_k-\rho\beta\omega\right) \tag{26}$$

$$P_k=\mu_t\frac{\partial U_j}{\partial x_i}\left(\frac{\partial U_j}{\partial x_i}+\frac{\partial U_i}{\partial x_j}\right) \tag{27}$$

$$\mu_t=\rho\frac{k}{\omega} \tag{28}$$

$$\beta'=1{,}3 \tag{29}$$

$$\sigma_k^*=2 \tag{30}$$

$$\sigma_\omega=2 \tag{31}$$

$$\gamma=0{,}555 \tag{32}$$

$$\beta=0{,}075 \tag{33}$$

A comparação entre dois diferentes modelos de turbulência é proposta a fim de quantificar a importância da turbulência da fase contínua na taxa de circulação e na distribuição de gás na perna de subida.

Foram realizados testes preliminares utilizando os dois modelos de turbulência. (CONTINI et al., 2007). Observou-se algumas diferenças na distribuição de gás na perna de subida mas não foi possível quantificar a influência dos modelos na solução.

3.4.3.2 Coeficiente de arrasto

O termo de troca de quantidade de movimento entre as fases (F_{int} da equação (10 e 12)) é composto pela força de arrasto e pelas forças de não-arrasto, conforme a equação (34). A forma da força de arrasto implementada no *software* empregado na simulação é apresentada na equação (35).

$$F_{\text{int}} = F_D + F_{ND} \tag{34}$$

$$F_D = \frac{C_D}{8}\frac{\alpha_l \rho_l}{d_b} U_{rel} \left| U_{rel} \right| \tag{35}$$

O coeficiente de arrasto, como discutido anteriormente, apresenta dependência em relação às características do escoamento. No presente trabalho, dois diferentes métodos de cálculo para C_D foram empregados (figura 35).

O modelo de Grace (Ansys, 2007) é um modelo para C_D concebido especificamente para o sistema ar-água. O cálculo do valor do coeficiente é realizado através das equações (36) a (39).

$$C_D = \frac{4}{3}\frac{g d_b (\rho_l - \rho_g)}{U_{term}{}^2 \rho_l} \tag{36}$$

$$U_{term} = \frac{\mu_l}{\rho_l d_b} M^{-0,149} (J - 0,857) \tag{37}$$

$$J = \begin{cases} 0,94 H^{0,751}, \text{se } 2 < H \leq 59,3 \\ 3,42 H^{0,441}, \text{se } H > 59,3 \end{cases} \tag{38}$$

$$H = \frac{4}{3} EoM^{-0,149} \left(\frac{\mu_l}{\mu_{ref}} \right)^{-0,14} \tag{39}$$

A viscosidade de referência (μ_{ref}) utilizada é a da água, cujo valor é 0,0009 kg m^{-1} s^{-1}. Recordando que no presente trabalho as propriedades físicas dos fluidos foram consideradas constantes e observando que o modelo de Grace não depende do campo de velocidade ou pressão, conclui-se que o coeficiente permanece constante para quaisquer vazões de ar – aproximadamente 1,14.

O modelo de Ishii-Zuber (equações (40) até (48)) para cálculo do coeficiente, por sua vez, pretende possuir uma aplicabilidade mais ampla - desde sistemas de partículas sólidas até escoamento com bolhas (ISHII; ZUBER, 1979).

O cálculo de C_D nesse modelo é dependente do regime de formato da fase dispersa. A implementação presente no software utilizado contempla três classes, referentes à deformação e à distribuição da fase dispersa.

$$C_D(esfera) = máximo\,(\frac{24}{\mathrm{Re}_m}(1+0{,}15\,\mathrm{Re}_m^{\;0{,}687}),\,0{,}44) \tag{40}$$

$$\mathrm{Re}_m = \frac{\rho_l\,|\,U_{rel}\,|\,d_b}{\mu_m} \tag{41}$$

$$C_D(elipse) = \frac{2}{3}E(\alpha_g)Eo^{0,5} \tag{42}$$

$$E(\alpha_g) = \frac{(1+17.76f(\alpha_g)^{6/7})}{18.67f(\alpha_g)} \tag{43}$$

$$f(\alpha_g) = \frac{\mu_l}{\mu_m}(1-\alpha_g)^2 \tag{44}$$

$$\frac{\mu_m}{\mu_l} = \left(1-\alpha_g\right)^{-2,5\mu_*} \tag{45}$$

$$\mu_* = \frac{\mu_g + 0.4\mu_l}{\mu_g + \mu_l} \tag{46}$$

$$C_D(cap) = \frac{8}{3}(1-\alpha_g)^2 \tag{47}$$

$$C_D = \begin{cases} = C_D(esfera),\ \text{se}\ C_D(esfera) > C_D(elipse) \\ = mínimo\,(C_D(elipse), C_D(cap)),\ \text{se}\ C_D(elipse) > C_D(esfera) \end{cases} \tag{48}$$

Dessa maneira, observa-se que o modelo de Ishii-Zuber permite variações de C_D não observadas no modelo de Grace.

3.4.3.3 Forças de não-arrasto

As forças de não-arrasto cuja influência foi considerada no escoamento são elencadas no ramo inferior da figura 35. A expressão de cada uma é apresentada pelas equações (49) a (51) (massa virtual, sustentação e dispersão turbulenta, respectivamente).

$$F_{MV} = \alpha \rho_l C_{MV} \frac{dU_{rel}}{dt} \tag{49}$$

$$F_S = \alpha \rho_l C_S (U_{rel}) \times (\nabla \times U_l) \tag{50}$$

$$F_{DT} = C_{TD} C_D \frac{\nu_t}{Sc_t} \left(\frac{\nabla \alpha_g}{\alpha_g} - \frac{\nabla \alpha_l}{\alpha_l} \right) \tag{51}$$

Foram realizados testes preliminares para averiguar qual o impacto da presença de cada uma das forças na solução do escoamento. Foram selecionadas as vazões de gás de 50l/min, 350l/min e 500 l/min e resolvidos os escoamentos. No caso da força de dispersão turbulenta, as vazões de gás entre 50 l/min até 500 l/min foram testadas, visto que em alguns testes anteriores sugeriram um impacto mais acentuado desta. A importância dessas forças foi ponderada através de seu impacto na taxa de circulação.

A fim de verificar a influência dos coeficientes foi testado para cada força (à exceção da força de dispersão turbulenta) um conjunto de coeficientes, cujos valores foram extraídos de literatura sobre modelagem física (MÉNDEZ et al, 2005; SICORSKI, 2007). Esses valores são apresentados na tabela 7.

Tabela 7 – Coeficientes utilizados para cada força de não-arrasto.

Força	**Coeficientes utilizados**
Massa virtual	0,05 – 0,1 – 0,2
Sustentação	0,02 – 0,05 – 0,1
Dispersão turbulenta	1

O coeficiente de dispersão turbulenta foi mantido unitário em vista da literatura consultada (FRANK et al., 2008; Ansys, 2007).

3.5 SOLUÇÃO NUMÉRICA

A solução do problema foi realizada utilizando o pacote numérico Ansys CFX 11.0, que emprega o método dos volumes finitos (Ansys, 2007). A solução do sistema de equações algébricas oriundo da discretização das equações e condições de contorno e iniciais é realizada de forma acoplada. Desta maneira, as equações para as velocidades e pressão são

resolvidadas de forma simultânea, em contraste com o método de solução segregada, muito citada na literatura (PATANKAR, 1980; MALISKA, 2004). Utilizou-se uma formulação estacionária de falso transiente.

Critério de convergência

A convergência do problema em termos de resíduos das equações provou-se muito difícil. Como discutido no Apêndice I, o escoamento no modelo físico possui claras características transientes. Tanto sob a formulação transiente quanto sob a estacionária os resíduos observados eram elevados (entre 10^{-4} e 10^{-3}). No entanto, ao analisar quais regiões do escoamento que apresentaram os maiores resíduos, verificou-se que isso ocorria principalmente na região próxima à superfície da água, provavelmente devido às suas oscilações.

O efeito de tais oscilações sobre a taxa de circulação pôde ser visto pelo fato de que, durante o processo de solução, a taxa de circulação não apresentava valor constante, mas variava ao redor de um valo médio (figura 36).

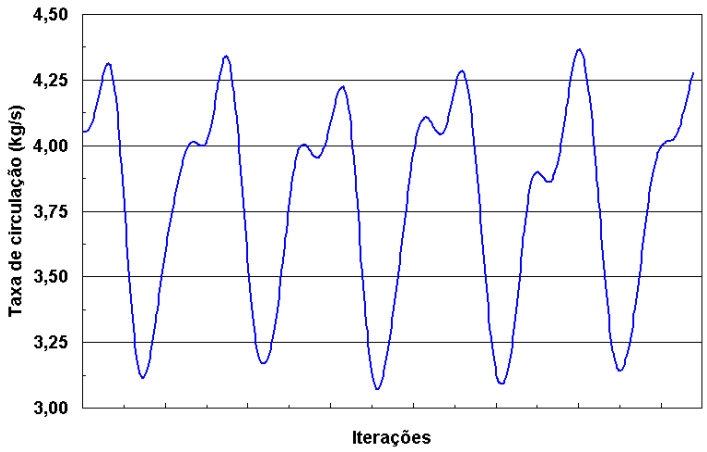

Figura 36 – Oscilações típicas observadas na taxa de circulação durante o processo de solução numérica.

Assim, para cada escoamento estudado monitorou-se a taxa de circulação durante a solução. Ao atingir um padrão de oscilação estacionário da taxa de circulação (como o da figura 36), o escoamento era resolvido por mais 1000 iterações (com passo de tempo do falso

transiente fixo em 0,005 s), a fim de obter um número de pontos a partir do qual a taxa de circulação média era calculada.

3.6 PÓS-PROCESSAMENTO

A visualização dos resultados da simulação numérica utilizou o pós-processador Ansys CFX 11.0. Os gráficos foram construídos por meio do Microsoft Office Excel 2003.

A maior parcela do pós-processamento visa caracterizar o escoamento na perna de subida, visto que as interações que lá ocorrem são preponderantes para a taxa de circulação. Na figura 37 são localizados os planos nos quais as variáveis do escoamento são visualizadas.

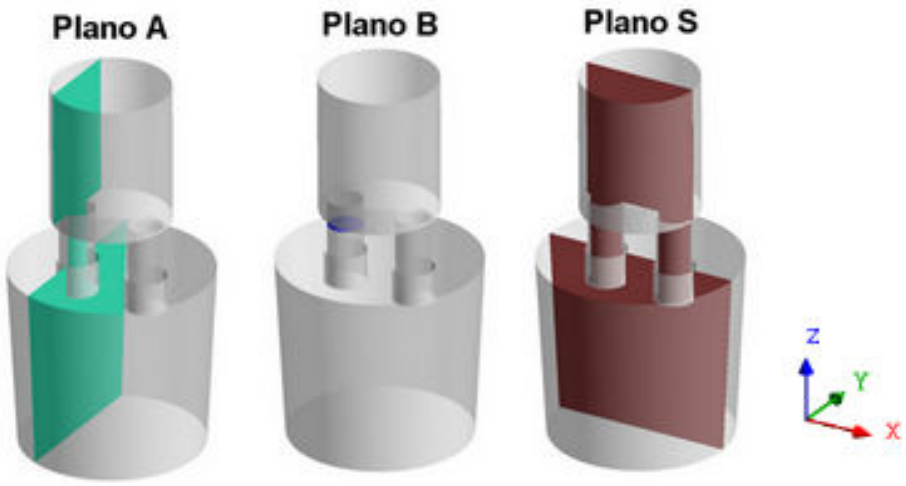

Figura 37 – Localização dos planos de visualização do escoamento.

A tabela 8 especifica mais detalhadamente a localização e variáveis de interesse em cada plano.

Tabela 8 – Localizações dos planos de análise e variáveis observadas.

Plano	**Localização**	**Variáveis de interesse**
A	Plano yz passando pelo centro da perna de subida e interceptando injetor	Velocidade Fração volumétrica de gás Viscosidade turbulenta Coeficiente de arrasto
B	Plano xy na perna de subida, 5 cm acima da altura de injeção	Fração volumétrica de gás
S	Plano xz passando pelo plano de simetria	Velocidade

Todas as variáveis são visualizadas sobre a geometria inteira (através de uma reflexão do domínio), para melhor entendimento. Os vetores são apresentados com tamanho uniforme (normalizados) e coloridos conforme sua norma.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 ESCOAMENTO NA PANELA

De forma geral o padrão do escoamento ilustrado na figura 38 não se modifica muito em função da vazão de gás e dos diferentes modelos empregados na simulação.

A visualização dos vetores de velocidade no plano S (figura 38) na panela mostra um campo qualitativamente muito próximo aos trabalhos numéricos de Tsujino et al. (1989) e experimentais de Wei e Hu (2005). São observadas duas recirculações principais: uma adjacente ao fluxo da perna de descida e outra na direção da perna de subida.

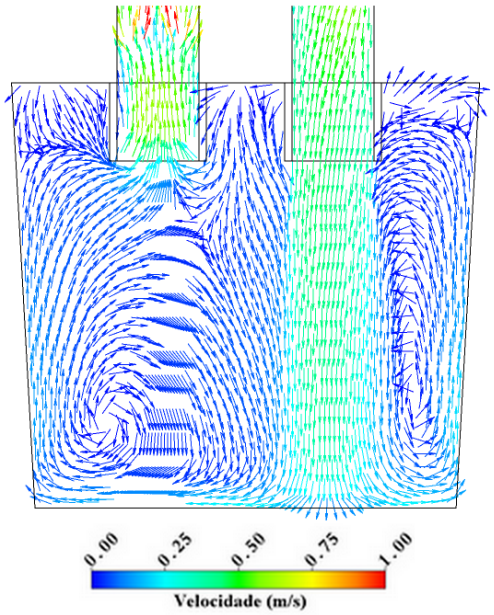

Figura 38 – Perfil de velocidade sobre o plano de simetria (S) na região da panela, com vazão de 300l/min.

4.2 TAXA DE CIRCULAÇÃO

4.2.1 Influência do modelo de turbulência

A influência do modelo de turbulência na taxa de circulação está ilustrada na figura 39.

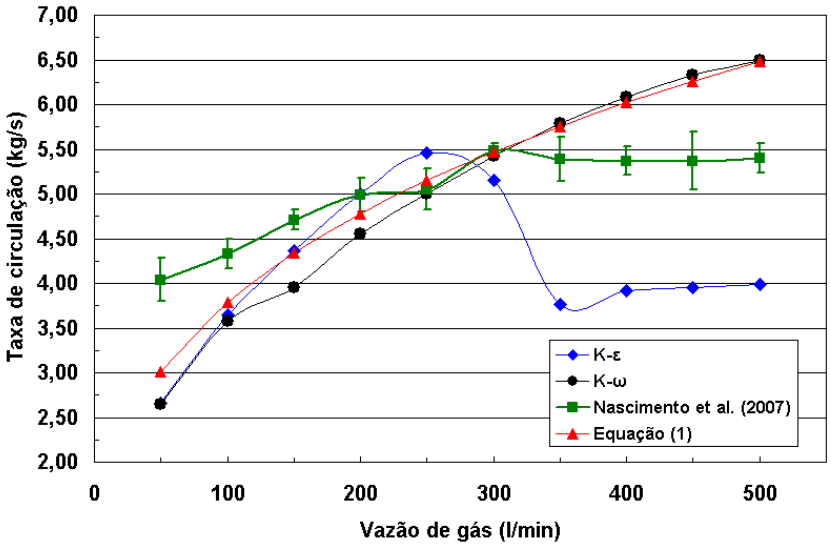

Figura 39 – Taxa de circulação em função de vazão de gás. Resultados numéricos (k-ε e k-ω), da equação (1) e do experimento de Nascimento et. al (2007). Simulação numérica com coeficiente de arrasto de Grace e sem forças de não-arrasto.

Evidencia-se que a taxa de circulação calculada utilizando os modelos k-ε e k-ω apresenta uma diferença significativa em relação à medida no modelo físico por Nascimento et al. (2007). Observa-se também uma diferença pronunciada entre as curvas obtidas numericamente.

Ambas as soluções apresentaram comportamentos similares na região de baixa vazão (50l/min – 150l/min) mas, ao atingir vazões maiores do que 250l/min, a taxa do modelo k-ε cai abruptamente, enquanto a do modelo k-ω permanece crescendo monotonamente. A causa disso é identificada ao analisar a ocupação da perna de subida pelo gás, vista na figura 40.

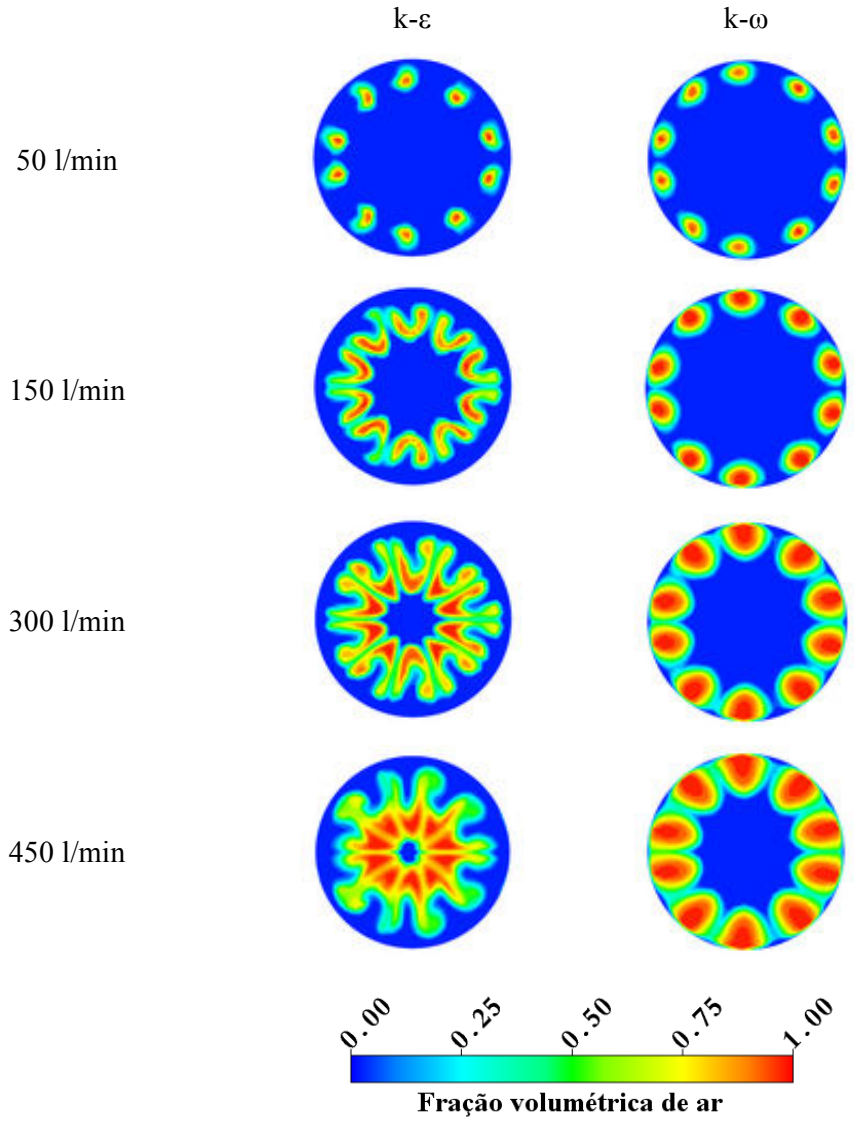

Figura 40 – Distribuição de gás na perna de subida (plano B) para os modelos de turbulência k-ε e k-ω, com vazões de 50l/min, 150l/min, 300l/min e 450 l/min.

A comparação da penetração do gás na perna de subida mostra que a distribuição de gás na baixa vazão é similar. No entanto, à medida que a vazão de gás cresce, sua presença no centro da perna aumenta no modelo k-ε, ao passo que no modelo k-ω o gás permanece próximo à parede para qualquer vazão. A figura 41 mostra a comparação entre os resultados do k-ε, k-ω e fotografias da perna de subida. Frisa-se que não foi possível quantificar precisamente a fração volumétrica de gás na perna nas fotos, mas elas fornecem indicadores sobre a precisão das soluções numéricas.

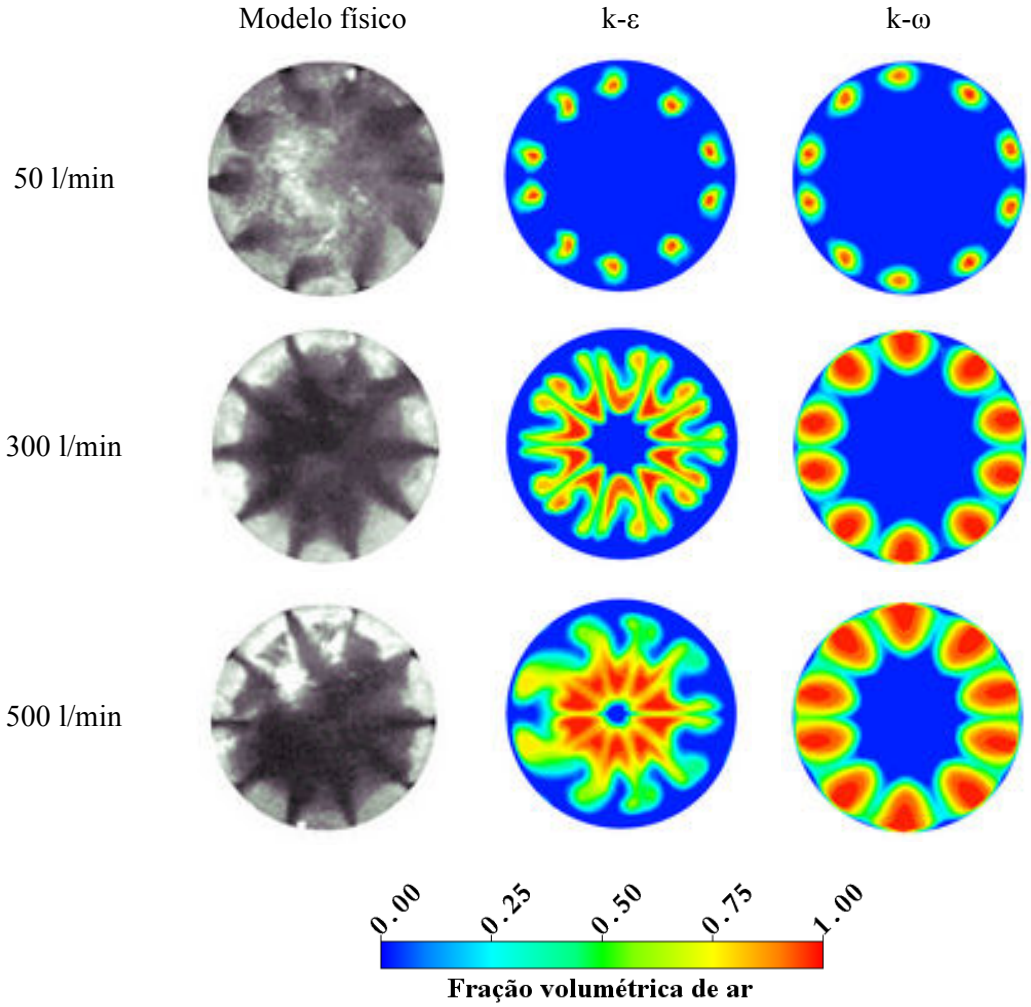

Figura 41 – Ocupação de gás na perna de subida: fotos do modelo físico e simulação numérica, para vazões de 50 l/min, 300 l/min e 500 l/min.

Aparentemente, a distribuição de gás obtida pelo modelo k-ε é mais próxima do experimento do que a obtida pelo k-ω. Ela afeta a taxa de circulação pela sua influência no fluxo de água na perna de subida. A figura 42 demonstra tal fenômeno.

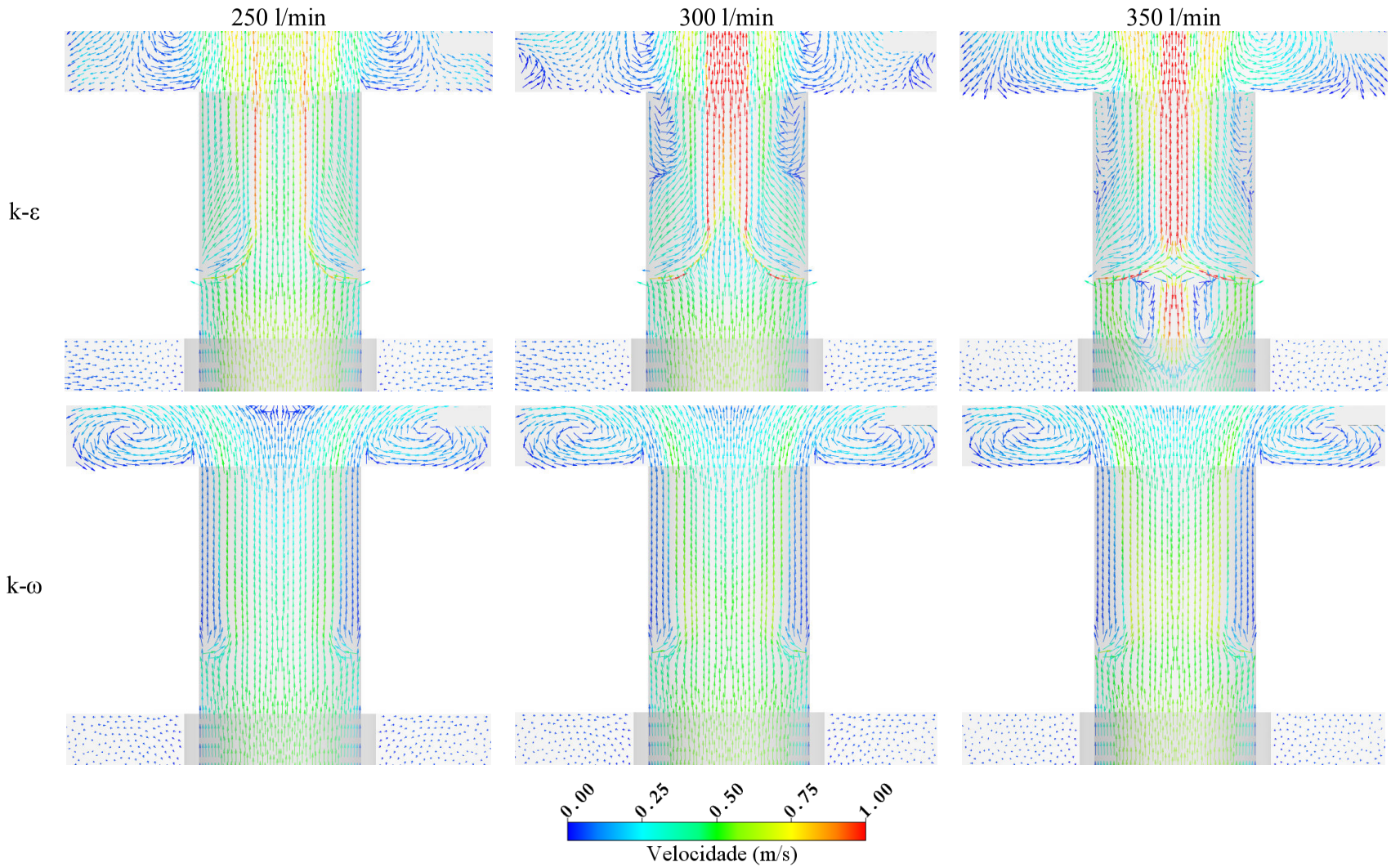

Figura 42 – Vetores de velocidade da fase líquida no plano A para as vazões de 250 l/min, 300 l/min e 350 l/min; comparativo entre os dois modelos de turbulência.

Observa-se no escoamento obtido com k-ε que a velocidade da água na direção do centro da perna cresce com a vazão de gás. Ao atingir a vazão de 300 l/min, a água é projetada para o centro da perna de forma a ocorrer um choque entre os dois fluxos opostos. Esse choque acaba criando uma recirculação, no sentido descendente da perna de subida, como visto na vazão de 350 l/min (figura 43).

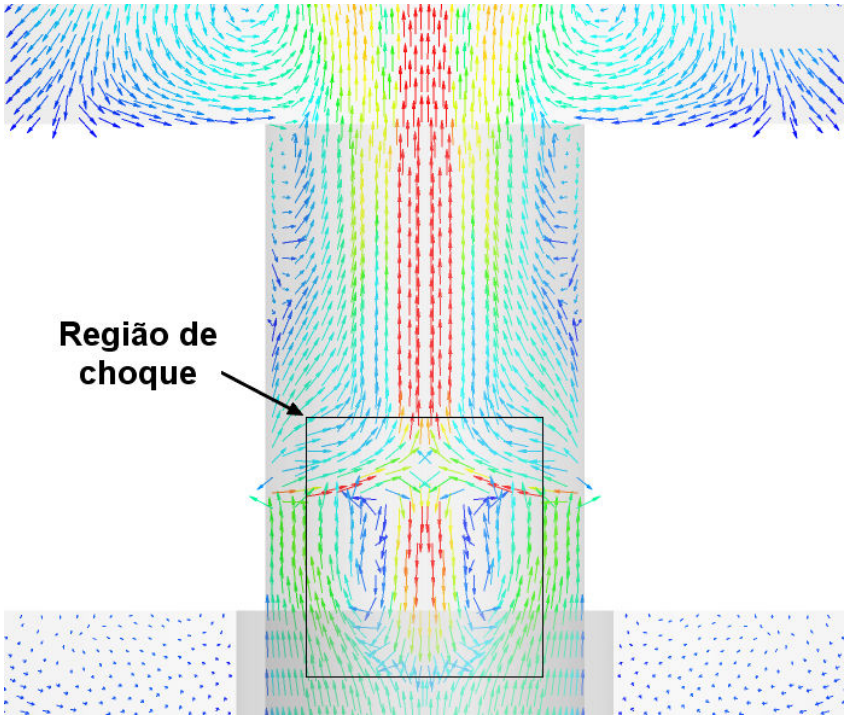

Figura 43 – Detalhe dos vetores de velocidade da água na perna de subida (plano A), vazão de 350 l/min, modelo k-ε.

Tal fenômeno ocorre em vazões coincidentes à saturação observada na figura 39 para o modelo k-ε.

Embora seja uma espécie de saturação da taxa de circulação, o comportamento não reproduz a saturação do modelo físico. Como visto na figura 39, a taxa no modelo físico pára de crescer a partir de 300l/min, mas não cai como observado na simulação. Dessa maneira, conclui-se que o mecanismo de saturação observado numericamente não pode ser o mesmo que ocorre no modelo físico.

Já no escoamento calculado com k-ω, nas vazões de gás mostradas na figura 42 (e nem em vazões maiores) ocorre o choque descrito acima – o gás permanece sempre próximo às paredes.

É necessário retornar às diferenças entre k-ε e k-ω a fim de elucidar a origem de soluções tão distintas. Nas equações (14) e (15) observa-se a diferença de definição da viscosidade turbulenta entre os modelos testados.

O campo de viscosidade turbulenta na região da perna de subida (figura 44) mostra que os valores calculados através do k-ω são até 5 vezes maiores do que os do modelo k-ε, principalmente nas proximidades dos injetores.

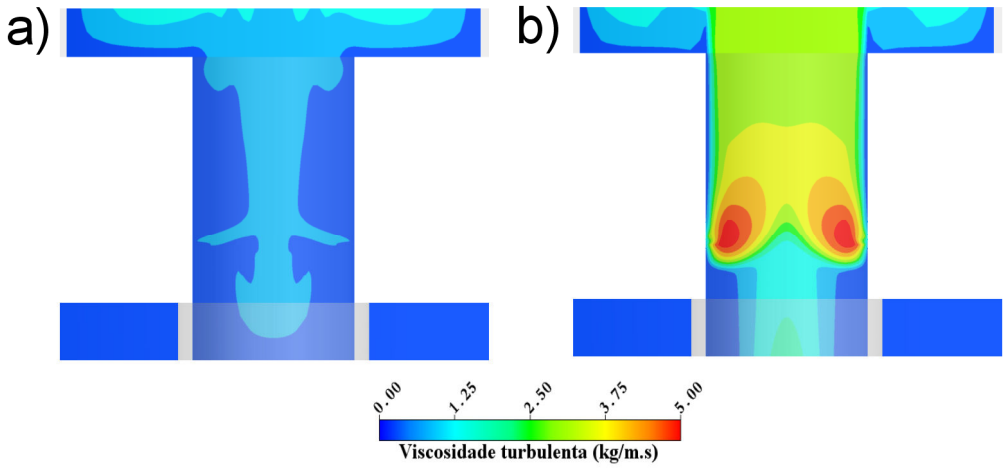

Figura 44 – Viscosidade turbulenta da água na perna de subida (plano A), vazão de 350 l/min: a) modelo k-ε; b) modelo k-ω.

Assim é possível compreender a razão da menor penetração do gás e a ausência da saturação no primeiro modelo: a alta viscosidade turbulenta faz com que a água responda de forma mais fraca ao ganho de quantidade de movimento na direção radial, constituindo uma "barreira" para o gás, que fica aprisionado próximo à parede. Dessa maneira, a constrição da área de passagem da água não ocorre.

Ainda na figura 39, vê-se que a taxa calculada empregando o k-ω é bastante próxima à obtida com o emprego da equação (1), de Kuwabara et al. (1988). Isso aponta para a semelhança entre as hipóteses de Kuwabara et al. (1988) e as características da solução numérica. Em ambos, não há um mecanismo que provoque a saturação da taxa de circulação.

Na região de vazão entre 50l/min e 150l/min, ambos os modelos calculam taxas de circulação menores do que as medidas experimentalmente. Isso pode ocorrer no caso de haver uma transferência de quantidade de movimento entre as fases menor do que no modelo físico.

Em vista do apresentado anteriormente, conclui-se que a solução obtida com o uso dos modelos de turbulência estudados não permite reproduzir a relação entre taxa de circulação e

vazão de gás medida no experimento. Do ponto de vista de distribuição de gás na perna de subida, a predição do modelo k-ε é mais apurada, ao menos de forma qualitativa.

No escoamento calculado utilizando o modelo k-ε foi possível observar a saturação da taxa de circulação e relacioná-la com a distribuição de gás na perna de subida, mas sem, no entanto, reproduzir os dados experimentais.

4.2.2 Influência do coeficiente de arrasto

A figura 45 ilustra a diferença das taxas de circulação calculadas com os dois coeficientes de arrasto empregados (Ishii-Zuber e Grace) e em relação ao experimento.

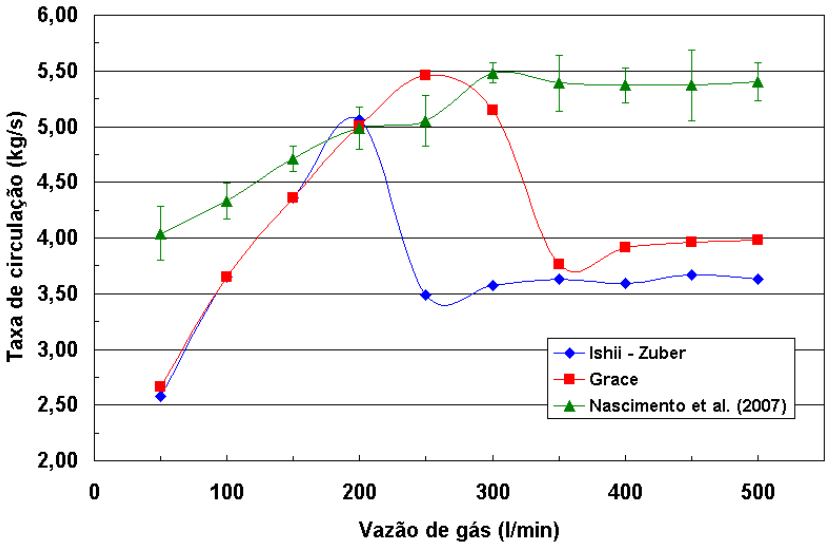

Figura 45 – Taxa de circulação em função da vazão de gás para os coeficientes de arrasto de Ishii-Zuber, Grace e do experimento. Modelo de turbulência k-ε, sem forças de não-arrasto.

Na figura 45 fica evidente o fenômeno de saturação já observado na figura 37 (curva do modelo k-ε). No entanto, a vazão crítica a partir da qual a taxa de circulação começa a cair se modifica de 200l/min para 250l/min ao alterar o coeficiente de arrasto.

Essa modificação na vazão crítica é um reflexo direto da diferença de penetração do gás na direção do centro da perna, como pode ser visto na figura 46. Como discutido anteriormente, em ambos os casos ocorre o choque do fluxo de água, mas para vazões distintas.

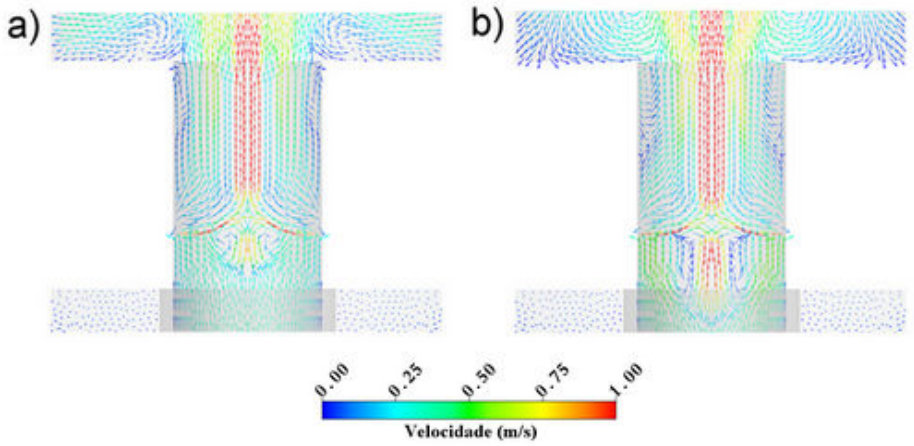

Figura 46 – Vetores de velocidade da fase líquida na perna de subida (plano A): a) coeficiente de arrasto Ishii-Zuber, vazão de 250 l/min; b) coeficiente de arrasto Grace, vazão de 350 l/min.

Na seção 3.4.3.2, mostrou-se que o cálculo de C_D nos modelos estudados é bastante diferente. De fato, ele pode estar relacionado ao comportamento das curvas da figura 45. Na figura 47, observa-se o coeficiente de arrasto na região próxima aos injetores.

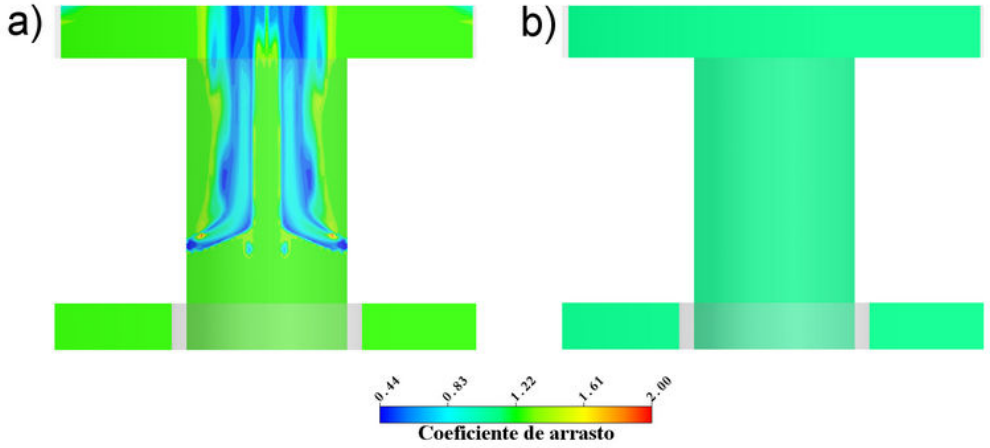

Figura 47 – Coeficiente de arrasto (C_D) na perna de subida (plano A): a) coeficiente de arrasto Ishii-Zuber, vazão de 250 l/min; b) coeficiente de arrasto Grace, vazão de 350 l/min.

O coeficiente calculado através do modelo de Grace é constante (aproximadamente 1,14), enquanto o calculado através de Ishii-Zuber possui forte dependência da fração volumétrica de ar, apresentando uma redução na região de cone gasoso.

Essa redução é a razão da diferença de penetração de gás entre os dois modelos. A queda de C_D permite que o gás perca menos velocidade e atinja o centro da perna mesmo com

uma vazão mais baixa de gás. É importante ressaltar que a viscosidade efetiva calculada para os escoamentos com o modelo de Grace e com Ishii-Zuber foi praticamente a mesma.

À exceção da diferença na vazão crítica, a relação entre taxa de circulação e vazão de gás é bastante similar para os dois modelos, apresentado os resultados com o coeficiente de Grace velocidades ligeiramente superiores às de Ishii-Zuber.

Assim, depreende-se que entre os dois modelos analisados não existe razão que aponte para maior correção de um em relação ao outro, visto que as mesmas deficiências são observadas em ambos.

4.2.3 Influência das forças de não-arrasto

4.2.3.1 Força de massa virtual

O efeito da presença da força de massa virtual sobre a taxa de circulação é ilustrado na figura 48.

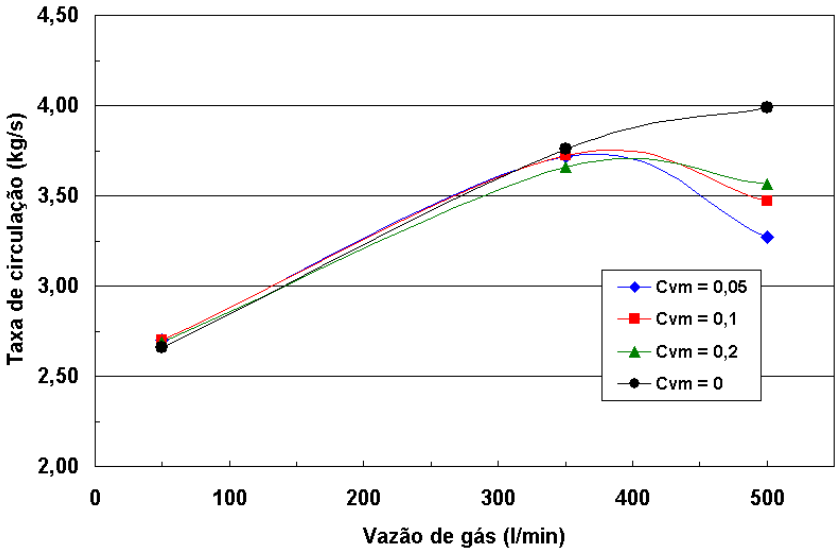

Figura 48 – Taxa de circulação em função da vazão de gás, sem a presença da força de massa virtual e com três diferentes coeficientes (C_{VM}). Modelo de turbulência k-ε, coeficiente de arrasto Grace.

A influência da força mostrou-se desprezível para as vazões de 50l/min (baixa vazão) e 350l/min para qualquer coeficiente C_{VM}. Na vazão mais alta, entretanto, observou-se uma queda na taxa de circulação. A força de massa virtual age, conforme equação (31), de maneira a frear a bolha enquanto há aceleração relativa. Assim, seria possível uma redução na penetração do gás na perna de subida e conseqüente aumento na taxa de circulação, com a atenuação do choque visto na figura 43. Não foi possível interpretar o motivo da redução da taxa de circulação.

Assim, considerar a presença da força não contribui para a correção da solução numérica e, portanto, é desnecessária na modelagem do escoamento.

4.2.3.2 Força de sustentação

O resultado da análise preliminar sobre a força de sustentação é visto na figura 49.

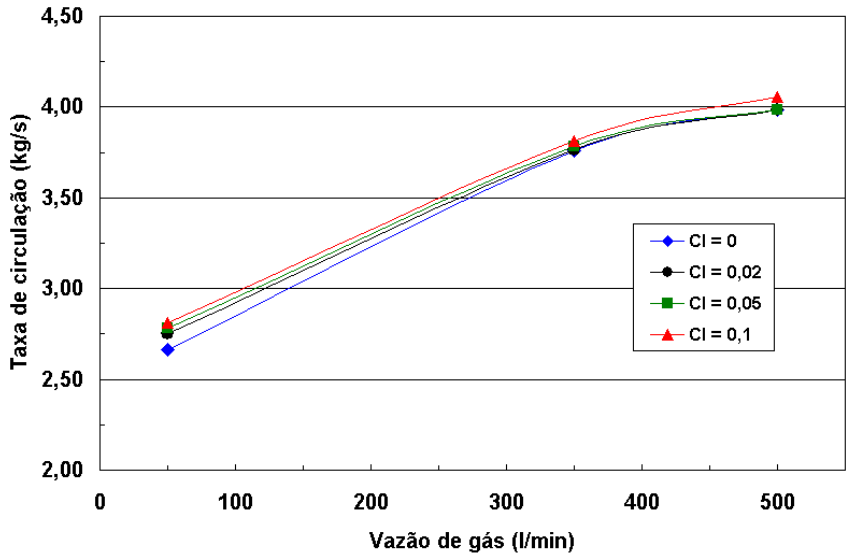

Figura 49 – Taxa de circulação em função da vazão de gás, sem a presença da força de sustentação e com três diferentes coeficientes (Cl). Modelo de turbulência k-ε, coeficiente de arrasto Grace.

Observa-se que a influência da sustentação na taxa de circulação é irrisória. Também não foi verificado efeito considerável na ocupação de gás na perna de subida. Dessa maneira, conclui-se que tal força pode ser desprezada no presente estudo.

4.2.3.3 Força de dispersão turbulenta

O resultado da análise da força de dispersão turbulenta é ilustrado na figura 50.

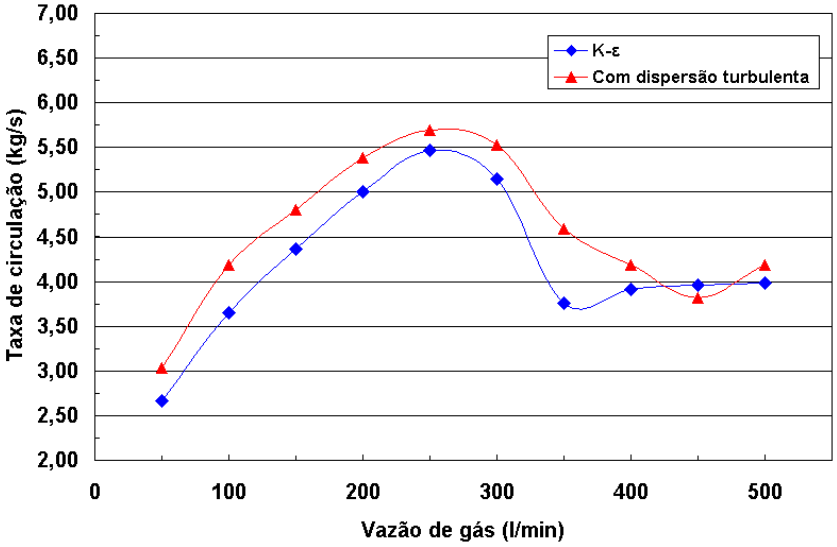

Figura 50 – Taxa de circulação em função da vazão de gás, com e sem a presença da força de dispersão turbulenta. Modelo de turbulência k-ε, coeficiente de arrasto Grace.

Ao considerar a presença de tal força na solução, verificou-se um incremento na taxa de circulação para praticamente todas as vazões de gás. No entanto, ela não foi capaz de alterar o mecanismo de saturação. Isso se deve ao fato de que a distribuição de gás na perna de subida não sofreu alterações significativas. Assim, foi apurado como pequeno impacto desta força na solução.

5 CONCLUSÕES

Nesta dissertação foram apresentadas as etapas da simulação numérica do escoamento em um modelo físico de RH, com vistas à validação de uma metodologia que reproduza as principais características deste.

Como discutido na revisão bibliográfica, a complexidade dos escoamentos bifásicos acaba impondo a introdução de diversos modelos, cujas aplicabilidades devem ser analisadas caso a caso.

Ao adotar tal filosofia, o trabalho desenvolveu-se de maneira a explorar a dependência entre a solução numérica e modelos comumente empregados nesse tipo de pesquisa. Assim, o estudo foi dividido em três parcelas: estudo da modelagem de turbulência, do coeficiente de arrasto e da influência das forças de não-arrasto.

Na análise da modelagem da turbulência, dois populares modelos a duas equações (k-ε e k-ω) foram empregados. Os resultados, tanto qualitativos quanto quantitativos, mostraram grande diferença entre as soluções obtidas.

Ao modificar a segunda equação de fechamento (no caso, o cálculo da dissipação de energia turbulenta), altera-se de forma radical a viscosidade turbulenta da fase contínua. Um dos efeitos mais visíveis disso foi a diferença de penetração de gás na direção do centro da perna. Como esperado, tal mudança refletiu-se diretamente na relação da taxa de circulação com a vazão de gás – a solução obtida empregando o primeiro modelo apresentou uma espécie de fenômeno de saturação de tal taxa. Já no caso do modelo k-ω, a taxa de circulação aumenta de forma contínua com a vazão de gás.

Também do ponto de vista da fração volumétrica de gás, o modelo k-ω apresenta um comportamento distante do observado no modelo físico: a distribuição de gás na perna de subida permanece concentrada próxima à parede, em desacordo com fotos do modelo físico.

Ainda, é interessante ressaltar o desacordo entre o presente trabalho e o de Wei e Hu (2005): os últimos observaram saturação da taxa de circulação mesmo sem a presença de gás (ou baixíssima fração) no centro da perna, enquanto o autor somente relata fenômeno similar quando o gás está presente na região.

Embora a solução via k-ε tenha obtido resultados mais próximos do escoamento real no quesito fração volumétrica de gás, a taxa de circulação calculada também não reproduz as medições experimentais. O mecanismo de saturação observado na simulação numérica não dá indicativos de reproduzir o fenômeno do modelo físico, pois a saturação do último

caracteriza-se por uma taxa de circulação indiferente ao acréscimo da vazão de gás, e não por sua redução, como visto na solução computacional.

Assim, o estudo da turbulência pôde apenas apontar a inadequação do modelo k-ω na solução do escoamento em questão. Não é possível precisar o potencial do modelo k-ε, em vista das deficiências observadas.

A comparação entre os dois coeficientes de arrasto empregados mostrou pequenas diferenças nas soluções obtidas. A diferença do coeficiente, no sentido de minorar o valor calculado através do modelo de Ishii-Zuber, implicou em uma maior penetração de gás para este e, consequentemente, a ocorrência da saturação da taxa de circulação em uma vazão de gás mais baixa. À exceção disso, não existem indícios que apontem para uma grande dependência deste tipo de simulação numérica em relação a tal parâmetro.

O estudo das forças de não-arrasto foi realizado de forma bastante dirigida e restrita, em vista de testes anteriormente realizados pelo autor e que indicavam pequena influência dessas forças.

De fato, observou-se que, de maneira geral, a influência dessas forças (medida através de alterações na taxa de circulação) é diminuta. Maior destaque foi dado para a força de dispersão turbulenta, visto que sua inclusão no modelo ocasionou acréscimo na taxa de circulação. No entanto, o comportamento de saturação não se alterou nos escoamentos solucionados com a consideração das forças de não-arrasto.

Em síntese, as conclusões da análise dos modelos são:

- A modelagem de turbulência da fase contínua desempenha papel fundamental na simulação numérica do RH, por afetar grandemente a trajetória do gás na perna de subida e, consequentemente, a taxa de circulação.
- As alterações do coeficiente de arrasto não provocam grandes alterações na solução do escoamento.
- As forças de não-arrasto contribuem fracamente para a correção da simulação numérica e podem, portanto, ser desprezadas no escoamento estudado.

A comparação entre os resultados de modelagem física de Nascimento et al. (2007) e os obtidos numericamente pelo autor levam a concluir que a metodologia apresentada não é capaz de reproduzir os aspectos essenciais – como taxa de circulação e distribuição de gás na perna de subida – do escoamento no modelo físico.

6 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Como principais sugestões para a continuidade da modelagem numérica do RH, são ressaltadas as seguintes questões:

- Estudo da influência das condições de entrada – velocidade e densidade – do gás através do bico de injeção. Isso se deve à possibilidade de compressão dos gases injetados, o que pode levar a alterações nas velocidades de calculadas através da equação (9).
- Emprego de modelos de turbulência alternativos, como os modelos de fechamento de 2ª ordem. Em todas as configurações estudadas, a taxa de circulação calculada numericamente ficou aquém da experimental em baixas vazões de gás. Tendo em vista a forte dependência da solução em relação à viscosidade turbulenta, é possível que modelar a turbulência com modelos mais sofisticados leve a corrigir tal problema.
- Estudo da influência de outras formas de forças de não-arrasto (como a formulação de Lopez de Bertodano (MÉNDEZ et al., 1995)).
- Estudo do formato de cone gasoso esperado, baseado nos sistema de equações diferenciais apresentado por Szekely (1979).

Também faz-se necessário um aprofundamento dos conteúdos apresentados nas seções 3.4.3 e 3.5, visto que a ligação estabelecida entre o método do solução implementado no software Ansys CFX 11.0 e o conjunto de equações resolvidas está compreendida de forma superficial.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AHRENHOLD, F. PLUSCHKELL, W. Circulation rate of liquid steel in RH degassers. **Steel Research**, v.69, n° 2, p.54-59, 1998.

AJMANI, S.K. DASH, S.K. CHANDRA, S. BHANU, C. Mixing evaluation in the RH process using mathematical modeling. **ISIJ International.** v. 44, n° 1, p.82-90, 2004.

Ansys CFX, Release 11.0 – Solver Manager User´s Guide. Ansys Europe Ltd. 2007.

CLIFT, R. GRACE, J.R. WEBER, M.E. **Bubbles, Drops and Particles**. EUA, Academic Press, 1978, 380p., ISBN 0-12-176950-X.

CONTINI, A.C. MORALES, B.B. VILELA, A.C.F. Simulação numérica do escoamento em estação de refino secundário RH. **XIX Salão de Iniciação Científica – Universidade Federal do Rio Grande do Sul**, 2007.

CROWE, C. SOMMERFIELD, M. TSUJI, Y. **Multiphase flows with droplets and particles.** EUA, CRC Press, 1998, 471p. ISBN 0-8493-9469-4

DREW, D.A. Mathematical modeling of two-phase flow. **Annual Review of Fluid Mechanics**. v. 15, p.261-291, 1983.

FRANK, T. ZWART, P.J. KREPPER, E. PRASSER, H-M. LUCAS, D. Validation of CFD models for mono- and polydisperse air-water two-phase flows in pipes. **Nuclear Engineering and Design.** v. 238, n° 4, p.647-659, 2008.

FRUEHAN, R.J. **Vacuum Degassing of Steel**. EUA, Iron and Steel Society, 1990, 193p. ISBN 0-932897-57-6

FRUEHAN, R.J. **The making, shaping and treating of steel – Steelmaking and refining volume.** EUA, The AISE Steel Foundation, 1998, 767p. ISBN 0-930767-02-0.

HANNA, R.K. JONES, T. BLAKE, R.I. MILLMAN, M.S. Water modeling to aid improvement of degasser performance for production of ultralow carbon interstitial free steels. **Ironmaking and Steelmaking**. v. 21, n° 1, p.37-43, 1994.

HINZE, J.O. **Turbulence**. EUA, Mcgraw-Hill Book Company, 1959, 586p.

HUA, J. WANG, C-H. Numerical simulation of bubble-driven flows. **Chemical Engineering Science**. n° 55, p.4159-4173, 2000.

INOUE, S. FURUNO, Y. MIYAHRA, S. Acceleration of decarburization in RH vacuum degassing process. **ISIJ International**, v. 32, nº 1, p.120-125, 1992.

ISHII, M. ZUBER, N. Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows. **AIChE Journal**. v. 25, n° 5, p.843-854, 1979.

JAKOBSEN, H.A. HARVARD, L. DORAO, C.A. Modeling of bubble column reactors: Progress and limitations. **Industrial & Engineering Chemistry Research.** v. 44, nº 14, p.5107-5151, 2005.

JAKOBSEN, H.A. SANNÆ, B.H. GREVSKOTT, S. SVENDSEN, H.F. Modeling of vertical bubble-driven flows. **Industrial & Engineering Chemistry Research**. v. 36, nº 10, p.4052-4074, 1997.

KATO, Y. NAKATO, H. FUJII, T. OHMIYA, S. TAKATORI, S. Fluid flow in ladle and its effects on decarburization rate in RH degasser. **ISIJ International.** v. 33, n° 10, p.1088-1094, 1993.

KISHAN, P.A. DASH, S.K. Numerical and experimental study of circulation flow rate in a closed circuit due togas jet impingement. **International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow**. v. 16, n° 8, p.890-909, 2006.

KUO, J.T. WALLIS, G.B. Flow of bubbles through nozzles. **International Journal of Multiphase Flow**. v. 14, n° 5, p.547-564, 1988.

KUWABARA, T. UMEZAWA, K. MORI, K. WATANABE, H. Investigation of decarburization behavior in RH-reactor and its operation improvement. **Transactions ISIJ**, v. 28, nº 4, p.305-314, 1988.

LI, B. TSUKIHASHI, F. Modeling of circulation flow in RH degassing vessel water model designed for two- and multi-legs operations. **ISIJ International**. v. 40, n° 12, p.1203-1209, 2000.

MALISKA, C.R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Rio de Janeiro, LTC, 2004, 453p. ISBN 85-216-1396-2

MANNINEN, M. TAIVASSALO, V. KALLIO, SIRPA. **On the mixture model for multiphase flow**. Technical Research Center of Finland, VTT Publications 288, 1996, 67p.

MÉNDEZ, C.G. NIGRO,N. CARDONA, A. Drag and non-drag influences in numerical simulations of metallurgical ladles. **Journal of Materials Processing Technology**. v. 160, n° 3, p.296-305, 2005.

MIKI, Y. THOMAS, B.G. DENISSOV, A. SHIMADA, Y. Model of inclusion removal during RH degassing of steel. **Iron and Steelmaker**. v. 24, n° 8, p.31-38, 1997.

MORALES, B.B. TRINDADE, L.B. VILELA, A.C.F. Simulação numérica do escoamento em um modelo físico de estação de refino secundário RH. **XXXIX Seminário de Aciaria – Internacional**. Curitiba, ABM, p. 627-632, 2008.

NAKANISHI, K. SZEKELY, J. CHANG, C.W. Experimental and theoretical investigation of mixing phenomena in the RH-vacuum process. **Ironmaking and Steelmaking**. v.2, n° 2, p.115-142, 1975.

NASCIMENTO, A.A. PUJATTI, H.L.V. TAVARES, R.P. Simulação física do escoamento de fluidos e da descarburação em desgaseificadores RH. **XXXVIII Seminário de Aciaria – Internacional**. Belo Horizonte, p.830-840, 2007.

NEVES, L. **Avaliação dos efeitos da injeção de gás na câmara de vácuo do modelo físico de um desgaseificador RH.** Belo Horizonte, 2008. 119p. Dissertação (Mestrado em Engenharia). Escola de Engenharia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica e de Minas da Universidade Federal de Minas Gerais.

PARK, Y-G. DOO, W-C. YI, K-W. AN, S-B. Numerical calculation of circulation flow rate in the degassing Rheinstahl-Heraeus process. **ISIJ International**, v. 40, n° 8, p.749-755, 2000.

PATANKAR, S.V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. EUA, Hemisphere Publishing Corporation, 1980,193p. ISBN 0-89116-522-3

PORTELA, L.M. OLIEMANS, R.V.A. Possibilities and limitations of computer simulations of industrial turbulent dispersed multiphase flows. **Flow Turbulence Combust**. v. 77, nº 4, p.381-403, 2006.

RIZZO, E.M.S. **Introdução aos processos de refino secundário dos aços.** São Paulo, Associação Brasileira de Metalurgia e Materiais, 2006, 102p. ISBN 85-86778-94-X.

SCHILICHTING, H. GERSTEN, K. **Boundary Layer Theory**. Alemanha, Springer, 2000, 799p.,8ª Ed, ISBN 3-540-66270-7.

SEDOV, L.I. **Similarity and dimensional methods in mechanics.** 10ª ed, EUA, CRC Press, 1993, 479p. ISBN 0849393086.

SESHADRI, V. COSTA, S.L.S. Cold model studies of R.H. degassing process. **Transactions ISIJ**. v. 26, n° 2, p. 133-138, 1986.

SESHADRI, V. DA SILVA, C.A. DA SILVA, I.A. VARGAS, G.A. LASCOSQUI, P.S.B. Decaburization rates in RH-KTB degasser of CST steel plant through physical modeling study. **Ironmaking and Steelmaking**. v. 33, n° 1, p.34-38, 2006.

SICORSKI, R.S. DAOUD, I.L.A. NADALON, J.E.A. TRINDADE, L.B. SPAAQ – Uma ferramenta de apoio no controle e otimização do processo de refino secundário. **XXXVIII Seminário de Aciaria – Internacional.** Belo Horizonte, ABM, p. 841-849, 2007.

SICORSKI, R.S. **Modelagem numérica aplicada aos fenômenos de escoamento e mistura em modelos físicos de panelas de aciaria.** Porto Alegre, 2006, 66p. Dissertação (Mestrado em Engenharia). Escola de Engenharia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e Materiais – PPGEM, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

SUMIDA, N. FUJI, T. OGUCHI, Y. MORISHITA, H. YOSHIMURA, K. SUDO, F. Production of ultra-low carbon steel by combined process of bottom-blown converter and RH degasser. **Kawasaki Steel Technical Report**, n° 8, p.69-76, 1983.

SZEKELY, J. **Fluid flow phenomena in metals processing**. EUA, Academic Press, 1979, 437p. ISBN 0-12-680840-6

SZEKELY, J. The mathematical modeling revolution in extractive metallurgy. **Metallurgical Transactions B**. v.19B, p. 525-539, 1988

TAKAHASHI, M. MATSUMOTO, H. SAITO, T. Mechanism of decarburization in RH degasser. **ISIJ International**, v. 35, nº 12, p.1452-1458, 1995.

UETANI, T. BESSHO, N. Ironmaking and Steelmaking technologies as fundamentals for the steel production. **Kawasaki Steel Technical Report**., n° 44, p.43-51, 2001.

WEI, J-H. YU, N-W. Mathematical modeling of decarburization and degassing during vacuum circulation refining process of molten steel: mathematical model of the process. **Steel Research**, v. 73, n° 4, p.135-142, 2002.

WEI, J-H. HU, H-T. Mathematical modeling of molten steel flow in a whole degasser during RH refining process. **Ironmaking and Steelmaking**, v. 32, n° 5, p.427-434, 2005.

WEI, J-H. JIANG, X-Y. WEN, L-J. LI, B. Flow and mixing phenomena of molten steel in a multifunction RH degasser and influence of gas blowing port diameter. **Steel Grips**. v. 4, n° 4, p. 283-289, 2006.

WILCOX, D.C., **Turbulence modeling for CFD**. EUA, DCW Industries, 2000, 540p. ISBN 192872910X

YAMAGUCHI, K. KISHIMOTO, Y. SAKURAYA, T. FUJI, T. ARATANI, M. NISHIKAWA, H. Effect of refining conditions for ultra low carbon steel on decarburization reaction in RH degasser. **ISIJ International**, v. 32, nº 1, p.126-135, 1992.

APÊNDICE A

Análise de independência de malha

Ao realizar uma simulação numérica é necessário assegurar-se de que a discretização da geometria é suficiente para captar todos os fenômenos físicos relevantes. Entretanto, o aumento do número de nós incorre em tempos de processamento maiores e, eventualmente, proibitivos.

Com tal preocupação em mente, busca-se um número mínimo de nós a partir do qual o resultado da simulação não se altera com o aumento da malha – tal procedimento denomina-se análise de independência da malha.

No presente trabalho, foram construídas quatro malhas distintas (tabela 9), cada qual com um número maior de nós que a anterior. A distribuição espacial dos nós foi similar em todas as malhas.

Tabela 9 – Número de nós das malhas utilizadas.

	Número de nós
Malha 1	55284
Malha 2	107123
Malha 3	230172
Malha 4	433002

A fim de comparar os resultados das diferentes malhas, optou-se por calcular o escoamento em cada uma delas utilizando modelos matemáticos mais simples possíveis, de forma que o menor número de variáveis estivesse livre – em particular, o coeficiente de arrasto, em vista da possibilidade deste depender de variáveis do escoamento (velocidade, fração volumétrica, etc.).

Desta maneira, as seguintes condições foram utilizadas:

Tabela 10 – Modelagem matemática utilizada na análise de independência de malha.

Dependência temporal	Estacionário
Coeficiente de arrasto	Constante – 0,44
Modelo de turbulência	k-ε
Forças de não-arrasto	Nenhuma

É necessário discutir as razões para as escolhas apresentadas na tabela 10. Observações do funcionamento do modelo físico demonstraram que o escoamento é essencialmente transiente. As fortes oscilações da superfície livre do banho (figura 51), com a projeção de líquido, ocorrem de forma transiente. Apesar disso, optou-se por solucionar o problema em regime permanente.

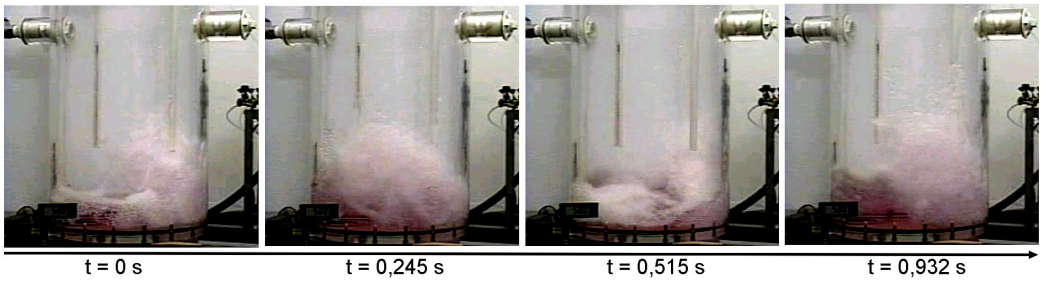

Figura 51 – Fotos do vaso do modelo físico, com vazão de gás de 500 l/min, em diversos instantes de tempo – a água foi colorida com permanganato de potássio.

A formulação estacionária implementada no software Ansys CFX 11.0 é do tipo falso transiente. Isso significa que, embora o objetivo seja um estado final estacionário, um termo de dependência temporal é mantido nas equações, o qual auxilia a convergência da solução (Ansys, 2007). Na formulação transiente (real), a cada passo de tempo várias iterações da solução são efetuadas, de forma que em cada instante de tempo a solução numérica represente o estado físico real.

Em vista desta análise, espera-se que a solução transiente aproxime a realidade do sistema de forma mais acurada do que a estacionária. Sendo assim, inicialmente foram realizadas simulações transientes.

À medida que malhas maiores (as malhas 3 e 4) foram sendo utilizadas, o tempo computacional necessário para obter a solução tornou-se muito grande – tipicamente, quatro dias no caso da malha 3. Assim, foi levantada novamente a possibilidade de utilizar a formulação estacionária.

Como a principal quantidade analisada neste estudo é a taxa de circulação, a comparação das taxas obtidas foi escolhida para estabelecer a diferença entre as formulações estacionária e transiente. Foram escolhidas algumas vazões de gás, vistos na tabela 11.

Tabela 11 – Condições de escoamento utilizadas e resultados da comparação entre formulação transiente e estacionária.

	50 l/min		300 l/min	500 l/min	
Malha	2	3	2	2	3
Taxa de circulação (kg/s) Transiente	2,15	2,46	5,61	4,48	4,10
Taxa de circulação (kg/s) Estacionário	2,19	2,46	5,37	4,63	4,00
Diferença	1,9%	0%	4,4%	3,3%	2,5%

Não foram realizadas comparações para a malha 4 devido à escassez de recursos computacionais.

Da tabela 11, conclui-se que as diferenças da taxa de circulação entre as duas formulações são muito pequenas. Assim, a formulação estacionária foi escolhida por atingir resultados que não diferem grandemente dos obtidos pela transiente em um tempo computacional muito menor do que a última.

A escolha do coeficiente de arrasto como constante foi feita em vista do fato de que os modelos para calculá-lo podem apresentar forte dependência da fração volumétrica das fases e da velocidade dos fluidos. Como é possível que tanto uma como outra sejam afetadas pela discretização da geometria, optou-se por fixar o coeficiente de arrasto em 0,44. Esse valor pode aproximar C_D de uma esfera imersa em um escoamento com $1000 < Re < \sim 10^5$ [SCHILICHTING, H. GERSTEN, K., 2000; CLIFT et al., 1978].

A opção pelo modelo de turbulência k-ε leva em conta sua grande popularidade e ampla validação observada nos estudos na área metalúrgica, além de uma demanda computacional aceitável.

As forças de não-arrasto foram desconsideradas, na suposição de que sua influência é muito menor do que a das forças de empuxo e arrasto. Em publicação sobre escoamento em panela, Méndez et al. (2005) ressalta que é possível, quando o foco principal é determinar a velocidade da fase contínua, desprezar a influência das forças de não-arrasto.

Utilizando a modelagem da tabela 10, simulou-se o escoamento em cada malha para três diferentes vazões de gás: 50 l/min, 300 l/min e 500 l/min. A taxa de circulação para cada malha é vista na figura 52.

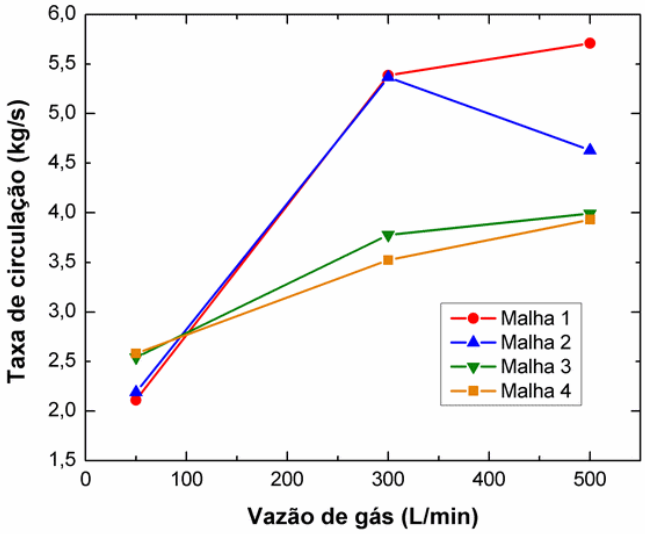

Figura 52 – Taxa de circulação em função da vazão de gás para as quatro malhas analisadas.

Na figura 52, evidencia-se pronunciada distância da taxa de circulação calculada com as malhas 1 e 2 em relação à obtida com as malhas 3 e 4. De maneira diversa, a maior diferença entre as malhas 3 e 4 ocorre com a vazão de 300 l/min (aproximadamente 6,7%) pode ser considerada pequena.

Outra caracterização da dependência dos resultados em função da malha é apresentada na figura 53. São desenhados os perfis de fração volumétrica de ar em um plano transversal na perna de subida, 5 cm acima da injeção de gás, com vazão de gás de 300 l/min

Observa-se que nas malhas 1 e 2 o gás permanece próximo à parede da perna, enquanto nas malhas 3 e 4 a região central tem maior presença dessa fase, sendo observada pequena diferença entre as últimas.

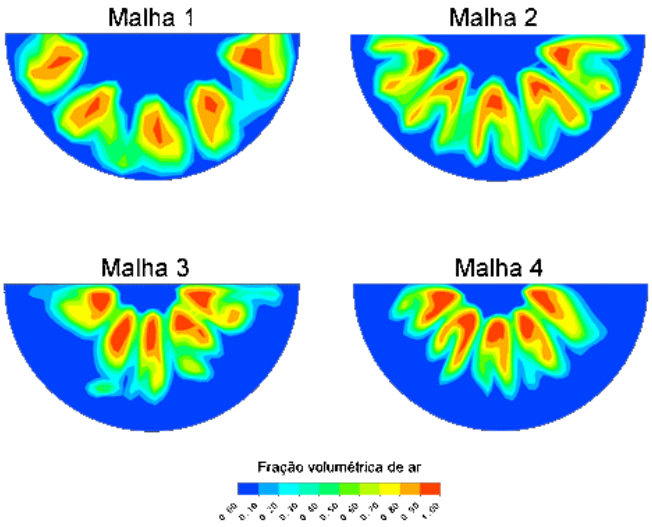

Figura 53 – Fração volumétrica de ar no plano B. Vazão de gás de 300 l/min.

Dessa forma, considerou-se que a malha 3 – composta por 230 mil nós – é suficientemente refinada para que a solução não dependa do número de nós, portanto, todos os resultados apresentados nessa dissertação são obtidos utilizando-a.