

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA**

**MODELAGEM MATEMÁTICA E DESENVOLVIMENTO DE METODOLOGIA
COMPUTACIONAL PARA A SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO BIFÁSICO DE
AR E FERRO-GUSA EM CANAL DE CORRIDA DE ALTO-FORNO**

Dissertação submetida à

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

para a obtenção do grau de

MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA

RICARDO VICENTE DE PAULA REZENDE

Florianópolis, Dezembro de 2008

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA**

**MODELAGEM MATEMÁTICA E DESENVOLVIMENTO DE METODOLOGIA
COMPUTACIONAL PARA A SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO BIFÁSICO DE
AR E FERRO-GUSA EM CANAL DE CORRIDA DE ALTO-FORNO**

RICARDO VICENTE DE PAULA REZENDE

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de

MESTRE EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA

sendo aprovada em sua forma final.

Clovis Raimundo Maliska, Ph.D. – Orientador

Antônio Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng. – Co-Orientador

Eduardo Alberto Fancello, D.Sc. - Coordenador do Curso

BANCA EXAMINADORA

Selene Maria de Arruda Guelli Ulson de Souza, Dr. Eng.

Amir Antônio Martins Oliveira Jr – Ph.D.

Leonardo Paes Rangel, Ph.D.

*“Mais difícil do que encontrar a resposta correta,
é fazer a pergunta certa!”*

*Para Elaine,
minha esposa, amante e amiga...*

AGRADECIMENTOS

A Deus, o Grande Arquiteto, que criou a tudo e só de propósito deixou a nosso cargo a missão de entender Sua Criação e descobrir as regras que A governam, além de me inspirar e iluminar o meu caminho ao longo da minha vida, dando-me forças para superar a todas as barreiras.

Ao Professor Clovis Raimundo Maliska, pela sua orientação e amizade, e pela fé depositada, por ter acreditado na minha capacidade para desenvolver o presente trabalho e todos os outros que estão por vir.

Ao Professor Antônio Fábio Carvalho da Silva, também por sua amizade e orientação, mas principalmente por sempre me instigar e sempre questionar meus resultados obrigando-me sempre a ser criterioso e crítico com o meu trabalho, descobrindo e corrigindo as falhas.

Ao CNPq, pela concessão da bolsa de estudos e à FINEP, pelo financiamento do projeto de pesquisa.

À minha Esposa, Elaine, que sempre me manteve firme nos momentos mais críticos do caminho, refrigerando a minha alma com o seu amor e cuidado.

Ao programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina, por todo o suporte e estrutura acadêmicas.

Ao Professor Axel Dihlmann, por sua sempre pronta atenção e auxílio, dando o suporte necessário nas atividades desenvolvidas no SINMEC.

Aos Professores Álvaro Toubes Prata, Jäder Riso Barbosa Jr. e César José Deschamps, pela paciência em sanar algumas de minhas dúvidas e contribuindo com seus conhecimentos que muito auxiliaram o meu trabalho.

Aos Amigos Ivan Georg, Luis Emeric, Eduardo Mayer, Marcelo DeLucca, Bruno Contessi e Marcus Vinícios, principalmente por suas amizades e também pelas longas discussões dividindo comigo os seus conhecimentos e experiências.

À Magnesita S.A. representada na pessoa do Engenheiro Rodrigo Nazareth Borges, pelo suporte técnico e a sempre prestativa amizade e parceria na pesquisa.

À ESSS, por todo o auxílio e suporte técnico, e especialmente aos Engenheiros Marcus Reis, Régis Ataídes, Marcelo Kruger e Rodrigo Tasca.

A todos os Amigos do SINMEC que fazem do meu trabalho uma diversão.

Aos Professores Luismar Marques Porto, Selene e Antônio Augusto Ulson de Souza, por me incentivarem no início desta empreitada.

Aos meus Pais e especialmente à minha Mãe, a minha primeira Professora, pois com Ela iniciei tudo o que aqui se apresenta.

SUMÁRIO

Índice de Figuras	vii
Índice de Tabelas	xvii
Simbologia.....	xix
Resumo	xxvii
Abstract	xxix
1 Introdução.....	1
1.1 Escoamentos Multifásicos	3
1.2 Escoamentos Multifásicos com Superfície Livre	4
1.3 Motivação e Objetivos.....	7
1.4 Organização do Trabalho.....	9
2 Revisão Bibliográfica.....	11
2.1 Introdução.....	11
2.2 Redução do Minério de Ferro.....	12
2.3 Corrosão, Desgaste e Refratários.....	16
2.3.1 Desgaste do Revestimento Refratário	17
2.4 Escoamento em Canal de Alto-Forno.....	24
3 Modelamento Matemático	33
3.1 Introdução.....	33
3.2 Metodologia de Volumes de Controle.....	34
3.2.1 Fração Volumétrica	34
3.2.2 Conservação da Massa	35
3.2.3 Quantidade de Movimento	36
3.3 Abordagem Euleriana.....	39
3.3.1 Promediação	40
3.3.2 Função Indicadora de Fase	41
3.3.3 Propriedades da Promediação.....	41
3.3.4 Equações Locais de Balanço	42
3.3.5 Variáveis Promediadas	44
3.3.6 Modelo Heterogêneo	48
3.3.7 Modelo Homogêneo	49
3.3.8 Modelo de Força Contínua de Superfície.....	50
3.4 Turbulência.....	52

3.4.1	Equações Promediadas de Reynolds	53
3.4.2	O Conceito de Viscosidade Turbulenta	56
3.4.3	Modelo a Duas Equações $k-\varepsilon$	58
3.4.4	Lei de Parede e Condições de Contorno para $k-\varepsilon$	62
3.5	Modelagem da Turbulência em Escoamentos Multifásicos	70
3.6	Modelagem da Densidade de Força Interfacial	74
3.7	Identificação da Interface	76
3.8	Considerações Finais sobre a Modelagem Matemática.....	77
4	Método Numérico	79
4.1	Introdução.....	80
4.1.1	Discretização do Domínio de Cálculo	82
4.1.2	Discretização das Equações.....	84
4.1.3	Funções de Forma.....	86
4.1.4	Gradiente de Pressão	89
4.1.5	Termo Advectivo.....	89
4.1.6	Acoplamento Massa - Pressão -Velocidade	89
4.1.7	Solução do Sistema Linear	91
4.1.8	Geração de Malha.....	95
4.1.9	Condições de Contorno e Iniciais.....	99
4.1.10	Força de Empuxo.....	106
4.1.11	Abordagem Numérica.....	106
4.1.12	Refino de Malha Adaptativo	108
4.1.13	Passo de Tempo Adaptativo	109
4.1.14	Processamento Paralelo	111
5	Resultados e Discussão	115
5.1	Introdução.....	115
5.2	Hipóteses do Modelo	115
5.3	O Modelo Matemático.....	118
5.3.1	Conservação da Massa	118
5.3.2	Conservação da Quantidade de Movimento.....	118
5.3.3	Turbulência.....	118
5.3.4	Propriedades de Mistura.....	119
5.3.5	Tensão Superficial	119
5.3.6	Condições de Contorno	120

5.3.7	Condições Iniciais	121
5.3.8	Propriedades Físicas	122
5.4	Resultados e Discussão.....	122
5.4.1	Comparações com a Literatura.....	122
5.4.2	Desgaste.....	132
6	Conclusões	153
6.1	Recomendações para Pesquisas Futuras.....	154
6.2	Considerações Finais	155
	Referências Bibliográficas	157
	Apêndices.....	167

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1. Vendas de produtos siderúrgicos em milhões de toneladas. Fonte: (IBS, 2007b)...	2
Figura 1.2. Evolução das exportações brasileiras de produtos siderúrgicos em milhões de toneladas e milhões de dólares. Fonte: (IBS, 2007b).	2
Figura 1.3. Exemplos de morfologias da interface que separa duas fases em sistemas multifásicos.....	4
Figura 1.4. Padrões de escoamentos gás-líquido em dutos verticais.....	4
Figura 1.5. Exemplo de escoamento com superfície livre. Fonte: http://www.amafca.org/photos.htm	5
Figura 1.6. Exemplos de problemas de superfície livre: a) esboço de DaVinci; b, c, d, e) formação de gotas na fase gasosa e bolhas na fase líquida numa vasta distribuição de diâmetros.	6
Figura 1.7. Fotografia de um alto-forno e seu canal de separação.	7
Figura 1.8. Vista frontal do canal em operação em a, e em manutenção em b. Ao fundo, tem-se a parede do alto-forno. Em c tem-se parte do revestimento refratário removido e o estado final é bem erodido e abaulado quando se compara com o estado inicial em d que este canal teria.	8
Figura 2.1. Minério de ferro na forma de hematita.	12
Figura 2.2. Esquema simplificado da produção de ferro-gusa e separação da escória no canal do alto-forno.	14
Figura 2.3. Domínio. Em a tem-se o corpo do canal com um detalhe em corte mostrando o escumador e a passagem de gusa sob o mesmo, bem como a saída lateral de escória. Em b apresenta-se uma ilustração deste canal sem as paredes refratárias apresentando somente o domínio fluido preenchido por metal líquido.	15
Figura 2.4. Causas do desgaste dos revestimentos refratários segundo Hubble <i>et al.</i> (1998)..	17
Figura 2.5. Representação qualitativa do processo de dissolução de um refratário de óxido-metal-grafite. Extraído de Mukai <i>et al.</i> (1989). Os grãos brancos representam o óxido, e os negros o grafite.	18
Figura 2.6. Perfil de desgaste em amostras de zircônia-grafite expostas a escória e aço a 1520°C por 150h em atmosferas distintas. Extraído de Dick <i>et al.</i> (1997).	19

Figura 2.7. Mudança da molhabilidade entre uma gota e uma superfície devido à mudança de tensão superficial ocasionada por transporte de diferentes espécies químicas da superfície para a gota, onde γ representa o ângulo de contato.	20
Figura 2.8. Perfil de escoamento do filme de escória causado por efeitos de tensão superficial em um corpo de prova cilíndrico.	20
Figura 2.9. Campos de velocidade junto à parede e de tensão cisalhante sobre a mesma. Reproduzido de Gondolf, Randall e Lange (2001).	25
Figura 2.10. Em a, b) Recirculações na zona de impacto, segundo Gondolf, Randal e Lange (2001). Em c) Representação esquemática do padrão do escoamento.	26
Figura 2.11. Em a), domínio de cálculo utilizado no trabalho de Luomala <i>et al.</i> (2001). Em b), reprodução da geometria e domínio computacional utilizados As regiões em cinza no domínio físico indicam elementos desativados no domínio computacional.	27
Figura 2.12. Campo de velocidade em três distintas situações e a) <i>Canal Normal</i> , b) <i>Canal mais profundo</i> , c) <i>Com modificadores de fluxo</i> . Extraído de Luomala <i>et al.</i> (2001). Abaixo em cores, representação esquemática do comportamento do escoamento na zona crítica: fluxo reverso e recirculações junto à parede.	27
Figura 2.13. Imagens do jato proveniente do furo de gusa para dois alto-fornos distintos em três tempos diferentes. Extraído de He <i>et al.</i> (2002b).	28
Figura 2.14. Comportamento do jato com o aumento da fração de gás na corrente. De a para d há o aumento da vazão de gás o que aumenta o espalhamento e oscilação do jato. Extraído de He <i>et al.</i> (2002b).	29
Figura 2.15. Comparação das trajetórias previstas pela Equação (2.3) (linha cheia) e as observadas por He <i>et al.</i> (2002b) (pontos). Reproduzido de Stevenson e He (2005).	30
Figura 2.16. Zona de recirculação com fluxo reverso e eclosão de ar. Reproduzido de Begnis Brandaleze e Topolevzky (2005).	31
Figura 2.17. Taxa de desgaste do canal do alto-forno em quatro diferentes posições a partir do furo de gusa em mm/1000ton. de gusa durante 9 corridas, segundo Begnis, Brandaleze e Topolevsky (2005).	31
Figura 3.1. Volume de controle contendo duas fases imiscíveis e separadas pela interface.	34
Figura 3.2. Exemplo de como o volume material pode apresentar velocidades com magnitudes e direções distintas na interface e no seu baricentro, resultando na deformação deste volume.	37
Figura 3.3. Espaçamento de malha e espessura de interface no modelo de força contínua.	51
Figura 3.4. Promediação temporal para turbulência não-estacionária.	54

Figura 3.5. Camada limite turbulenta, onde u_t representa a magnitude da velocidade tangencial à parede e Δy a distância normal a mesma.	63
Figura 3.6. Perfil log-log da Camada Limite Turbulenta.	63
Figura 4.1. Diagrama das principais diferenças dos métodos numéricos. Adaptado de Cordazzo (2006).	80
Figura 4.2. Representação gráfica da discretização e da consistência de um método numérico.	81
Figura 4.3. Exemplo bidimensional da discretização de um domínio e os esquemas de montagem dos volumes de controle.	82
Figura 4.4. Balanço de uma grandeza qualquer em um volume de controle.	83
Figura 4.5. Volume de controle. Em a) exemplo de montagem do volume de controle a partir de elementos triangulares e quadrangular; em b) detalhe do volume de controle resultante; em c) detalhe de um elemento quadrangular mostrando seus pontos de integração, nós e sub-volumes de controle.	84
Figura 4.6. Representação dos dois tipos de elementos usados neste trabalho, hexaédrico e prismático, bem como a enumeração dos seus nós dentro do sistema de referência local onde s , t e u variam de 0 até 1.	87
Figura 4.7. Exemplo da aglomeração aplicada a uma malha inicialmente refinada.	94
Figura 4.8. Exemplo de problemas que podem ocorrer em nós que pertencem a regiões com condições de contorno diferentes.	96
Figura 4.9. Variação da altura do primeiro nó em relação ao y^+ para alguns números de Reynolds.	98
Figura 4.10. Malha hexaédrica empregada na solução do escoamento no canal de alto-forno.	99
Figura 4.11. Região onde foi empregada a condição de entrada.	101
Figura 4.12. Regiões onde a condição de abertura com pressão estática prescrita é aplicada.	102
Figura 4.13. Região onde a condição de abertura com pressão estática prescrita.	102
Figura 4.14. Regiões aonde se aplicou a condição de parede.	103
Figura 4.15. Comportamento da função de transição para várias espessuras de transição.	104
Figura 4.16. Esquema da abordagem numérica.	107
Figura 4.17. Vista lateral simplificada do esquema de refinamento de um elemento hexaédrico.	108
Figura 4.18. Imbalanço do fluxo de massa da simulação em regime permanente.	111

Figura 4.19. Ilustração do processo de particionamento de um domínio computacional em dois processos.....	112
Figura 5.1. Detalhe do degrau na saída de gusa.....	121
Figura 5.2. Linhas de corrente observadas na zona de impacto no trabalho de Gondolf, Randal e Lange (2001). À extrema direita, representação esquemática dos resultados.....	123
Figura 5.3. Vista superior da zona de impacto. Comportamento vorticoso e oscilatório das linhas de corrente na direção transversal à direção principal do escoamento, indicado pela seta.....	124
Figura 5.4. Linhas de corrente obtidas com modelo monofásico e sem considerar o jato e a superfície livre.....	125
Figura 5.5. Campo de velocidade em três distintas situações e representação esquemática do comportamento do escoamento na zona crítica: a) <i>Canal Normal</i> , b) <i>Canal mais profundo</i> , c) <i>Com modificadores de fluxo</i> . Reproduzido de Luomala <i>et al.</i> (2001).....	126
Figura 5.6. Campo vetorial do caso monofásico amostrados na superfície, no plano central e transversal.....	126
Figura 5.7. Campo vetorial de velocidade superficial de gusa no plano $Y=1,00\text{m}$ em vários instantes de tempo.....	127
Figura 5.8. Magnitude da velocidade superficial de gusa. Em a sob o ponto de impacto do jato (3,0m do furo de gusa), e b 1m à frente do ponto de impacto (4,5m do furo de gusa), ambos em $Y=1,00\text{m}$ sobre o plano de simetria.....	129
Figura 5.9. Comparação da trajetória do jato analítica (linha contínua) e a obtida neste trabalho (círculos cheios).....	130
Figura 5.10. Comparação entre os resultados experimentais de Begnis, Brandaleze e Topolevsky (2005) em a, e os obtidos neste trabalho, em b.....	131
Figura 5.11. Campos de fração volumétrica de ferro-gusa no plano de simetria do canal em seis diferentes instantes de tempo no plano $X=0\text{m}$	131
Figura 5.12. Perfis de energia cinética em regime permanente medidos nos volumes de controle adjacentes às duas paredes laterais do canal em diversas alturas.....	133
Figura 5.13. Perfis de velocidade superficial de ferro-gusa em regime permanente medidos nos volumes de controle adjacentes às duas paredes laterais do canal em diversas alturas...	134
Figura 5.14. Perfis de tensão cisalhante em regime permanente medidos nos volumes de controle adjacentes às duas paredes laterais do canal em diversas alturas.....	135
Figura 5.15. Perfis de fração volumétrica de ar em regime permanente medidos nos volumes de controle adjacentes às duas paredes laterais do canal em diversas alturas.....	136

Figura 5.16. Perfis de energia cinética turbulenta e velocidade superficial de ferro-gusa em regime permanente medidos nos volumes de controle adjacentes ao fundo do canal na linha de centro.	137
Figura 5.17. Perfis de tensão de cisalhamento e fração volumétrica de ar em regime permanente medidos nos volumes de controle adjacentes ao fundo do canal na linha de centro.	138
Figura 5.18. Oscilação do campo de tensão na parede inferior a 5m do furo de gusa ao longo do tempo.	139
Figura 5.19. Energia cinética turbulenta amostrada ao longo do tempo na região de impacto a 4,5 m do furo de gusa no fundo do canal e nas paredes laterais em $Y=1,00m$	140
Figura 5.20. Perfis de tensão cisalhante de fração volumétrica de ar ao longo do tempo amostrados a 4,5m do furo de gusa nas paredes laterais em $Y=1.00m$	141
Figura 5.21. Perfil de pressão amostrado ao longo do tempo no centro da parede do escumador em $Y=1,00m$	141
Figura 5.22. Campo de tensão cisalhante junto à parede.	143
Figura 5.23. Vista 3D do comportamento da superfície livre e linhas de corrente entre 2 e 10 segundos.	144
Figura 5.24. Vista 3D do comportamento da superfície livre e linhas de corrente entre 15 e 25 segundos.	145
Figura 5.25. Vista 3D do comportamento da superfície livre e linhas de corrente entre 30 e 35 segundos, e em “regime permatente”	146
Figura 5.26. Captura e trajetória das bolhas descrito no trabalho de He <i>et al.</i> (2002a).	147
Figura 5.27. Localização das linhas de amostragem em relação à interface.	147
Figura 5.28. Comparação entre a taxa de desgaste e a fração volumétrica de ar junto à parede.	148
Figura 5.29. Comparação entre a taxa de desgaste e a energia cinética turbulenta.	148
Figura 5.30. Comparação entre a taxa de desgaste e a velocidade superficial de ferro-gusa.	148
Figura 5.31. Comparação entre a taxa de desgaste e a tensão de cisalhamento.	149
Figura 5.32. Distribuição da Equação (5.16) em torno na interface em função do valor do parâmetro a	151
Figura 5.33. Acima: Comparação das geometrias finais do canal simulado (A) predita pela equação, e do canal real (B). Abaixo: Comparação entre os perfis de desgastes preditos e o real obtido <i>in loco</i>	151

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1. Principais minerais ferríticos e sua composição.....	12
Tabela 3.1. Variáveis das equações de conservação.....	43
Tabela 4.1. Parâmetros de malha recomendados para uma boa solução numérica, (ANSYS, 2007).....	98
Tabela 4.2. Arquitetura do cluster utilizado na solução numérica.....	113
Tabela 5.1. Valores das constantes utilizadas no modelo $k-\varepsilon$	119
Tabela 5.2. Valores prescritos para as condições de contorno utilizadas.....	120
Tabela 5.3. Propriedades físicas dos fluidos.....	122
Tabela 5.4. Matriz de correlação linear.....	149

SIMBOLOGIA

ESCALARES

C	número de Courant
D_{ij}	componentes do tensor taxa de deformação [Pa]
dt	intervalo diferencial de tempo [s]
dS	elemento diferencial de área [m ²]
dV	elemento diferencial de volume [m ³]
E	conjunto das realizações
Fr	número de Froude
h^o	altura inicial de líquido [m]
I	intensidade turbulenta
k	energia cinética turbulenta [m ² /s ²]
k_α	energia cinética turbulenta da fase α [m ² /s ²]
\dot{m}_{pi}	fluxo de massa avaliado no ponto de integração [kg/s]
M_α	massa da fase α [kg]
N	número de realizações
N_f	número de fases
N_i	função de forma do nó i
P	campo médio de pressão [Pa]
p	pressão [Pa]
p'	flutuação do campo instantâneo de pressão [Pa]
p_α	Pressão da fase α [Pa]
p_{abs}	presssão absoluta[Pa]
p_{ref}	presssão de referência[Pa]
Re	número de Reynolds
R_α	fração volumétrica da fase α , definida pela Eq. (3.1)
r_α	fração volumétrica da fase α , definida pela Eq. (3.2)
S_i^ϕ	termo fonte da variável ϕ sobre a interface
S_ϕ	termo fonte da variável ϕ
s, t, u	coordenadas no sistema de referência local do elemento
T	intervalo de promediação [s]
t	tempo [s]
T_{ij}	componentes do tensor tensão [Pa]
U	campo médio de velocidade [m/s]
U_i	componente i do campo médio de velocidade [m/s]
u_i	componente i do vetor velocidade [m/s]
u'	flutuação do campo instantâneo do vetor velocidade [m/s]
u'_i	componente i da flutuação do campo do vetor velocidade [m/s]
u_τ	velocidade friccional [m/s]
u_t	velocidade tangencial [m/s]

u^+	velocidade adimensional
u, v, w	componentes cartesianas do vetor velocidade [m/s]
$u_\alpha, v_\alpha, w_\alpha$	componentes cartesianas do vetor velocidade da fase α [m/s]
V	Volume do volume material, de controle, ou de promediação [m ³]
∂V	fronteiras que delimitam o volume V
V_α	Volume ocupado pela fase α [m ³]
y^+	distância adimensional à parede

Gregos

Γ_α	taxa de transferência de massa interfacial por unidade de volume [kg/m ³ .s]
$\delta_{\alpha\beta}$	função delta de interface [1/m]
δ_{ij}	delta de Kröenecker
δ_i	espessura da interface [m]
ε	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta [m ² /s ³]
ε_α	taxa de dissipação da energia cinética turbulenta da fase α [m ² /s ³]
ϕ	propriedade ou variável qualquer
ν	viscosidade cinemática [m ² /s]
μ_α	viscosidade dinâmica [Pa.s]
μ_T	viscosidade turbulenta [Pa.s]
μ_{eff}	viscosidade efetiva [Pa.s]
μ_α	viscosidade dinâmica da fase α [Pa.s]
$\mu_{T\alpha}$	viscosidade turbulenta da fase α [Pa.s]
$\mu_{eff,\alpha}$	viscosidade efetiva da fase α [Pa.s]
$\langle \mu \rangle$	viscosidade dinâmica de mistura [Pa.s]
ρ_α	concentração mássica da fase α [kg/m ³]
$\langle \rho \rangle$	concentração mássica de mistura [kg/m ³]
ρ_{ref}	concentração mássica de referência [kg/m ³]
σ_k	número de Prandtl turbulento para energia cinética turbulenta
σ_ε	número de Prandtl turbulento para taxa de dissipação da energia cinética turbulenta
$\sigma_{\alpha\beta}$	coeficiente de tensão interfacial entre duas fases α e β [N/m]
τ_{ij}	componentes do tensor tensão de Reynolds
τ_w	tensão cisalhante à parede [Pa]
κ	constante de von Kármán
$\kappa_{\alpha\beta}$	curvatura da interface entre duas fases α e β [1/m]
χ_α	função indicadora da fase α
ω	freqüência da flutuação turbulenta [1/s]

VETORIAIS

\mathbf{e}_i	vetor de base unitário covariante
\mathbf{g}	vetor aceleração da gravidade [m/s ²]
$\hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{\mathbf{k}}$	vetores de base unitários do sistema cartesiano ortogonal
\mathbf{J}	fluxo difusivo da variável ϕ
\mathbf{m}_i^σ	força de tensão interfacial [N/m ³]
\mathbf{M}_α	densidade de força interfacial [N/m ³]
$\hat{\mathbf{n}}_{\alpha\beta}$	vetor normal unitário à interface entre duas fases α e β [1/m]
$\hat{\mathbf{n}}$	vetor normal unitário
\mathbf{t}_α	tração ou força da fase α exercida sobre a interface por unidade de volume [N/m ³]
$\langle \mathbf{u} \rangle$	campo médio do vetor velocidade [m/s]
\mathbf{u}'	flutuação do campo do vetor velocidade [m/s]
\mathbf{u}_α	velocidade baricêntrica da fase α [m/s]
\mathbf{u}_{ai}	velocidade interfacial da fase α [m/s]
\mathbf{x}	vetor de coordenadas do ponto x

TENSORIAIS

$\bar{\mathbf{D}}$	tensor taxa de deformação [Pa]
$\bar{\mathbf{D}}_\alpha$	tensor taxa de deformação da fase α [Pa]
$\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$	díade
$\bar{\mathbf{T}}$	tensor tensão [Pa]
$\bar{\mathbf{T}}_\alpha$	tensor tensão da fase α [Pa]
$\bar{\mathbf{T}}^{\text{Re}}$	tensor tensão de Reynolds [Pa]
$\bar{\mathbf{T}}_\alpha^{\text{Re}}$	tensor tensão de Reynolds da fase α [Pa]
$\bar{\mathbf{I}}$	tensor identidade

MATRICIAIS

$[A]$	matriz dos coeficientes
$[L]$	matriz diagonal inferior
$[U]$	matriz diagonal superior
$\{B\}$	vetor de termos constantes do sistema linear
$\{R\}$	vetor de resíduo do sistema linear
$\{\delta\}$	vetor diferença entre dois níveis iterativos da variável ϕ
$\{\phi\}$	vetor solução da variável ϕ

OPERADORES

Δ	variação discreta
$\frac{D(\)}{Dt}$	derivada material
$\nabla(\)$	operador vetorial gradiente
$\nabla_s(\)$	operador vetorial gradiente sobre uma superfície material qualquer
$\nabla \cdot (\)$	operador vetorial divergente
$\langle \ \rangle$, $\overline{\ \ }$, $\llbracket \ \rrbracket$	operadores integrais de média
\otimes	operador diádico
:	produto escalar tensorial
$[\]$	matriz quadrada
$\{ \ }$	vetor coluna
$tr(\)$	traço de um tensor
$ \ $	módulo ou norma de um vetor

SUBÍNDICES

α	relativo à fase
i, j, k	subíndices da notação indicial de Einstein
i	relativo à interface
$loss$	referente à perda de carga
max	referente a um valor máximo
min	referente a um valor mínimo
n	referente à direção normal
ref	referente a um valor de referência
$open$	referente à abertura
t	relativo à direção tangencial
$stat$	referente à condição estática
w	relativo à parede
∞	referente ao escoamento externo à camada limite

SUPERÍNDICES

k	referente ao nível iterativo do solver
n	relativo ao nível iterativo
nb	referente aos nós vizinhos
o	referente ao passo de tempo anterior
∞	referente ao escoamento externo à camada limite

RESUMO

Recentemente, o uso de fluido dinâmica computacional, CFD, vem ganhando espaço no setor siderúrgico impulsionado pela crescente demanda e pela acirrada concorrência do mercado mundial. As operações siderúrgicas são por excelência fisicamente complexas conjugando diversos fenômenos físicos a temperaturas extremamente elevadas. A abordagem multifásica dos problemas que envolvem a fluido dinâmica do metal líquido ainda é rara, e os sistemas são geralmente tratados como monofásicos. Uma operação unitária crítica onde esta simplificação não é razoável é a de vazamento do alto-forno, que se constitui num sistema onde pelo menos três fases fluidas estão presentes: ferro-gusa, escória e ar atmosférico. A operação tem por objetivo separar a escória do metal líquido e a sua eficiência é grandemente influenciada pela interação dinâmica do jato de ferro-gusa proveniente do alto-forno com a superfície líquida de ferro-gusa contida no canal de extravazamento. O tempo de vida do equipamento, o canal, é determinado pela taxa de desgaste de seu revestimento refratário. O mecanismo pelo qual se dá o desgaste é complexo e muito controverso, contudo, sabe-se que o comportamento fluido dinâmico do sistema está de alguma forma diretamente ligado ao processo. Como uma primeira abordagem do seu tipo, este trabalho propõe um modelo matemático que descreva apenas o escoamento bifásico tridimensional, transiente e turbulento de ferro-gusa, desconsiderando a escória. O sistema é tratado isotermicamente. O modelo foi resolvido numericamente usando-se o código comercial ANSYS CFX[®] Release 11. Os resultados obtidos demonstraram que a abordagem multifásica considerando a interação jato/superfície livre é a mais apropriada no tratamento do problema, pois várias características intrínsecas do escoamento, como por exemplo o comportamento oscilatório da superfície livre, escoamento vorticoso e reverso na zona de mergulho do jato, até então observadas apenas experimentalmente ou na planta industrial, foram também observadas na simulação. Os perfis de desgaste obtidos na planta industrial foram comparados com os campos de velocidade, tensão de cisalhamento, fração volumétrica de ar, e energia cinética turbulenta, e constatou-se que os níveis de energia cinética turbulenta aparentam ser o principal fator facilitador do desgaste seguido pela velocidade superficial. Estes dados corroboram o que se têm escrito sobre o problema, reforçando a idéia de que há uma provável sobreposição de efeitos dos mais diversos, sendo um deles a geração de turbulência junto à zona de impacto e as tensões cisalhantes (pequenas, mas contínuas) infligidas pelo escoamento às paredes do canal, promovendo a sua erosão físico-química.

ABSTRACT

Recently, the use of computational fluid dynamics, CFD, is acquiring importance on metallurgical industrial sector, mainly due to the rising of demand and the hard competition of the global market. By its nature, metallurgical processes are physically complex, conjugating many physical phenomena at high temperatures. A multiphase approach of the issues related to liquid metal's fluid dynamic is even uncommon nowadays. Generally, the systems are considered as composed by only one phase. A critical unit operation where this assumption is not reasonable is the blast furnace withdraw, which has at least three phases: the cast-iron, slag, and atmospheric air. The aim of the operation is to separate the cast-iron from slag, and its efficiency is affected by jet/free-surface interaction. The life campaign of blast furnace main trough is determined by its lining refractory wear rate. And the wear mechanism is quite complex and controversial, but one knows that the fluid dynamics behavior is related to the process. As a first approach, this work presents a mathematical model that describes the two-phase flow of cast-iron and air, considering its three-dimensional, transient and turbulent nature. The temperature changing is not accounted for in the present work. The model has been solved with commercial code ANSYS CFXTM Release 11. Afterwards, obtained results have shown that the multiphase approach accounting for the jet/free-surface interaction is more suitable. Many details as the oscillatory behavior and the vortical and reverse flow, that had seen only in experiments and or in the industrial facility, were captured by model. A comparison to the velocity, wall shear stress, air volume fraction and turbulent kinetics energy fields to wear profile from industrial facility has been performed, and it was found that the turbulent kinetic energy levels seem to be the main factor responsible by the erosion, followed by cast iron superficial velocity action close to the walls. These data corroborate what has been written about the process reinforcing the hypothesis that there is a probable superposition of many effects, it been one of them the turbulence generation together the impact zone and a weak but continual wall shear stress field imposed on wall by the flow, what promotes the physical-chemical erosion of refractory lining.

CAPÍTULO

1

INTRODUÇÃO

A siderurgia brasileira concluiu recentemente um vultoso programa de investimentos voltado principalmente à modernização do seu parque produtor, investindo cerca de US\$ 19 bilhões entre os anos de 1994 e 2006, o que vem permitindo atingir o estado da arte em termos mundiais, aumentando a competitividade e a qualidade do aço, respeitando os conceitos de desenvolvimento sustentável. O Programa de Aceleração do Crecimento – PAC – prevê ainda um investimento entre os anos de 2007 e 2012 de um pouco mais de US\$ 17 bilhões para aumentar a capacidade de produção atual de 37,1 milhões de toneladas em mais 15 milhões de toneladas de aço até o fim do período. Isso se traduz em um investimento de mais de US\$ 36 bilhões em quase 20 anos e uma capacidade instalada de mais de 56,2 milhões de toneladas de aço (IBS, 2007b; 2007a).

O novo programa de investimentos objetiva assegurar, em bases competitivas, o pleno atendimento do mercado interno e preservar ou ampliar as exportações. Nesse sentido estão sendo utilizadas as melhores tecnologias, escalas de produção e modelos de gestão ambiental, social e corporativa (IBS, 2007b; 2007a). A Figura 1.1 mostra a evolução das vendas de produtos siderúrgicos desde o ano de 1994 até 2006, enquanto a Figura 1.2 detalha a evolução das exportações e o aumento do valor agregado destes produtos.

Este aumento nas exportações vem obrigando a indústria a investir mais em tecnologia, e uma das ferramentas empregadas na melhoria do processo produtivo do aço é a simulação. O consumidor final a cada dia exige mais qualidade e exige de seus fornecedores uma prática industrial mais consoante com os padrões de qualidade almejados pela sociedade e exigidos pelos projetos. Os certificados de qualidade ISO garantem apenas a manutenção e gestão da qualidade - um conceito com muitas interpretações - mas não dizem nada acerca do nível de tecnologia empregada, e hoje, onde praticamente todas as grandes empresas possuem certificações de gestão de qualidade, segurança e meio ambiente – sistema de gestão integrada –, a tecnologia empregada nos processos se torna um diferencial em qualquer negociação.

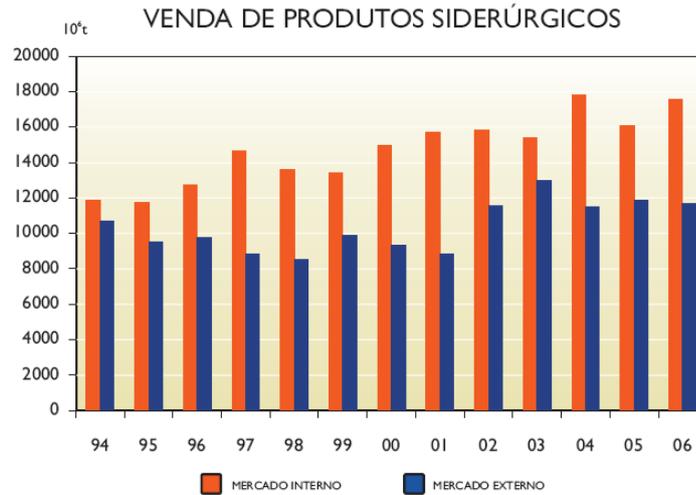


Figura 1.1. Vendas de produtos siderúrgicos em milhões de toneladas. Fonte: (IBS, 2007b).

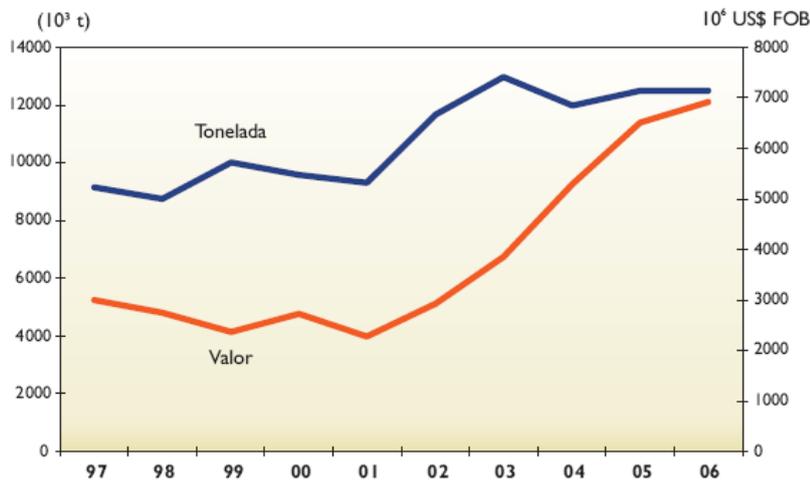


Figura 1.2. Evolução das exportações brasileiras de produtos siderúrgicos em milhões de toneladas e milhões de dólares. Fonte: (IBS, 2007b).

Embora o uso de simulação seja largamente empregado em outros ramos industriais, como aeroespacial, automotiva, petroquímica e naval, isto é bem recente na indústria siderúrgica brasileira. O emprego de ferramentas computacionais para o auxílio de engenharia (CAE) como CFD (*Computational Fluid Dynamics*) vem crescendo a passos largos visto a razão custo/benefício envolvida e o apelo comercial que esta sigla geralmente desperta. Esta última característica vem servindo de estratégia de marketing em quase toda a cadeia produtiva do aço, pois, em princípio, isto possibilita o desenvolvimento de projetos mais precisos e rentáveis. Contudo, a aplicação rigorosa das ferramentas de CFD neste setor está ainda muito incipiente.

Os processos siderúrgicos são, sob o ponto de vista físico, altamente complexos. Eles envolvem escoamentos não-estacionários a altas temperaturas, envolvendo quase sempre

transferência de massa em regimes turbulentos de sistemas multifásicos quimicamente reativos, além de mudanças de estado. Problemas comparáveis podem ser encontrados no setor de energia nuclear.

O tratamento da turbulência é por si um grande desafio em sistemas monofásicos e há muito ainda a ser feito, mas já há um considerável cabedal teórico e experimental e diversos resultados têm demonstrado a eficácia de muitos modelos em determinados setores como a indústria aeroespacial, por exemplo. O mesmo não se pode dizer sobre o tratamento de escoamentos multifásicos, pois ao passo que o estudo e tratamento da turbulência já têm mais de um século de dedicação, o tratamento e modelagem de escoamentos multifásicos sofreu um despertar há pouco mais de três décadas. Grande parte desta latência foi devida principalmente às limitações computacionais, pois a maioria dos problemas não são passíveis de tratamentos analíticos – o que ainda é um problema também para a turbulência – exigindo um tratamento numérico, e nestes últimos trinta anos é notório o crescimento da capacidade computacional dos processadores permitindo a solução numérica de muitos problemas complexos. Mas muitas incertezas ainda permeiam a mente dos pesquisadores e não há muito consenso entre a comunidade científica acerca da validade e aplicabilidade destes modelos.

1.1 Escoamentos Multifásicos

Entende-se por escoamentos multifásicos aqueles onde há a presença de mais de uma fase como, por exemplo, água e óleo, ar e água ou ar e poeira; estes são exemplos de sistemas líquido-líquido, gás-líquido e gás-sólido, respectivamente. O termo *fase* é usado aqui para definir um determinado tipo de fluido, ou material que se *comporta como um único fluido*. Esta fase pode ser uma substância pura, como a água; um sistema multicomponente formado por mais de uma espécie química como, por exemplo, água do mar ou o ar atmosférico; ou coloidal, como a maionese ou pasta de dente, formadas por diferentes materiais em diversos estados físicos misturados em uma escala diminuta e que em conjunto tem um comportamento reológico próprio. O termo fase não deve ser confundido com o seu outro significado termodinâmico usado em outras áreas da ciência para definir o estado da matéria (sólido, líquido, plasma, etc.).

As diferentes fases interagem por meio da interface que as separa. Esta pode ser uma interface conexa (e.g. bolhas e gotas) e/ou desconexa (e.g. interface ar-água em um copo), como ilustra a Figura 1.3. É através da interface que há a troca de calor, dissolução, arraste, etc, ou seja, a interface é a região do espaço onde as diferentes fases trocam informação, ou, mais propriamente, a região pela qual ocorrem transferência de calor, massa e quantidade de movimento.

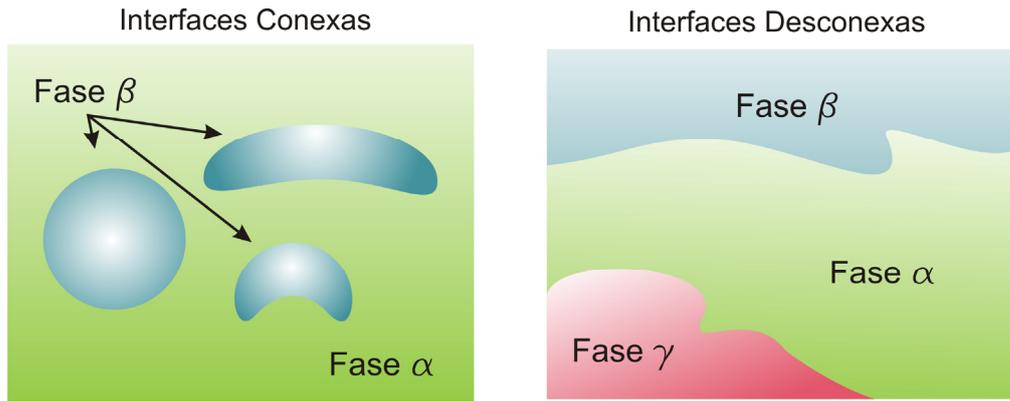


Figura 1.3. Exemplos de morfologias da interface que separa duas fases em sistemas multifásicos.

1.2 Escoamentos Multifásicos com Superfície Livre

É comum classificar-se o escoamento multifásico de acordo com o comportamento das fases, e esta classificação é muito útil quando se trata de escoamento confinados, como no caso de dutos. Para escoamentos gás-líquido, Paladino (2005) descreve este regimes com propriedade. A Figura 1.4 apresenta um exemplo de padrões em dutos verticais.

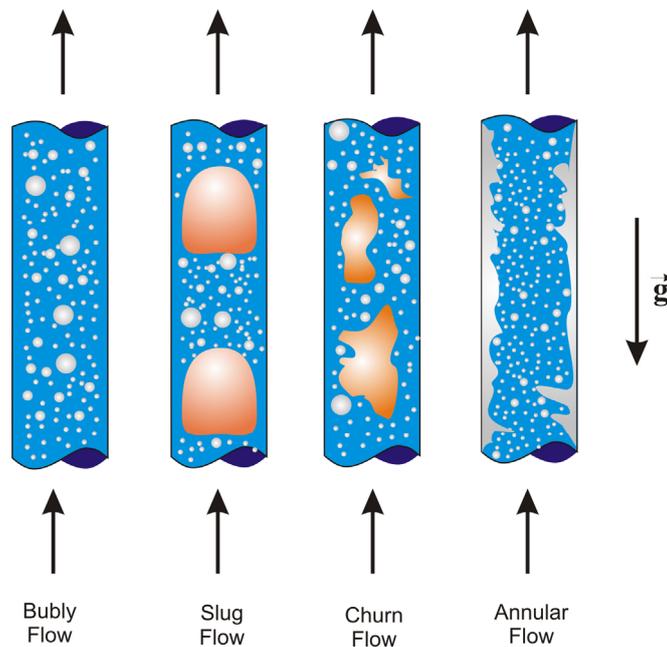


Figura 1.4. Padrões de escoamentos gás-líquido em dutos verticais.

A denominação *superfície livre* indica que há uma superfície fluida *não restringida* por nenhuma parede. Um exemplo deste tipo de escoamento pode ser visto em um rio qualquer, onde o escoamento é restringido somente pelo leito do rio, enquanto a sua superfície – a interface ar/água – não está confinada e tem o seu comportamento dinâmico livre de impedimentos. A Figura 1.5 apresenta um exemplo deste tipo de escoamento.



Figura 1.5. Exemplo de escoamento com superfície livre. Fonte: <http://www.amafca.org/photos.htm>.

A simulação de escoamentos multifásicos gás-líquido com superfície livre tem um grande interesse prático industrial. Citando alguns exemplos, tem-se a indústria química, de alimentos e a indústria naval que muito se beneficiam com o estudo desta classe de escoamento.

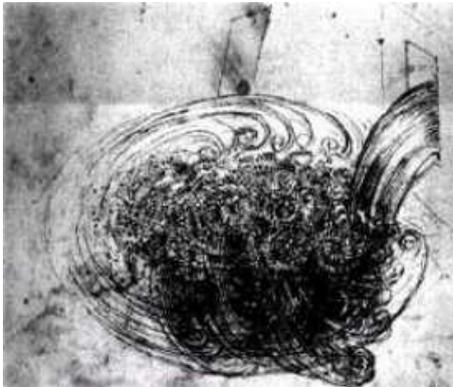
Este tipo de escoamento multifásico é peculiar sob o ponto de vista matemático, pois geralmente a interface que distingue uma fase da outra é bem delineada como em escoamentos laminares em canais abertos, por exemplo. Isto permite muitas simplificações matemáticas, e dependendo do caso e do grau de precisão requerido até mesmo soluções analíticas. Contudo, nem sempre a superfície livre é bem comportada e a descrição da dinâmica desta interface não permite simplificações. Esta mesma dinâmica pode muitas vezes alterar drasticamente a morfologia do escoamento que de uma interface bem definida e distinta passa a um escoamento de bolhas numa vasta distribuição de tamanhos devido ao arraste entre as fases e a instabilidades do tipo Kelvin-Helmholtz (ver SILVEIRA NETO, 2005). Um exemplo disto pode ser encontrado em qualquer praia observando-se as oscilações da superfície marinha face aos ventos, mostrando o quão próximo de nós está e o quão comum é este fenômeno.

O tratamento matemático de escoamentos multifásicos é geralmente feito por meio da descrição do comportamento médio dos campos envolvidos tal qual no tratamento da turbulência. E, da mesma maneira, o processo de promediação das equações instantâneas de conservação gera um problema de fechamento do sistema de equações. No fechamento do sistema deve-se descrever matematicamente de que maneira as fases interagem e trocam informação tal como quantidade de movimento, energia e massa. Ou seja, deve-se trazer a informação da microescala descontínua à escala onde as equações de campo são válidas. E isso não é trivial. Os modelos de fechamento disponíveis são extremamente dependentes da

morfologia e do regime do escoamento e carecem de generalidade, principalmente quando há variação tanto da morfologia quanto do regime (DREW, 1989; 1992; LAHEY e DREW, 2001; PATANKAR e JOSEPH, 2001; BURNS, 2002; CHAHED, ROIG e MASBERNAT, 2003; PALADINO, 2005).

Um fenômeno que conjuga esta problemática é o da colisão de um jato líquido aberto sob uma superfície livre líquida. A morfologia deste escoamento é complexa, e questiona-se, por exemplo, se deve considerar ambas as fases, líquido e gás, contínuas, ou uma delas dispersadas. A Figura 1.6 ilustra alguns exemplos comuns deste fenômeno. De acordo com a figura, a resposta não pode ser dada ao escoamento como um todo, pois a morfologia varia localmente, e portanto, como já dito no parágrafo anterior, a aplicabilidade das equações de fechamento. A colisão de um jato líquido e uma superfície líquida quiescente gera estruturas vorticiais complexas como as esboçadas por DaVinci (Figura 1.6a), e a formação de gotas e bolhas numa vasta distribuição de diâmetros. Este problema tem um grande interesse prático como em processos de fabricação de vidro e aço onde a presença de ar no seio líquido não é desejável por criar defeitos do produto final. Outro exemplo é o tratamento de água onde a aeração é fundamental em algumas etapas do processo (CHANSON, 1997).

a)



Estudo de Leonardo DaVinci

b)



Fonte: <http://pt.inmagine.com/>

c)



Fonte: <http://portugues.istockphoto.com/>

d)



Fonte: <http://portugues.istockphoto.com/>

e)



Fonte: <http://pt.inmagine.com/>

Figura 1.6. Exemplos de problemas de superfície livre: **a)** esboço de DaVinci; **b, c, d, e)** formação de gotas na fase gasosa e bolhas na fase líquida numa vasta distribuição de diâmetros.

1.3 Motivação e Objetivos

Talvez devido a esta complexidade e incertezas, o tratamento multifásico das operações unitárias da fabricação do aço não seja tão comum. A simplificação para um sistema monofásico é geralmente preferida como no estudo de distribuidores de lingotamento contínuo (ver DAOUD *et al.*, 2006; SILVA *et al.*, 2006) e, quando muito, prefere-se a aplicação de um modelo lagrangeano com acoplamento de uma via (*one-way coupling*) (ver THOMAS e ZHANG, 2001), mas em algumas operações isto pode não ser aplicável.

Diante desta lacuna, este trabalho pretende analisar uma operação unitária da fabricação do aço tratando-a como um sistema multifásico. Isto visa abrir caminho para futuros trabalhos na área siderúrgica que pretendam abordar escoamentos multifásicos. A operação unitária em questão é a de vazamento do alto-forno, pois além de ser uma operação unitária pouco estudada e de grande importância na produção do aço, conjuga a problemática da interação jato/superfície livre. A sua eficiência é grandemente influenciada pela interação dinâmica do jato de ferro-gusa proveniente do alto-forno com a superfície líquida de ferro-gusa contida no canal de extravazamento. É um problema onde o sistema deve ser considerado multifásico.

A batelada de ferro-gusa e escória contida na parte inferior do alto-forno, o cadinho, é extravazada por um canal que separa o ferro-gusa da escória. A Figura 1.7 apresenta a fotografia de um alto-forno e o seu canal de vazamento ou canal de corrida como é normalmente chamado. A escória é separada por um canal lateral.



Figura 1.7. Fotografia de um alto-forno e seu canal de separação.

Dois grandes problemas ocorrem devido à interação do jato com a superfície: o primeiro diz respeito à separação da escória. A função do canal é de separar as duas fases e esta eficiência é dependente da geometria e das condições de operação do canal.

O segundo diz respeito ao tempo de campanha. À medida que a operação prossegue, o revestimento refratário é erodido, e após um determinado período de operação, o canal é desativado para a manutenção do revestimento. A Figura 1.8 ilustra este fenômeno. A forma original da em **d**, representado em azul o concreto refratário e em laranja o metal líquido, foi erodida tornando-se abaulada. Em **c**, pode-se perceber a maior região de desgaste junto ao que seria a interface líquido-gás.



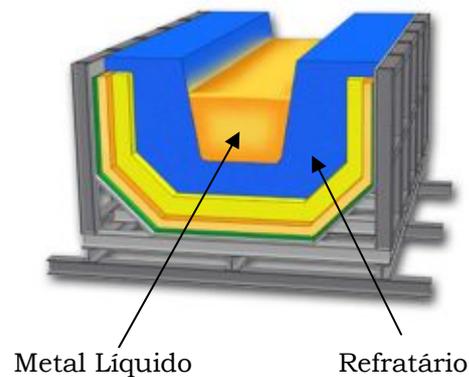
a) Canal visto de frente com ferro gusa escoando.



b) Canal visto de frente já em manutenção.



c) Detalhe da região de impacto.



d) Ilustração da estrutura do canal de alto-forno com metal líquido em seu interior.

Figura 1.8. Vista frontal do canal em operação em **a**, e em manutenção em **b**. Ao fundo, tem-se a parede do alto-forno. Em **c** tem-se parte do revestimento refratário removido e o estado final é bem erodido e abaulado quando se compara com o estado inicial em **d** que este canal teria.

Na análise deste problema, o processo de separação da escória não foi considerado, e a fase escória não está presente, sendo, portanto, um escoamento bifásico líquido-gás em canal aberto e jato aberto. Isto é feito por meio da modelagem matemática e da solução numérica do

modelo. Vale assinalar que o processo de desgaste em si não é levado em conta visto que o perfil apresentado na Figura 1.8c demora cerca de 1 mês de campanha para se formar.

Este trabalho, portanto, trata da descrição tridimensional do comportamento *fluido dinâmico* da colisão entre um jato e uma superfície líquida inicialmente em repouso, e tenta entender como o comportamento dinâmico do sistema afeta a operação promovendo o desgaste mecânico do revestimento refratário.

1.4 Organização do Trabalho

Este trabalho está organizado da seguinte maneira: o presente Capítulo, Capítulo 1, como auto-apresentado, trata da introdução ao problema físico a ser resolvido situando o leitor sobre o tema do trabalho: o comportamento fluido dinâmico de ferro-gusa em canal de alto-forno.

O Capítulo 2 trata da Revisão da Literatura apresentando o estado da arte do tema descrevendo primeiramente o problema em si e apresentando o que tem sido feito no que tange tanto ao escoamento quanto ao processo de desgaste situando-os no contexto deste trabalho. Este Capítulo é fundamental para o entendimento e assimilação de alguns conceitos da área siderúrgica que podem não ser familiares ao leitor e que são usados ao longo de todo o documento.

No Capítulo 3 apresenta-se a formulação matemática de escoamentos multifásicos e da turbulência nestes sistemas. O objetivo principal deste Capítulo é de munir o leitor não familiarizado com o problema e seu tratamento matemático, da base teórica necessária para compreender o trabalho em suas minúcias. Todas as equações de conservação usadas no trabalho são deduzidas e discutidas em seus detalhes.

Este cuidado se deu em parte pela dificuldade deste autor em encontrar referências, principalmente em língua portuguesa, onde isto fôsse feito, pois o procedimento matemático não é trivial. É algebricamente laborioso, e em muitos trabalhos de dissertação de mestrado e até mesmo teses de doutorado sobre o assunto, as equações de conservação são apresentadas como se fossem de conhecimento geral. E não o são. O outro motivo, o principal, é que se acredita que o sucesso de uma simulação está em grande parte no entendimento da matemática e da física embutida nos modelos.

Uma vez deduzidas e discutidas as equações do modelo, o Capítulo 4 descreve os detalhes da metodologia numérica de solução destas equações. Ao contrário da formulação matemática, o Método de Volumes Finitos baseado em Elementos, EbFVM, usado na discretização do problema, tem uma vasta e muito bem discutida literatura. Contudo, como se trata de escoamentos multifásicos, alguns pormenores da metodologia definem o sucesso ou

não da simulação, e são comentados. Todos os resultados são obtidos por meio do código comercial ANSYS CFX[®] Release 11.

Como se trata de um trabalho científico, muitos detalhes sobre alguns procedimentos numéricos são discutidos de maneira a fornecer ao leitor todas as informações necessárias para a compreensão e reprodução do experimento numérico sem que seja imprescindível o uso do mesmo código comercial. Assim, esse Capítulo fornece as informações relevantes ao tratamento numérico das equações do modelo, independentemente do uso de um simulador como o ANSYS CFX[®], permitindo que se use até mesmo um código próprio ou outro código comercial onde as mesmas táticas e procedimentos podem ser aplicados.

Os resultados bem como a discussão dos mesmos são apresentados no Capítulo 5 comparando-se os resultados obtidos aos que estão disponíveis na literatura. As conclusões, comentários e sugestões sobre o trabalho são então dadas no Capítulo 6.

As Referências Bibliográficas estão catalogadas após o Capítulo 6, bem como os Apêndices que tratam essencialmente da matemática envolvida no trabalho.

CAPÍTULO

2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**2.1 Introdução**

O intento principal deste Capítulo é o de apresentar o estado da arte no que concerne ao estudo do escoamento em canal de alto-forno e aos processos de desgaste que porventura podem ocorrer com o revestimento refratário do canal. Pode-se adiantar que pouco tem sido feito quanto a isto até a presente data.

Aparentemente, a esta etapa do processo siderúrgico não é dada tanta importância quando comparada às demais operações unitárias que ocorrem durante todo o processo de produção de aço, apesar de esta etapa definir a eficiência e o custo das operações subsequentes. Assinala-se isso frente à escassez de estudos sobre a operação.

Como a função principal do canal é a de separar o ferro-gusa da escória, a maioria dos poucos trabalhos da literatura tem o foco na eficiência do processo de separação. Contudo, o revestimento refratário define o tempo de campanha do canal e mudanças significativas da sua geometria ocorrem durante este tempo e, conseqüentemente, no padrão do escoamento que por sua vez define a eficiência do processo de separação.

Embora o presente trabalho não se foque na modelagem e explanação do mecanismo exato de desgaste, mas apenas no comportamento fluido dinâmico, certa ênfase também é dada a sua fenomenologia e ao que tem sido estudado na descrição e mensuração deste fenômeno, visto que ele ocorre em todas as operações do processo siderúrgico e não somente no canal de alto-forno.

2.2 Redução do Minério de Ferro

O minério de ferro é uma rocha a partir da qual pode-se obter o ferro metálico, viz. Figura 2.1. O ferro nestas rochas encontra-se geralmente sob a forma de óxidos, tal como a magnetita ou a hematita, ou como um carbonato chamado siderita. O minério de ferro tem um teor de ferro que varia de acordo com o mineral. A Tabela 2.1 apresenta a composição de alguns minerais ferríticos.



Figura 2.1. Minério de ferro na forma de hematita.

Tabela 2.1. Principais minerais ferríticos e sua composição.

Mineral	Fórmula Química	% de Fe teórico	% de Fe pós-calcinação
hematita	Fe_2O_3	69,96	69,96
magnetita	Fe_3O_4	72,4	72,4
magnesioferrita	$\text{MgO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$	56-65	56-65
geotita	$\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$	62,9	70
hidrogeotita	$3\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	60,9	70
limonita	$2\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	60	70
siderita	FeCO_3	48,3	70
pirita	FeS_2	46,6	70
ilmenita	FeTiO_3	36,8	36,8

Fonte: http://pt.wikipedia.org/wiki/Min%C3%A9rio_de_ferro

Uma das formas mais primitivas de se trabalhar e tornar útil o minério de ferro é através da forja, onde o minério de ferro é apenas amolecido em torno de uma temperatura de 700°C e então, pode ser mecanicamente trabalhado (batido). É o chamado ferro forjado ou ferro pudlado (wrought iron) e usado, por exemplo, para fazer uma ferradura. É macio e tem maleabilidade. Lâminas de corte feitas com este material não são eficazes, pois perdem facilmente o fio.

Uma outra maneira de trabalhar o minério de ferro é a através do ferro fundido (cast iron), podendo ser vazado em moldes e formas como é feito com o ouro ou prata. É duro, mas

é frágil e não pode ser trabalhado a quente após sua solidificação, pois há a probabilidade de trincar.

O aço por sua vez é o intermediário entre o ferro forjado e o ferro fundido, podendo ser vazado em moldes, trabalhado a quente e ferramentas feitas de aço mantém o fio. Mas sua obtenção não é tão simples, pois a sutil diferença entre os três é o teor de carbono. No primeiro, o ferro forjado, temos uma quantidade de carbono muito baixa, enquanto que no segundo, o ferro fundido, mais alta. O aço é o ferro com uma quantidade em torno de 0,025-1% de carbono. E isto em fornos primitivos era difícil de se controlar.

Como explicado, o ferro é encontrado principalmente em forma de óxidos, sua forma quimicamente mais estável. A função de um forno é a de reduzir o óxido de ferro, ou seja, quebrar a ligação química entre o ferro e o oxigênio. Isto é feito utilizando-se carvão, fonte de carbono, e calor. O calor vem da combustão do carbono, e para a combustão precisa-se de oxigênio. Mas a quantidade de oxigênio é inferior à estequiométrica, e a reação de combustão do carbono não é completa gerando dióxido de carbono, CO_2 , e monóxido de carbono CO . Esta mistura de gases quentes é extremamente reativa e tem afinidade pelo oxigênio, sendo que a fonte deste oxigênio é o óxido de ferro. Esta reação de redução deixa o ferro livre formando uma ligação metálica.

A obtenção de aço em fornos primitivos era impraticável pois estes fornos raramente superavam os 700°C permitindo apenas a forja, e nessa temperatura o ferro *não dissolve carbono*, componente necessário para se ter aço. A quantidade de carbono, e portanto o tipo do material obtido (aço ou ferro fundido), está diretamente relacionada à quantidade de energia fornecida. A quantidade de carbono que pode ser diluída no metal aumenta com o aumento da temperatura. O ponto de saturação é em torno de 4% de carbono onde então o *ferro puro*, com uma temperatura de fusão próxima dos 1530°C , agora, devido à solução eutética formada entre ele o carbono, funde a aproximadamente 1150°C . Assim, o controle da temperatura do processo determina o percentual de carbono dissolvido final na liga e, logo, as características e o tipo do material obtido.

Os primeiros fornos eram do tipo fechado ou forja catalã e usavam um processo de redução direta sem o ferro puro estar em fase líquida, mas sim numa pasta misturada com as impurezas do minério de ferro. Os fornos evoluíram até o equipamento chamado de alto-forno. Na Figura 2.2 tem-se a ilustração de um alto-forno moderno e do canal de vazamento, ou canal de corrida.

Essencialmente há três correntes de materiais: uma sólida, representada pela carga de minério, coque (carvão) e elementos de liga (reagentes); uma gasosa representada pelos

produtos de reação como o dióxido de carbono e pelo ar insuflado pelas ventaneiras; e uma líquida formada pelo ferro-gusa e escória, também produtos das reações.

Uma série de reações ocorrem da região superior até a inferior, ou cadinho do alto-forno. Nesta última região tem-se a presença de duas fases líquidas: a liga de ferro-carbono, o ferro-gusa, e a escória.

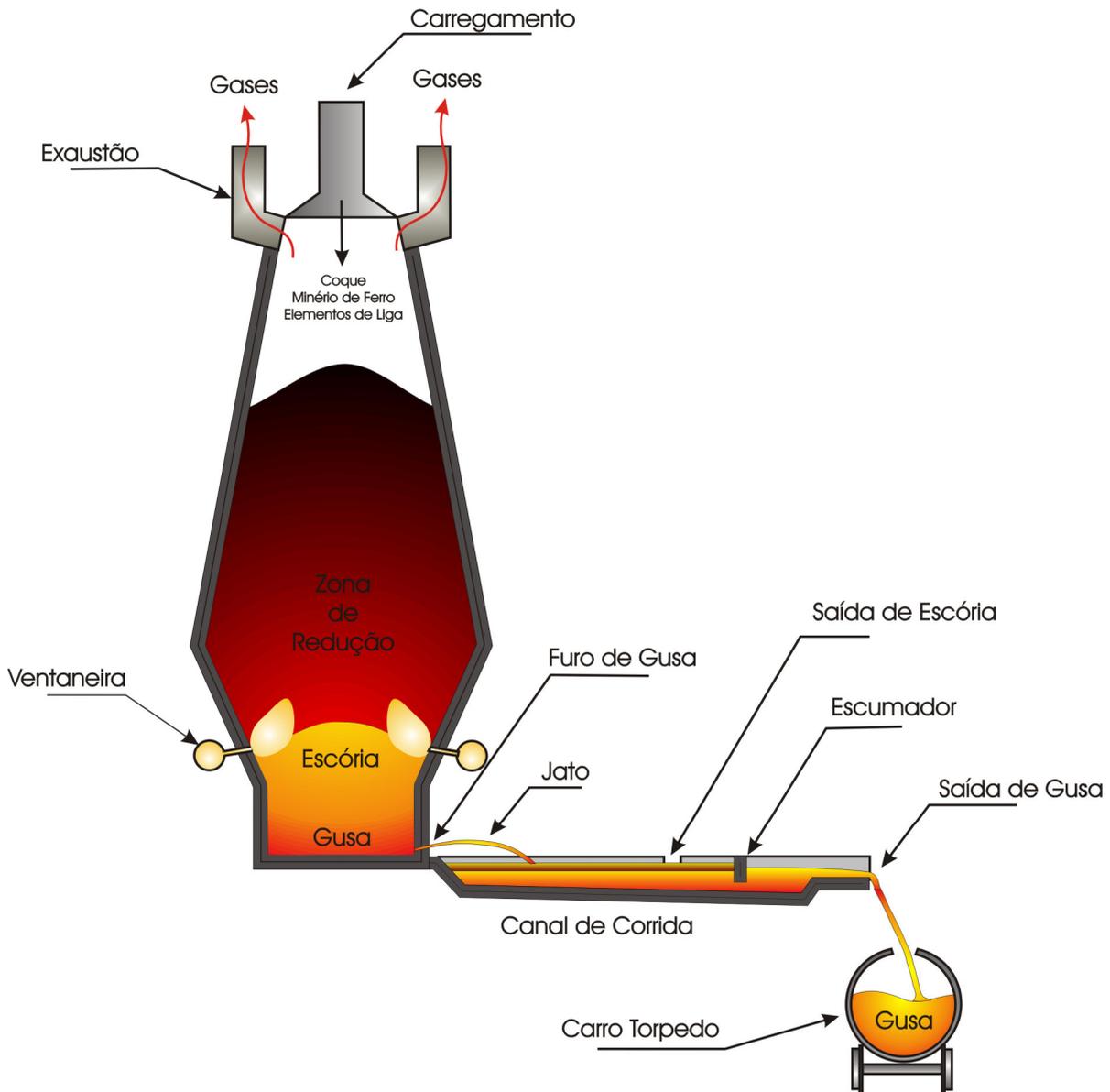


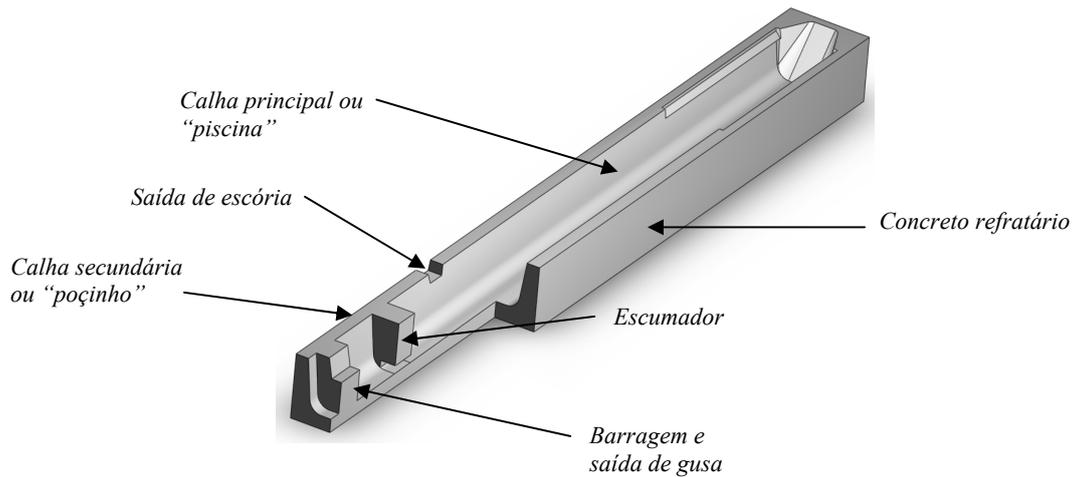
Figura 2.2. Esquema simplificado da produção de ferro-gusa e separação da escória no canal do alto-forno.

Para que o ferro-gusa possa ser beneficiado e transformado em aço, necessita-se ainda de um refino secundário, e para isto a escória deve ser separada. A parede do alto-forno é então perfurada até que se atinja o coração do cadinho. O ferro-gusa então começa a escoar e vaza pelo canal de corrida que tem a função de separar a escória do ferro-gusa. A escória, sendo menos densa, flutua sobre o metal líquido, ou seja, é um processo de decantação. A

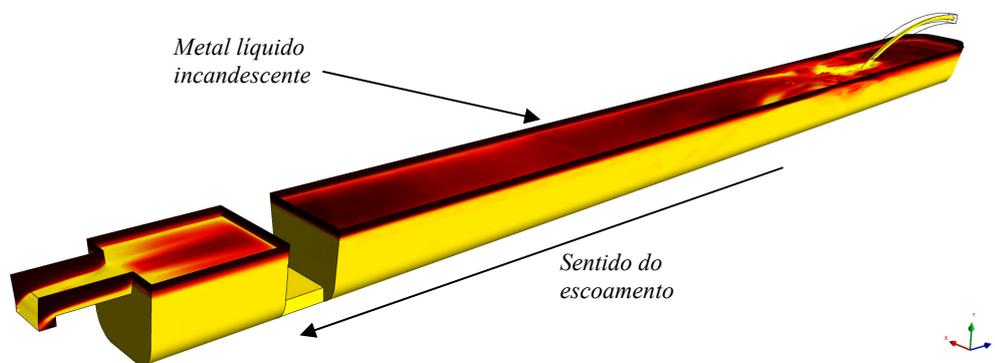
escória é direcionada a um canal lateral e o metal líquido passa por baixo do escumador que separa a escória do ferro-gusa limpo.

Figura 2.3 **a** apresenta a geometria do canal e em **b**, o domínio fluido preenchido pelo metal líquido.

O princípio de funcionamento é o mesmo de uma caixa de gordura de esgoto doméstico, com a diferença de que a fase menos densa não se acumula. O ferro-gusa limpo é então abastecido nos carros-torpedo que direcionam a carga ao refino para a sua transformação em aço.



a) Corpo do canal e revestimento refratário parcialmente cortado para visualizar os detalhes.



b) Domínio fluido preenchido com ferro-gusa fundido ilustrando o escoamento.

Figura 2.3. Domínio. Em **a** tem-se o corpo do canal com um detalhe em corte mostrando o escumador e a passagem de gusa sob o mesmo, bem como a saída lateral de escória. Em **b** apresenta-se uma ilustração deste canal sem as paredes refratárias apresentando somente o domínio fluido preenchido por metal líquido.

Além da presença óbvia de ferro e carbono, o ferro-gusa possui silício (Si), enxofre (S), manganês (Mn), fósforo (P) e titânio (Ti). A escória é necessária para a remoção de impurezas como fósforo e o enxofre.

A escória é formada pela oxidação dos componentes metálicos, o que inclui o próprio ferro, além da adição de fundentes, como o óxido de cálcio (CaO), óxido de magnésio (MgO) e fluorita (CaF₂), que além de baixar o ponto de fusão tem outras duas funções: obter uma

composição química adequada à remoção de fósforo e enxofre do metal líquido, e, com exceção da fluorita, *proteger o revestimento refratário do ataque do óxido de ferro (FeO) e da sílica (SiO)* (HUBBLE *et al.*, 1998).

Uma escória é tipicamente composta por SiO_2 , CaO , MgO , Fe_xO_y , TiO_2 , Mn_xO_y , P_2O_5 e CaF_2 . Pode-se também encontrar alumina (Al_2O_3) e enxofre. As frações de cada um dependerá do tipo de processo, do minério empregado e dos elementos de liga adicionados quando for o caso.

Um tijolo ou concreto refratário pode ser formado por uma mistura de alumina, sílica, zircônia, carbetto de silício, nitreto de boro, óxido de magnésio, titânio e manganês, entre outros e, portanto, dos mesmos óxidos que tipicamente formam a escória e assim, *simile gaudet simili*, ou seja, semelhante dissolve o semelhante. A dissolução vai depender do equilíbrio termodinâmico. Se uma escória já está saturada de alumina, a presente no refratário não haverá de se dissolver, a não ser que a temperatura mude e aumente o ponto de saturação, o que pode muito facilmente acontecer dependendo da operação unitária.

Equilíbrio de soluções é um assunto por si complexo e não será tratado neste trabalho. Basta saber que esta tendência de dissolução do refratário na escória existe por afinidade química. A mensuração desta tendência não é abordada aqui.

2.3 Corrosão, Desgaste e Refratários

Materiais refratários são uma classe de materiais cerâmicos que tem geralmente a finalidade de suportar condições extremas de operação como temperaturas elevadas, grandes esforços mecânicos, resistência a ataques químicos ou mudanças bruscas de temperatura, por exemplo. Contudo, um material produzido pelo homem que possua todas estas características bem acentuadas é difícil, pois geralmente no seu desenvolvimento evidenciar uma propriedade muitas vezes implica em penalizar uma outra. Portanto, a escolha do refratário deve estar associada à operação unitária em questão.

Assim, dependendo da aplicação, diferentes matérias-primas haverão de compor o material refratário a fim de suportar as solicitações da natureza do processo. Deste modo, os materiais refratários se classificam em função do seu componente principal, como sílico-aluminoso, grafita, cromítico–magnesiano, etc.

Materiais refratários são amplamente utilizados na indústria siderúrgica como revestimento de equipamentos tal qual painéis, distribuidores e canais de corrida.

2.3.1 Desgaste do Revestimento Refratário

O processo de desgaste é um fenômeno complexo e pode ocorrer por diversos fatores físico-químicos combinados de maneiras das mais diversas e nos mais distintos graus. A Figura 2.4 ilustra os diversos processos que podem ocorrer.

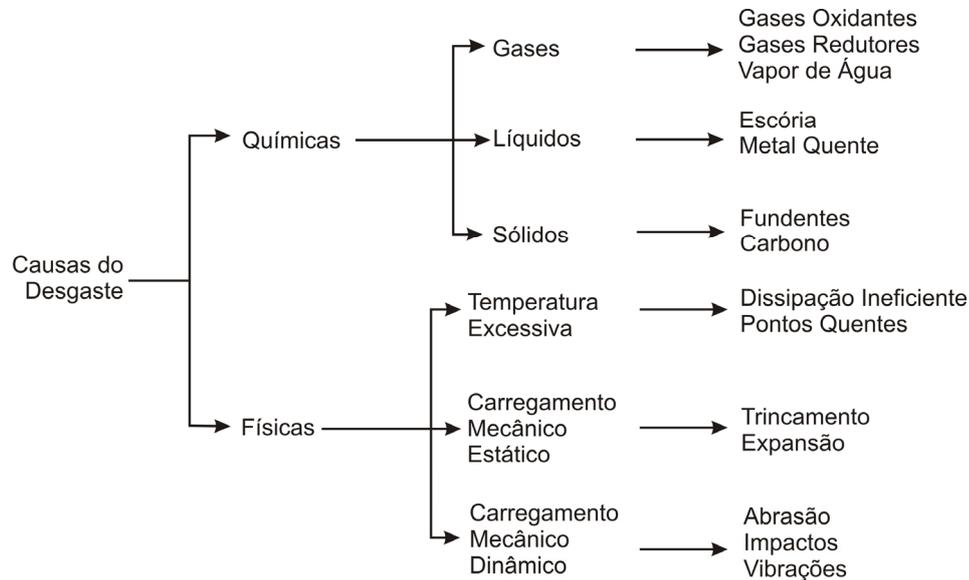


Figura 2.4. Causas do desgaste dos revestimentos refratários segundo Hubble *et al.* (1998).

Segundo Hubble *et al.*(1998) os principais mecanismos de desgaste dos refratários podem ser identificados como:

- **Corrosão/Dissolução:** causada por reação química entre os óxidos metálicos da escória, óxido de ferro (FeO), sílica (SiO₂), ou óxido de magnésio (MgO) com os componentes do refratário e mesmo dissolução como tratado na Seção anterior. O óxido de magnésio por exemplo é solúvel na escória com saturação variando entre 6-14% dependendo da temperatura e quantidade de FeO. Os produtos da reação então se tornam parte da escória. As reações de corrosão podem ser minimizadas neutralizando-se o FeO com *fluxantes*¹ e diminuindo a quantidade de oxigênio na escória. O uso de refratários com alto teor de carbono desoxigena a escória na interface entre o refratário e a escória, diminuindo a corrosão.
- **Oxidação:** neste processo o carbono do revestimento é oxidado pelo óxido de ferro (FeO) contido na escória. À medida que o refratário reage, o material se torna mais frágil e é literalmente lavado pela escória. O oxigênio do ar também reage com o carbono.

¹ Geralmente um pó formado por óxidos que alteram as propriedades da escória como tensão superficial, pontos de saturação, viscosidade, etc, dependendo do tipo de processo e da aplicação.

- **Erosão/Abrasão:** este é outro processo importante causado pela movimentação do aço, ferro-gusa, e/ou escória o que vai erodindo, ou desgastando fisicamente o revestimento refratário. É muito comum junto à linha de escória.
- **Fusão:** muito comum em fornos de arco elétrico onde se podem gerar temperaturas superiores ao ponto de fusão do material refratário.
- **Hidratação:** o revestimento refratário pode facilmente ser degradado por água ou vapor devido à hidratação do óxido de magnésio ou de cálcio, o que resulta em expansão dos grãos, rompendo o material.
- **Trincamento:** o resfriamento ou aquecimento brusco resultam em tensões causadas pela expansão ou contração do material de forma desigual, e muitas vezes superior ao que o material pode suportar. O resultado são trincas ou quebras. Este tipo de efeito é muito comum a revestimentos que, pela natureza da operação, são expostos de maneira cíclica ao ar ambiente frio.

Toda esta fenomenologia é muito estudada no ramo siderúrgico, pois isto pode determinar a otimização de um determinado processo o que se traduz em economia e qualidade.

Mukai *et al.* (1989) estudaram o mecanismo da corrosão local de válvulas submersas na interface metal-escória e constataram que para aços com baixo teor de carbono a dissolução na escória dos óxidos do refratário que constituem a válvula é a etapa limitante do processo. E para ligas com teor de carbono próximos ao ponto de saturação a dissolução do grafite no metal é a etapa controladora. A Figura 2.5 ilustra qualitativamente o processo de dissolução.

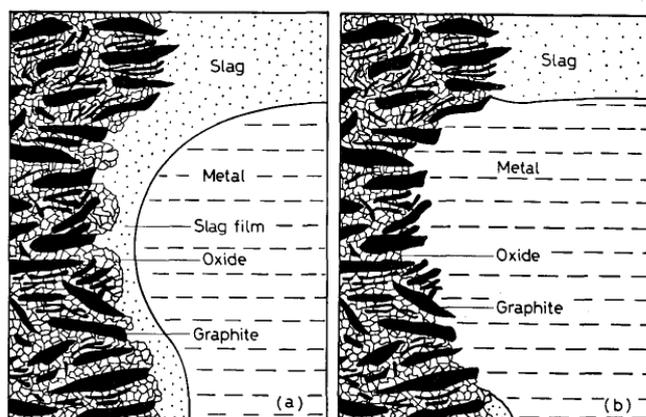


Figura 2.5. Representação qualitativa do processo de dissolução de um refratário de óxido-metal-grafite. Extraído de Mukai *et al.* (1989). Os grãos brancos representam o óxido, e os negros o grafite.

O refratário é inicialmente coberto por um filme de escória que dissolve os óxidos, pois estes tem maior afinidade com a escória que o grafite. Isto expõe uma camada de grãos

de grafite que repelem a escória sendo então molhados pelo metal fundido. Esta afinidade com o metal permite então que o grafite seja dissolvido pelo mesmo lavando a camada de grafite e expondo uma nova camada de óxidos que então são recobertos pela escória. Este processo se repete ciclicamente produzindo uma zona de corrosão na interface metal-escória. Há de se salientar que este processo ocorre mesmo sem agitação, ou advecção forçada.

Dick *et al.* (1997) descreveram o mesmo problema mas levantam algumas dúvidas quanto à etapa que envolve o ataque ao carbono, pois além da dissolução, a oxidação pode também ser um importante fator.

Esta incerteza justifica-se, pois quando exposto ao ar o perfil de desgaste é maior do que quando exposto a uma atmosfera inerte de argônio, segundo os resultados apresentados na Figura 2.6.

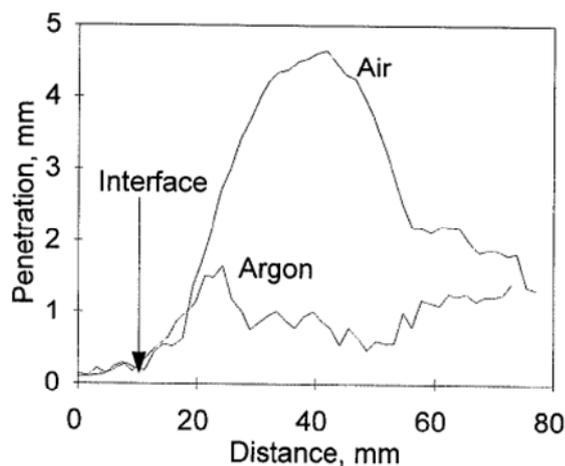


Figura 2.6. Perfil de desgaste em amostras de zircônia-grafite expostas a escória e aço a 1520°C por 150h em atmosferas distintas. Extraído de Dick *et al.* (1997).

Os efeitos de tensão superficial são importantes, pois eles definem a molhabilidade do refratário. Chung e Cramb (1998) observaram que a tensão interfacial decresce drasticamente quando reações químicas ocorrem na interface metal-escória. Ou seja, a tensão superficial não é uma constante e isto induz a formação de gotas e a conseqüente emulsificação, favorecendo ainda mais as reações químicas. O mesmo tipo de efeito químico e de dissolução sobre a tensão superficial foi estudado por Eustathopoulos, Garandet e Drevet (1998) que demonstram que o efeito Marangoni pode afetar a dinâmica da molhabilidade sendo que Jakobsson *et al.* (1998) analisaram a dinâmica desta alteração de molhabilidade por meio de Raio-X. A Figura 2.7 ilustra o fenômeno de alteração da molhabilidade da superfície por conseqüência da transferência de massa.

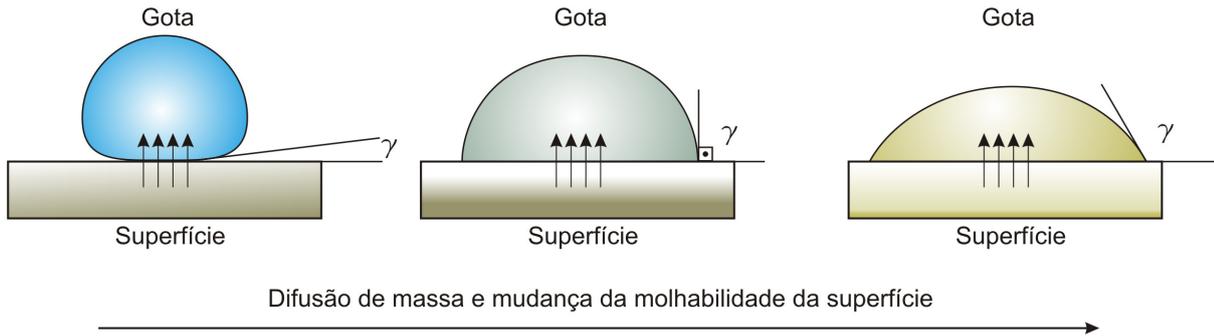


Figura 2.7. Mudança da molhabilidade entre uma gota e uma superfície devido à mudança de tensão superficial ocasionada por transporte de diferentes espécies químicas da superfície para a gota, onde γ representa o ângulo de contato.

Mukai (1998) estudou o processo de desgaste em amostras de alumina usando diversas composições de escória, concluindo que a corrosão local na linha de escória (interface escória-atmosfera) é causada essencialmente pelo movimento do filme que molha a superfície. Esta movimentação é ocasionada pelo efeito Marangoni causado por alterações da tensão superficial, em conjunto com mudanças de concentração mássica e viscosidade da escória. Estas alterações são fruto dos gradientes de concentração de espécies químicas que se dissolvem na escória. O mesmo raciocínio é válido para a linha de metal (interface metal-escória). A Figura 2.8 ilustra o escoamento externo do filme líquido sobre um corpo de prova cilíndrico de um material refratário.

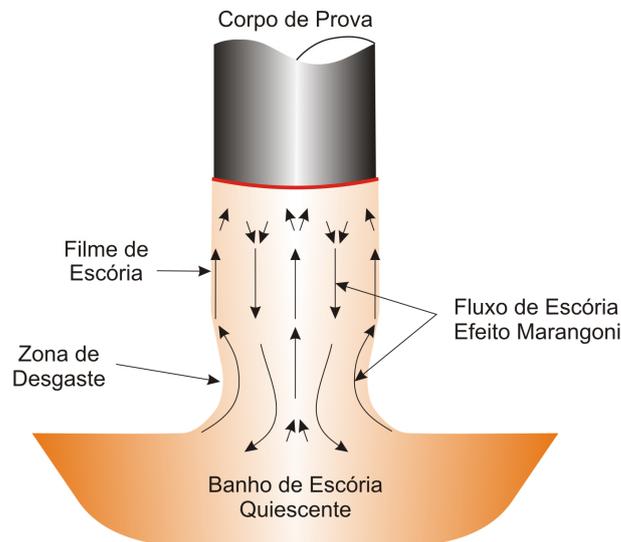
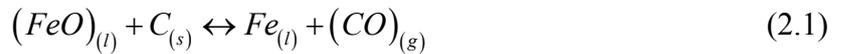


Figura 2.8. Perfil de escoamento do filme de escória causado por efeitos de tensão superficial em um corpo de prova cilíndrico.

Ricci, Nanni e Passerone (1998) além de estudarem o efeito Marangoni induzido por gradientes de concentração também descrevem a influência de gradientes de temperatura na cinética e na termodinâmica da transferência de massa de oxigênio na interface.

Li, Mukai e Tao (2000) estudaram as reações entre um refratário MgO-C, a escória e o metal. Além da dissolução do MgO na escória e do carbono no metal, observou-se a geração de gás na interface entre as três fases, ou linha tripla. Esta geração de gás afeta a taxa de desgaste. Bolhas geradas na interface tripla reprimem a corrosão enquanto as geradas na interface metal-refratário aumentam a taxa. A formação de gás se dá principalmente pela reação,



Okhotskii (2001) apresenta modelos matemáticos para a previsão do desgaste causado por dissolução de óxido na escória obtendo boa concordância na análise de convertedores com sopro de oxigênio.

Takatani, Inada e Takata (2001) analisaram o desgaste do revestimento interno do alto-forno. Isto foi feito resolvendo-se as equações de balanço de quantidade de movimento e energia para a seção inferior do alto-forno. O critério de erosão foi estabelecido por meio do perfil de temperatura da parede onde acima de uma certa temperatura e dependendo do material, a região é considerada erodida.

Yuan, Huang e Mukai (2002) estudaram o efeito Marangoni sobre a taxa de desgaste de refratários MgO-Al₂O₃, e segundo seus resultados para este tipo de refratário o desgaste é minimizado com o aumento do teor de FeO na escória, provavelmente devido a redução do efeito Marangoni.

Hirata *et al.* (2003) propuseram um modelo para a taxa de desgaste em refratários Cr₂O₃-Al₂O₃ em escória alcalina SiO₂-CaO-B₂O₃. Neste modelo a taxa de desgaste é função da viscosidade e da diferença da alcalinidade entre o refratário e a escória:

$$\log \Delta D = 0,18 \log \Delta B - 0,55 \log \eta + C \quad (2.2)$$

onde ΔD é a profundidade da corrosão, ΔB a diferença de basicidade, η a viscosidade dinâmica em Poise e C uma constante. Os autores chamam a atenção para o fato de que o efeito da viscosidade sobre a taxa de desgaste é maior do que o efeito da diferença de pH.

Pilipchatin (2003) investigou experimentalmente as correlações entre a taxa de dissolução de refratários alumino-silicato (Al₂O₃-SiO₂) e as propriedades físicas da escória como viscosidade, tensão superficial e ângulo de contato, observando que a adição de Cr₂O₃, MgO e CaO em escórias muito alcalinas aumenta a viscosidade, o que reduz a taxa de dissolução do refratário minimizando o ataque corrosivo.

Triantafyllidis, Stott e Li (2003) demonstram que a morfologia do material refratário é importante, pois a rede de poros facilita a penetração da escória na matriz do material promovendo mais facilmente a sua dissolução. Refratários ricos em alumina e com adição de

cromita (Cr_2O_3) apresentam uma alta resistência a este ataque pela formação de uma camada densa e de alto ponto de fusão na interface refratário-escória, o que aumenta a resistência difusiva. O tratamento a laser desta superfície promove uma interface mais uniforme e praticamente livre de poros acentuando esta característica.

Hong e Sahajwalla (2004) investigaram *in situ* as reações químicas que ocorrem entre a escória e refratários Al_2O_3 -SiC-SiO₂-C. Como relatado por Li, Mukai e Tao (2000), há grande formação de gás, principalmente o monóxido de carbono (CO). Há também a formação de dióxido de carbono (CO₂), mas em menores proporções. Estas reações promovem a remoção do carbono. Este processo é facilitado pela penetração da escória na matriz do refratário.

Kumar (2005) de forma similar a Takani, Inada e Takata (2001) inferiu o desgaste do revestimento refratário de um alto-forno por meio das isotermas e resolvendo pelo método de elementos finitos somente a condução de calor no sólido. A interface com o metal líquido foi emulada substituindo-se no domínio de cálculo (a parede) as propriedades físicas do sólido pelas do metal quente, tendo como critério no caso analisado a isoterma de 1150°C.

Rovnushkin *et al.* (2005) propuseram correções de composição da escória e dos materiais refratários em um reator a vácuo de desgaseificação RH de forma a minimizar o desgaste, não muito diferente do que Suvorov e Plyukhin (2005) propuseram em seu estudo do efeito do óxido de magnésio sobre a taxa de dissolução, ou seja, mudar a alcalinidade e viscosidade da escória. Já o trabalho de Logunov, Sannikova e Lukin (2006) sugere o uso de refratário usando por exemplo, ZrB₂, ZrN, NbN, em uma solução sólida nanodispersada estabilizada com zircônia (ZrO₂) o que facilita a manufatura deste tipo de cerâmica e permite a sua aplicação acima de 2500°C com uma boa resistência à corrosão.

Como pode-se perceber ao longo desta Seção, a principal dificuldade no controle da taxa de desgaste de um material refratário está em se determinar as reações químicas envolvidas e controlá-las, pois os demais fatores como, por exemplo, trincamento por tensões térmicas, podem facilmente ser resolvidos por pré-aquecimento. Já o deslocamento de uma reação química requer o conhecimento detalhado do mecanismo de reação, o que nem sempre é simples.

Os fenômenos de tensão superficial, segundo o exposto aqui, são também uns dos mecanismos predominantes. O efeito Marangoni promove a movimentação da interface o que afeta a taxa de transferência de massa, a qual está intimamente relacionada à composição química e à morfologia do material.

O mecanismo cinético das reações envolvidas é complexo dado o número de componentes, tipos de refratários e condições de operação diferentes, além do acoplamento e

sobreposição dos efeitos. A porosidade intrínseca do material facilita a penetração da escória e dissolução do refratário. Esta transferência de massa altera a tensão superficial o que inicia o efeito Marangoni e expõe o refratário à dissolução/oxidação e movimenta a interface de forma cíclica lavando as camadas reativas. Caso haja ainda escoamento, haverá uma tensão de cisalhamento provocada pelo fluido e abrasão por eventuais partículas sólidas, o que arrancará a camada reativa expondo o material a um novo ataque, além de promover a emulsificação e possível captura de oxigênio. Esta entrada de oxigênio pode acelerar a oxidação do carbono, gerando gases que aumentam a dinâmica da interface e podem romper os grãos do refratário, oxidando o metal e aumentando a concentração de FeO na escória. Além disso, os gradientes de temperatura envolvidos durante os ciclos de operação trincam ou mesmo quebram grandes pedaços do material o que aumenta a porosidade e o círculo vicioso se completa.

Esta descrição é provavelmente um rascunho do que realmente acontece, pois pouco realmente se sabe e conclusões categóricas são difíceis de se obter. Alguns resultados apresentados são conflitantes entre si, enquanto outros carecem de generalidade sendo aplicáveis somente ao sistema analisado. Todavia, pode-se ter em mente o seguinte:

- Há uma afinidade química entre o material refratário e a escória o que facilita a dissolução na mesma.
- O carbono e/ou o silício do refratário é oxidado e/ou dissolvido pelo óxido de ferro e talvez oxidado pelo oxigênio quando o refratário possui grafite e/ou silicatos.
- A dinâmica da interface, cuja força motriz é o efeito Marangoni, tem forte influência na taxa de transferência de massa sólido-líquido quando não há escoamento (advecção).
- A morfologia do material (porosidade e granulometria) também afeta a transferência de massa.
- Com a fragilização da superfície sólida, qualquer carregamento mecânico pode degradar o material. Este carregamento pode ser de natureza térmica, devido a expansão e contração do material, estrutural ou fluido dinâmica, este último causado por tensões de cisalhamento e abrasão.
- Sejam quais forem as reações e processos de dissolução que determinam o mecanismo de desgaste, a mistura entre as fases metal-ar-escória há de intensificar a transferência de massa e as taxas de reação química, e portanto, o desgaste.
- A escolha correta do material e o ajuste de composição da escória podem diminuir o problema.

2.4 Escoamento em Canal de Alto-Forno

O escoamento propriamente dito no canal de alto-forno foi pouco estudado. Nos trabalhos que se seguem, em quase sua maioria, esta dificuldade também foi descrita. Visto as referências serem poucas, uma descrição dos trabalhos e das diferentes abordagens mais detalhada pode ser dada e permitir ao leitor uma visão mais clara do trabalho. Como já comentado no início do Capítulo, geralmente o processo de desgaste não é tido como tão importante quando comparado ao processo de separação gusa-escória.

Nesta linha de estudo, pode-se citar o trabalho de Shestopalov *et al.* (1988) que estudaram o efeito de modificadores de fluxo (barragens, aletas, etc) para minimizar a perda de metal pelo canal de escória, metal este emulsificado e que é advectado para a saída de escória.

Kim, Ozturk e Fruehan (1998) estudaram experimentalmente em um modelo físico de óleo e água o fenômeno de separação gusa-escória. A influência das condições operacionais e geometria do canal sobre o fenômeno também foi analisada.

Nestes trabalhos não houve menção a alguma alteração na taxa de desgaste, ou se por acaso as mudanças geométricas e/ou operacionais tiveram como um efeito colateral um efeito positivo ou negativo sobre o desgaste do refratário.

Gondolf, Randall e Lange (2001) preferiram tratar numericamente o problema do desgaste. Com base em seus resultados, argumentam que a erosão mecânica não pode ser o principal fator no desgaste do revestimento refratário. Concluíram que a corrosão química é um dos processos coadjuvantes e que toma grande parte no processo.

Em seus estudos numéricos os autores utilizaram o código comercial FLUENT[®] Release 5.0. O escoamento tridimensional multifásico de ar-escória-gusa foi reduzido a um escoamento monofásico de uma mistura com propriedades físicas intermediárias entre a escória e o ferro-gusa.

Na abordagem dos autores, o jato e a superfície livre não foram levados em conta. A superfície de líquido, ou a interface líquido-gás foi considerada uma superfície plana, como uma parede com aplicação da condição de não deslizamento (*no-slip*). Esta simplificação não é muito comum em problemas de superfície livre. Se o comportamento dela não é considerado importante, a condição de deslizamento (*free-slip*) é geralmente utilizada. A razão pela qual esta condição não foi empregada não é comentada.

A região de impacto do jato sobre a superfície livre foi delimitada com um raio de 10 cm a uma distância de 1,5m do furo de gusa com fluxo de massa prescrito. O ângulo de

incidência foi uma das variáveis de análise. Nem balanço de energia tão pouco reações químicas foram considerados.

O número de Reynolds deste estudo era igual a 15.000 considerando um diâmetro hidráulico de 1,2 m. Levando em conta a viscosidade cinemática da *mistura*, isto implica em uma velocidade média de escoamento aproximada de 0,035 m/s. Com este número de Reynolds o escoamento foi considerado turbulento e o modelo $k-\varepsilon$ foi usado. O problema foi resolvido em regime permanente.

Seus resultados demonstraram que a distribuição da tensão cisalhante na parede é de apenas uns poucos Pascals ($\sim o(1\text{Pa}) - o(10\text{Pa})$) na região de impacto do jato e diminuindo rapidamente a quase zero cerca de 1 metro à frente. O mesmo pode-se dizer da velocidade do escoamento. A Figura 2.9 ilustra os campos de velocidade e tensão cisalhante.

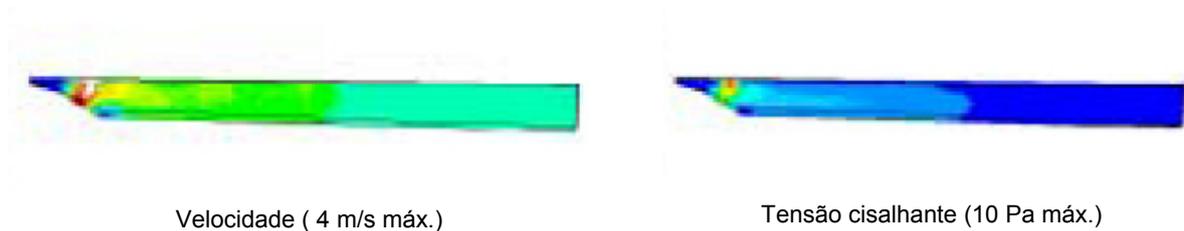


Figura 2.9. Campos de velocidade junto à parede e de tensão cisalhante sobre a mesma.
Reproduzido de Gondolf, Randall e Lange (2001).

Segundo os autores, isto não é suficiente para gerar o perfil de desgaste observado em canais, pois além dos valores baixos de tensão os perfis não são coincidentes. Portanto, a corrosão química deve ser a principal responsável pela erosão do refratário facilitada pela turbulência gerada na região de impacto, concluindo que há uma relação entre os fenômenos.

Os autores enfatizam que a corrosão é promovida pela presença de oxigênio no meio líquido que reage com o carbono e com o carbetto de silício do refratário, aumentando a dissolução deste no metal líquido e facilitando a permeabilidade ao oxigênio.

A presença de oxigênio está relacionada às flutuações da superfície geradas pelo impacto do jato, e nesta zona crítica duas grandes regiões de recirculação são notórias. A Figura 2.10 ilustra as regiões de recirculações e o padrão do escoamento.

Esta agitação do meio líquido promove a emulsificação da escória com o metal líquido e o ar, o qual é arrastado para dentro da massa fluida até às paredes. Esta mistura facilita as reações químicas que ocorrem na superfície do refratário.

Contudo, o trabalho carece de detalhes quanto à geometria, ao tipo e à densidade da malha empregada, o que dificulta uma reprodução fidedigna dos resultados de uma forma quantitativa. Todavia, o comportamento descrito e as conclusões dos autores têm a sua valia no direcionamento para comparações do comportamento qualitativo do escoamento.

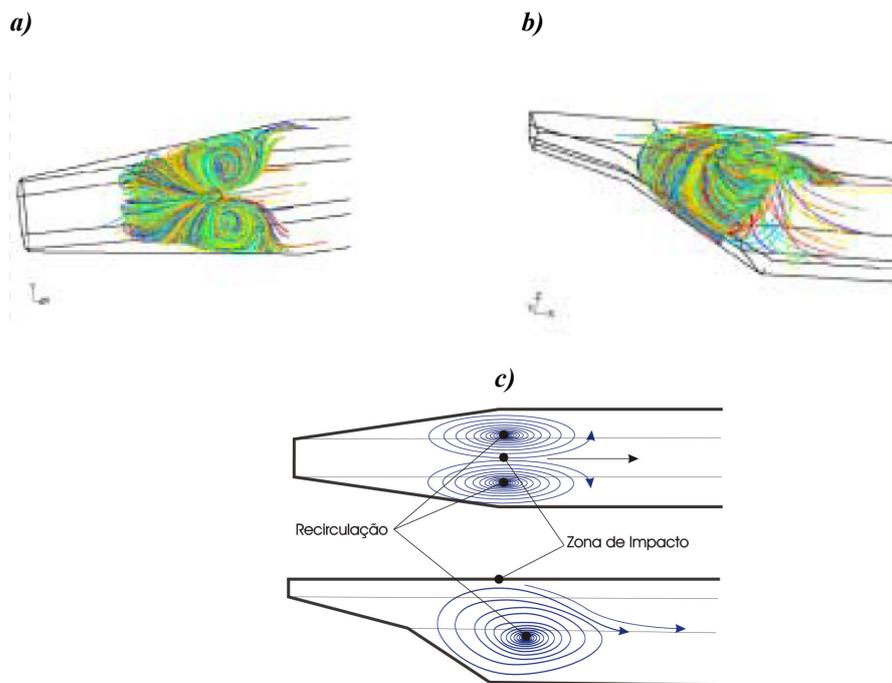


Figura 2.10. Em **a, b)** Recirculações na zona de impacto, segundo Gondolf, Randal e Lange (2001). Em **c)** Representação esquemática do padrão do escoamento.

Luomala *et al.* (2001) também realizaram simulações numéricas e experimentos em modelo físico analisando a região crítica do escoamento: a região de impacto do jato. Esta região define o tempo de campanha do canal.

No modelo físico a escória foi simulada por pequenas esferas poliméricas e o modelo computacional resolvido no código comercial PHOENICS[®] Release 3.2. No modelo computacional a escória, a superfície livre e o jato não foram considerados, sendo aplicada uma abordagem similar a de Gondolf, Randall e Lange (2001). Mas, neste caso, ao invés da mistura, apenas uma fase foi considerada, o ferro-gusa incidindo a um ângulo de 27° a 3,1 m do furo de gusa a uma velocidade de 7,7 m/s. Entretanto, os autores não deixam claro se a região de impacto é uma superfície delimitada como na abordagem de Gondolf, Randall e Lange, ou se é considerada como um *Source Point*, ou uma fonte pontual com fluxo de massa e direção especificados, viz.: Figura 2.11. Acredita-se que esta segunda opção foi a utilizada. O domínio físico estudado tem dimensões 1,8 x 0,65 x 8,9 m e o escoamento a jusante do escumador não foi incluído. Empregou-se uma malha relativamente grosseira com aproximadamente 83 mil elementos (36 x 26 x 89) e com parte destes elementos não ativos (toda a região cinza na Figura 2.11). O sistema também foi considerado isotérmico e em regime permanente.

O porquê desta malha não foi bem explicado, e especula-se que provavelmente foi devido às dificuldades inerentes do processo de geração, ou limitações do software ou mesmo do conhecimento dos autores sobre a sua utilização.

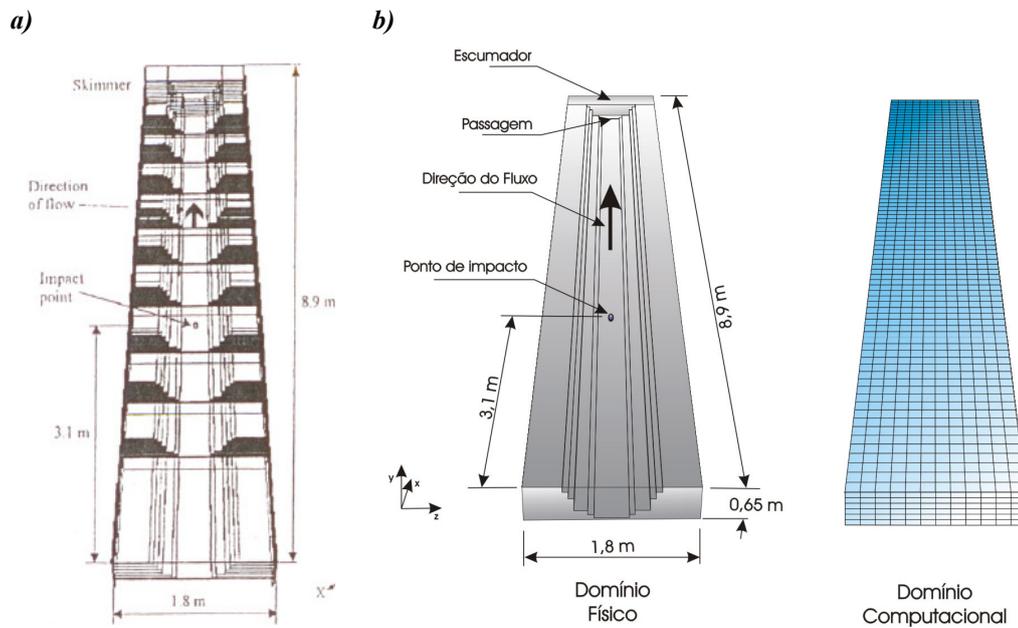


Figura 2.11. Em **a)**, domínio de cálculo utilizado no trabalho de Luomala *et al.* (2001). Em **b)**, reprodução da geometria e domínio computacional utilizados. As regiões em cinza no domínio físico indicam elementos desativados no domínio computacional.

Os autores analisaram a influência de modificadores de fluxo, ângulo de impacto do jato, nível do banho e a geometria do canal no padrão do escoamento. Os resultados de Luomala *et al.* (2001) também apresentaram na zona crítica em todos os casos estudados duas regiões de recirculação, como pode ser visto na Figura 2.12.

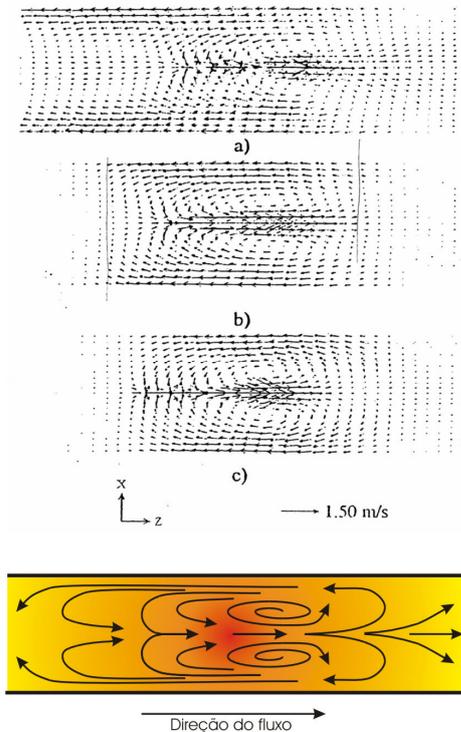


Figura 2.12. Campo de velocidade em três distintas situações e **a) Canal Normal**, **b) Canal mais profundo**, **c) Com modificadores de fluxo**. Extraído de Luomala *et al.* (2001). Abaixo em cores, representação esquemática do comportamento do escoamento na zona crítica: fluxo reverso e recirculações junto à parede.

Os autores argumentam que o excessivo desgaste lateral na zona crítica é causado tanto pelo ataque químico quanto pelo simultâneo carregamento térmico ao qual é submetido o material refratário, e principalmente nas regiões onde o metal fundido flui com velocidades mais elevadas, ou seja, nas laterais da zona crítica.

He *et al.* (2002b) estudaram o comportamento do jato *in loco* e experimentalmente. Neste trabalho, dois canais reais geometricamente iguais com as mesmas condições de operação apresentavam perfis de desgaste diferentes sendo um mais erodido que outro. Na Figura 2.13 apresentam-se as imagens obtidas *in loco* do comportamento do jato de gusa.

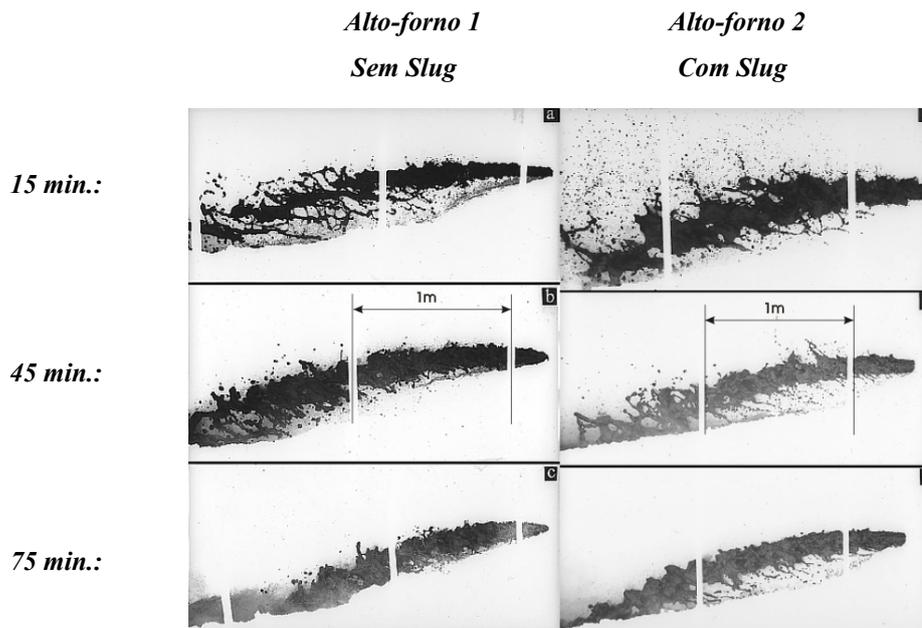


Figura 2.13. Imagens do jato proveniente do furo de gusa para dois alto-fornos distintos em três tempos diferentes. Extraído de He *et al.* (2002b).

O segundo conjunto de imagens, alto-forno 2, apresenta um espalhamento maior do jato ao longo da corrida e justamente este canal é mais erodido. O efeito da presença de gás na corrente do jato pode ser avaliado pela Figura 2.14. O aumento na fração de gás aumenta o espalhamento e o comportamento pulsante do jato, o que no entendimento dos autores é um fator que contribui para o aumento da taxa de desgaste da região crítica e na diferença entre esta taxa nos dois canais.

As oscilações e intermitências no fluxo promovem uma maior agitação da superfície e captura de ar pelo metal líquido. E, de acordo com os autores, esta série de colisões erráticas aumenta o desgaste. A inibição deste comportamento indesejável aumentou em cinco vezes a vida útil do canal demonstrando que a interação jato/superfície livre é um fator que determina o tempo de campanha de um canal de corrida.

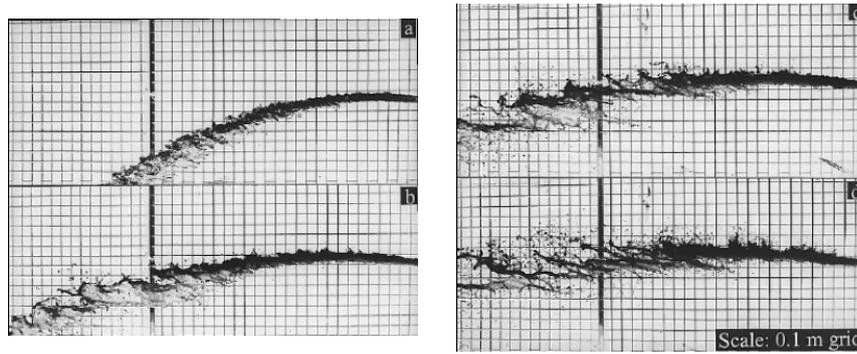


Figura 2.14. Comportamento do jato com o aumento da fração de gás na corrente. De **a** para **d** há o aumento da vazão de gás o que aumenta o espalhamento e oscilação do jato. Extraído de He *et al.* (2002b).

Em outro trabalho subsequente He *et al.* (2002a) estudaram experimentalmente a interação entre o jato e a superfície livre na região crítica e o seu efeito sobre o desgaste excessivo nesta região utilizando para isto um modelo em escala 1:5 com óleo e água como fluidos de trabalho, monitorando o campo de velocidade por meio de Velocimetria Doppler a Laser (LDV). Este trabalho também analisa a influência de modificações geométricas e operacionais no comportamento do escoamento.

Uma importante constatação dos autores foi de que o escoamento na região de impacto é dominado por forças de empuxo devido à presença de bolhas de ar. A região onde o volume de material fluido vindo do jato incidente ressurgue na superfície é formada em grande parte por gás, sendo que o líquido é então forçado a escoar junto às paredes. Estas bolhas são tanto da corrente do jato quanto do ar circundante.

Stevenson e He (2005), com base em um modelo físico de água, demonstraram que a trajetória do jato pode ser descrita por

$$y = h + x \tan \theta - \frac{gx^2}{2(\bar{V} \cos \theta)^2}, \quad (2.3)$$

onde h é a altura do furo de gusa; θ o ângulo de saída do jato; g a aceleração da gravidade; e \bar{V} a velocidade superficial média da mistura dada pela correlação

$$\bar{V} = 1.2(v_g + v_f) \quad p/ \quad Fr > 3.5, \quad (2.4)$$

onde v_g e v_f são as velocidades superficiais médias de cada fase e Fr o número de Froude, calculado por

$$Fr = \frac{u^2 g}{D_h}, \quad (2.5)$$

sendo D_h é o diâmetro hidráulico do furo, u a velocidade média na saída do jato e g a aceleração da gravidade. O perfil da trajetória dado pela Equação (2.3) pode ser observado na Figura 2.15.

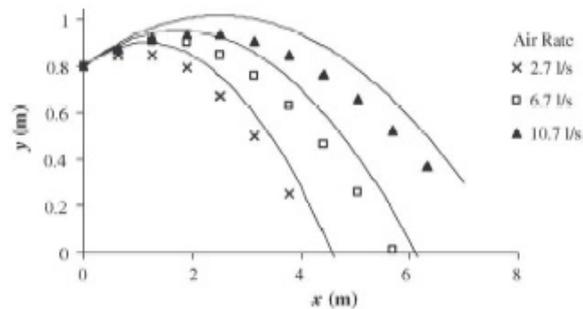


Figura 2.15. Comparação das trajetórias preditas pela Equação (2.3) (linha cheia) e as observadas por He *et al.* (2002b) (pontos). Reproduzido de Stevenson e He (2005).

Os autores concluem que o regime de escoamento do tipo *slug flow* é o principal causador da dispersão do jato. A dispersão entre as fases não é uniforme e gera diferenças de concentração mássica na seção de escoamento gerando um padrão oscilatório de aceleração/desaceleração dentro do duto e, conseqüentemente, o padrão disperso e oscilatório do jato. Os autores sugerem que a velocidade de saída fique abaixo dos 5m/s de forma a manter a estabilidade do jato.

Begnis, Brandaleze e Topolevsky (2005) estudaram o processo de separação de escória em um modelo físico 1:5, também utilizando água e óleo como fluidos de trabalho. O mesmo padrão de escoamento reverso e com recirculação foi também reportado experimentalmente como pode ser observado na Figura 2.16, onde há presença de bolhas de ar eclodindo na superfície. Os autores também avaliaram o processo de desgaste no canal medindo a taxa de desgaste na planta. Estas medidas são mostradas na Figura 2.17. A região compreendida de 1 a 3m do furo de gusa é a que se desgasta mais rapidamente e esta é a região onde há maior turbulência e mistura entre as fases devido a grande emulsificação e captura de ar.

Todavia, a reprodução exata deste experimento é difícil, visto que ao invés de óleo e água há uma emulsão e água como fluidos de trabalho. Além disso, todo o experimento é embasado na similitude do escoamento e esta se fundamentou nos números de Reynolds e Froude calculados com as propriedades físicas da água e do óleo e não da emulsão.

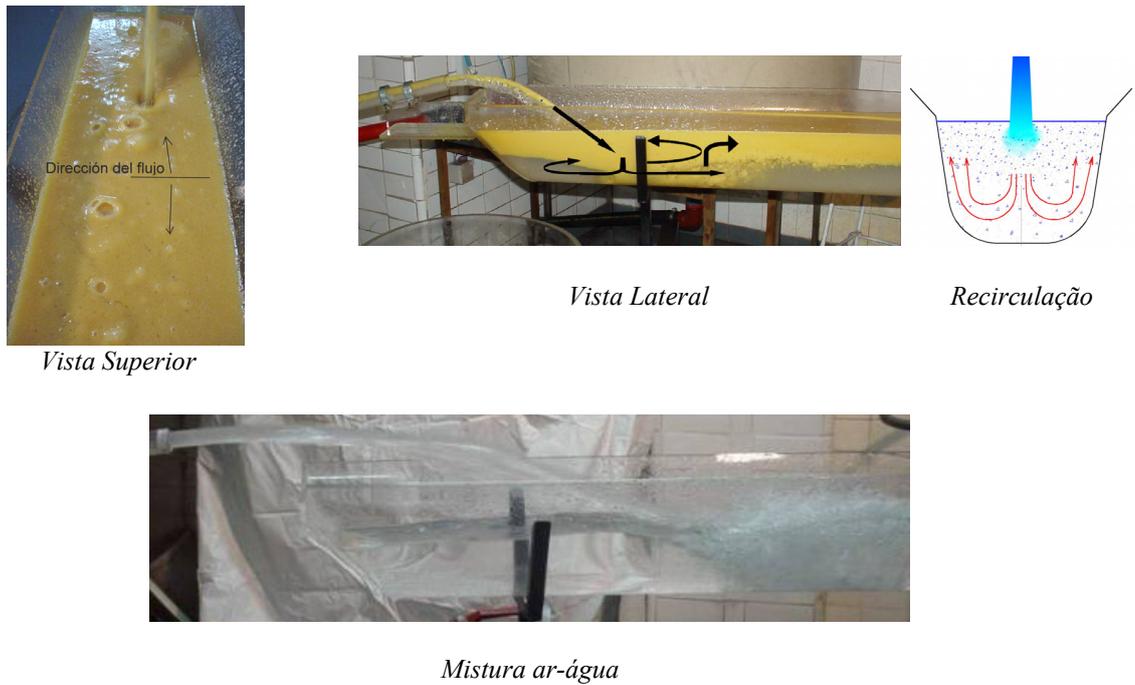


Figura 2.16. Zona de recirculação com fluxo reverso e eclusão de ar. Reproduzido de Begnis Brandaleze e Topolevzky (2005).

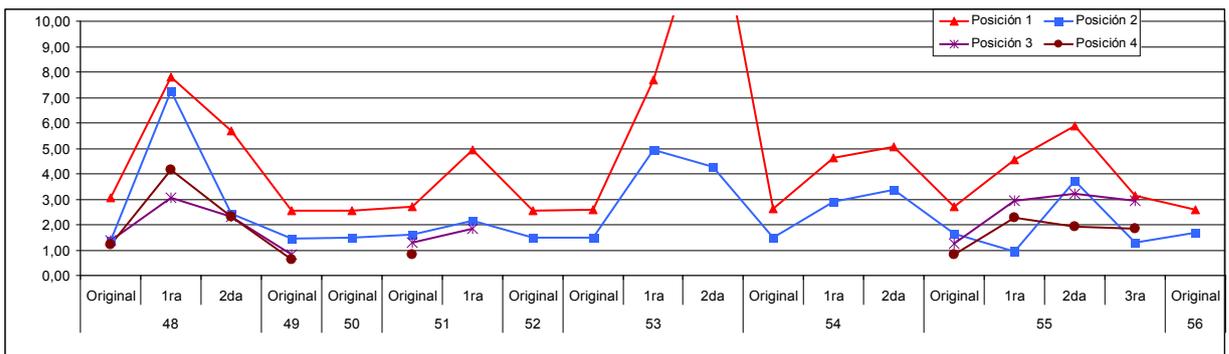
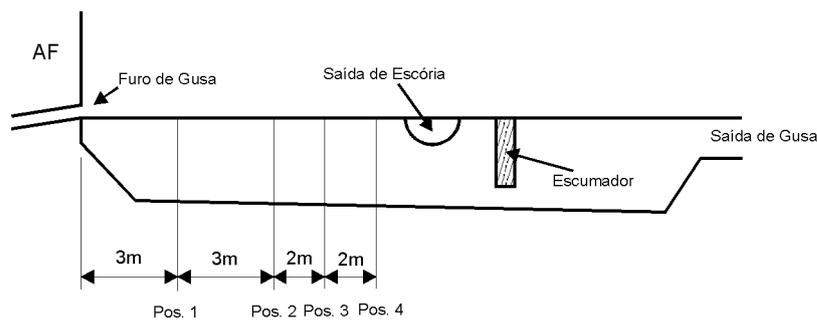


Figura 2.17. Taxa de desgaste do canal do alto-forno em quatro diferentes posições a partir do furo de gusa em mm/1000ton. de gusa durante 9 corridas, segundo Begnis, Brandaleze e Topolevsky (2005).

Em sua totalidade, os artigos apresentados nesta Seção são carentes de esclarecimentos e detalhes que permitam a sua reprodutibilidade exata tanto numérica quanto fisicamente. Não obstante, os resultados apresentam semelhanças entre si como a recirculação lateral com fluxo reverso, acentuada taxa de desgaste na lateral da zona crítica, bem como turbulência e

emulsificação considerável nesta região. E, a mais interessante, é a observância por parte dos autores de que o processo corrosivo é a principal causa de desgaste, facilitado pelo regime de escoamento e superposto a um campo de tensões cisalhantes relativamente baixas, mas contínuas que também promove a erosão da superfície.

CAPÍTULO

3

MODELAMENTO MATEMÁTICO

3.1 Introdução

Este Capítulo descreve a fundamentação teórica do modelamento de escoamentos multifásicos multidimensionais turbulentos e não estacionários deste trabalho, no entanto, sem a pretensão de ser uma revisão detalhada sobre todas as abordagens possíveis. Longe disto, a quantidade de informações e artigos que tratam de escoamentos multifásicos e das suas diversas particularidades é imensa e a compilação de todas estas nuances e peculiaridades em um único trabalho seria uma tarefa hercúlea.

O objetivo maior deste Capítulo é o de tentar descrever o processo de obtenção das equações dos modelos matemáticos utilizados neste trabalho de uma maneira organizada dentro do contexto. Esta preocupação se deu principalmente devido à dificuldade em se encontrar na literatura esta monta de informações de uma forma conjunta, auxiliando principalmente àqueles que se iniciam no estudo de escoamentos multifásicos, e permitindo ao leitor entender como os modelos aplicados foram obtidos. Um outro motivo é o de proporcionar o entendimento da física embutida nas equações e com isto aplicar os modelos de forma coerente dentro das limitações de cada um.

Uma possível abordagem de escoamentos multifásicos se faz pela representação matemática de campos macroscópicos e relações constitutivas baseadas na hipótese do contínuo. Assinalam-se duas metodologias que permitem a dedução dos modelos: a metodologia de *Volume de Controle* e a de *Promediação*. Ambas serão descritas e as implicações de cada metodologia com suas vantagens e desvantagens serão discutidas.

Os modelos descritos não de se reportar apenas aos balanços de massa, quantidade de movimento e propriedades turbulentas. O balanço de energia não será necessário, visto que o sistema será considerado isotérmico. Contudo, os mesmos artifícios matemáticos podem ser aplicados ao balanço de energia.

3.2 Metodologia de Volumes de Controle

Pode-se arriscar dizer que esta é a mais difundida metodologia para obtenção de equações de conservação. É amplamente utilizada no meio acadêmico e aplicada aos mais variados tipos de problemas. E apresentar esta metodologia, além de introduzir o leitor familiarizado com a filosofia do método de volumes finitos o modelamento de escoamentos multifásicos, pode salientar diferenças entre abordagens e as implicações de cada uma.

3.2.1 Fração Volumétrica

Seja $R_\alpha(V)$ a fração do volume arbitrário V , ocupado por duas fases, α e β , segundo a Figura 3.1. E seja $V_\alpha(\mathbf{x}, t)$ o volume da fase α no interior de V , tem-se,

$$R_\alpha(V) = \frac{V_\alpha(\mathbf{x}, t)}{V}. \quad (3.1)$$

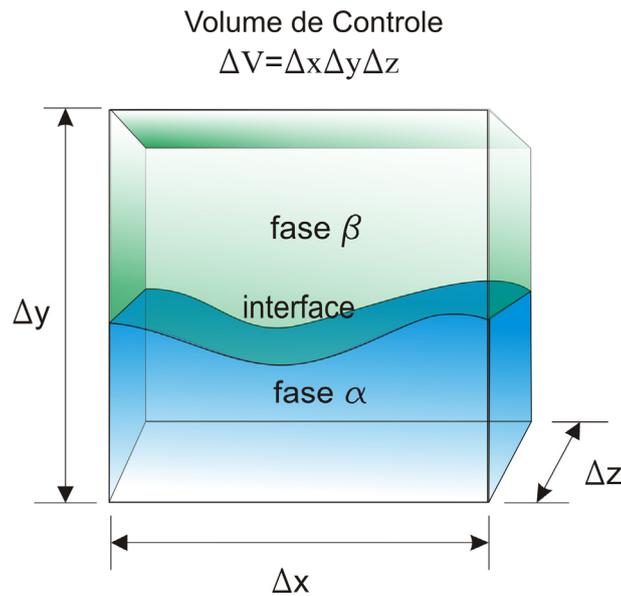


Figura 3.1. Volume de controle contendo duas fases imiscíveis e separadas pela interface.

Colapsando o volume V , fazendo-o tender a zero em um ponto \mathbf{x} qualquer contido em V , onde $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$, pode-se definir o conceito de fração volumétrica, $r_\alpha(\mathbf{x}, t)$:

$$r_\alpha(\mathbf{x}, t) = \lim_{V \rightarrow 0} R_\alpha(\mathbf{x}, t). \quad (3.2)$$

O mesmo pode ser feito para todas as fases que constituem o sistema. Mas por hora, considerar-se-á apenas uma delas: a fase α .

3.2.2 Conservação da Massa

A concentração mássica de cada fase é definida de maneira similar à fração. Seja, portanto, a massa da fase α contida no volume V dada por $M_\alpha(V)$. A sua concentração mássica é então definida como

$$\rho_\alpha(\mathbf{x}, t) = \frac{M_\alpha(V)}{V_\alpha(\mathbf{x}, t)}. \quad (3.3)$$

Note que a concentração mássica é calculada por *unidade de volume da fase α* . A massa da fase α por unidade total de volume material V é dada por $r_\alpha(\mathbf{x}, t)\rho_\alpha(\mathbf{x}, t)$. A quantidade de massa presente em um volume de controle arbitrário é calculada por

$$\int_V r_\alpha \rho_\alpha dV. \quad (3.4)$$

A massa de uma determinada fase contida no volume de controle pode variar no tempo por dois diferentes processos.

O primeiro é devido ao escoamento pelas fronteiras de V , ∂V , assim, o fluxo de massa por unidade de área e tempo é dado por $r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{n}}$, sendo $\hat{\mathbf{n}}$ o vetor normal unitário ao elemento diferencial de superfície, ∂V . A velocidade \mathbf{u}_α é a velocidade do baricentro do volume material ocupado pela fase α , sendo assim chamada de *velocidade baricêntrica*.

O segundo processo é devido à transferência de massa por unidade de volume e tempo através da interface que separa duas fases distintas. Esta transferência pode se dar por diversos motivos como, por exemplo, mudança de estado, como em uma ebulição; dissolução de um componente de uma fase em outra, como em processos de extração, ou mesmo reações químicas. Esta transferência de massa se dá a uma taxa Γ_α em unidades de massa da fase transferida por unidade de tempo e volume.

Aplicando o Teorema de Transporte de Reynolds e o Teorema de Gauss (Teorema da Divergência) a um volume de controle *fixo*²,

$$\frac{d}{dt} \int_V r_\alpha \rho_\alpha dV + \int_{\partial V} r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = \int_V \Gamma_\alpha dV, \quad (3.5)$$

e desenvolvendo, obtém-se

$$\int_V \left[\frac{\partial (r_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) - \Gamma_\alpha \right] dV = 0. \quad (3.6)$$

² Note que na definição $V \neq V(t)$

O *Lemma* de Dubois-Reymond diz que se uma integral de volume de uma função contínua sobre um volume arbitrário é nula o seu argumento deve ser nulo (HOLST, 1992).

Tomando-se esta premissa como verdadeira, da Equação (3.6) obtém-se a equação de conservação da massa da fase α em sua forma diferencial,

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = \Gamma_\alpha. \quad (3.7)$$

3.2.3 Quantidade de Movimento

A quantidade de movimento da fase α no interior de V é definida por

$$\int_V r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha dV. \quad (3.8)$$

A quantidade de movimento dentro do volume de controle pode ser alterada devido ao fluxo de massa advectivo que transporta quantidade de movimento através da superfície de controle ∂V . Esta parcela pode ser expressa como

$$\int_{\partial V} r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{n}} dS. \quad (3.9)$$

O fluido que circunda o volume de controle exerce forças no fluido contido neste volume de controle através da fronteira,

$$\int_{\partial V} r_\alpha \mathbf{t}_\alpha dS. \quad (3.10)$$

A força ou tração por unidade de área exercida sobre o fluido contido em V , \mathbf{t}_α , é resultado da ação das tensões aplicadas à superfície ∂V . Assim, a Equação (3.10) pode ser reescrita como

$$\int_{\partial V} r_\alpha \bar{\mathbf{T}}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{n}} dS, \quad (3.11)$$

onde $\bar{\mathbf{T}}_\alpha$ denota o tensor tensão aplicado à superfície ∂V orientada de acordo com o vetor normal unitário $\hat{\mathbf{n}}$. A tensão pode ser entendida como um fluxo de quantidade de movimento através de uma superfície material devido ao movimento molecular do fluido. Este tensor traz então uma informação da escala microscópica à escala macroscópica: de como a matéria distribui a energia contida no movimento de cada partícula que constitui o fluido.

A força de campo ou de corpo devido ao campo gravitacional tem a seguinte forma:

$$\int_V r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} dV, \quad (3.12)$$

onde \mathbf{g} é a aceleração do campo gravitacional.

Como as fases estão em contato umas com as outras, há troca de informação por esta superfície material e representa a interação entre as diversas fases presentes. Este termo é o “Calcanhar de Aquiles” dos modelos. Muito esforço tem sido devotado no estudo de como se dá a interação e troca de quantidade de movimento entre as distintas fases através da interface (GEORG, REZENDE e MALISKA, 2008; MALISKA *et al.*, 2008). Todavia, por hora, seja qual for a forma matemática da expressão que descreve este processo, para a obtenção das equações de conservação este importante aspecto não é relevante. Isto assinalado, pode-se representar esta troca de quantidade de movimento por

$$\int_V \mathbf{M}_\alpha dV, \quad (3.13)$$

onde \mathbf{M}_α denota a força interfacial por *unidade de volume*. \mathbf{M}_α pode ser chamada também de densidade de força interfacial.

Caso haja processos de transferência de massa (mudança de estado, dissolução, reação química, etc.), essa massa que atravessa a interface carrega consigo quantidade de movimento, então, se Γ_α é a taxa de transferência de massa por unidade de volume, a quantidade de movimento transportada por esta quantidade de matéria será dada por

$$\int_V \Gamma_\alpha \mathbf{u}_{ai} dV, \quad (3.14)$$

onde \mathbf{u}_{ai} representa a *velocidade interfacial* da fase α , não necessariamente igual à velocidade baricêntrica e nem uniforme para cada ponto da interface como é ilustrado na Figura 3.2.

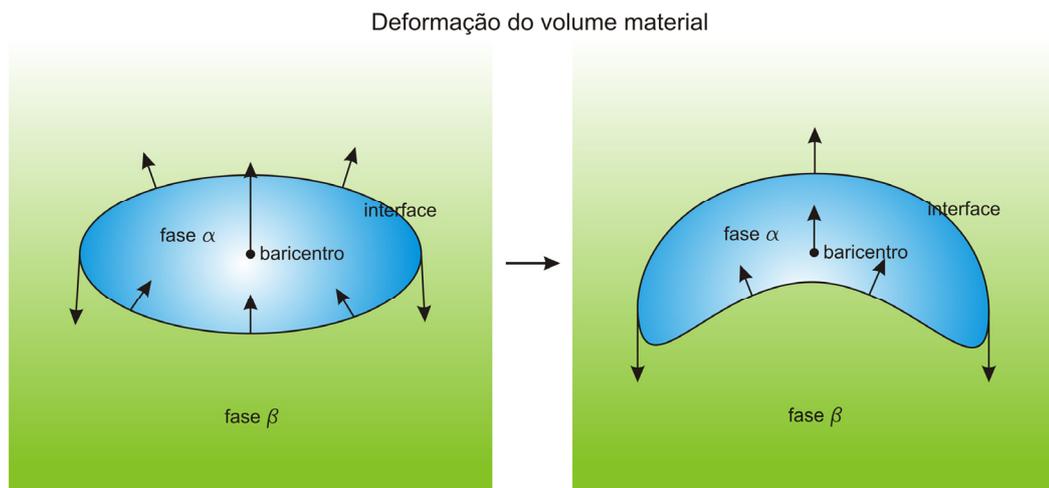


Figura 3.2. Exemplo de como o volume material pode apresentar velocidades com magnitudes e direções distintas na interface e no seu baricentro, resultando na deformação deste volume.

A dificuldade de se determinar a velocidade da interface em cada ponto pode ser contornada assumindo a hipótese de $\mathbf{u}_{ai} \cong \mathbf{u}_\alpha$. Assim, o balanço de quantidade de movimento da fase α é dado por

$$\frac{d}{dt} \int_V r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha dV + \int_{\partial V} r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\partial V} r_\alpha \bar{\mathbf{T}}_\alpha \cdot \mathbf{n} dS + \int_V (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} + \mathbf{M}_\alpha + \Gamma_\alpha \mathbf{u}_\alpha) dV. \quad (3.15)$$

Aplicando rigorosamente os mesmos teoremas anteriores a um volume de controle fixo, obtém-se a equação de conservação de quantidade de movimento da fase α :

$$\frac{\partial (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = \nabla \cdot (r_\alpha \bar{\mathbf{T}}_\alpha) + r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} + \mathbf{M}_\alpha + \Gamma_\alpha \mathbf{u}_\alpha. \quad (3.16)$$

O segundo termo do lado esquerdo da igualdade, o produto $\mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha$, é uma grandeza tensorial cujo divergente resulta em uma grandeza vetorial. Para que isto fique notório nas equações e o produto $\mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha$ não seja visto erroneamente como uma simples multiplicação, ele será representado pelo *produto diádico*. Maiores detalhes sobre a notação indicial e os operadores podem ser encontrados no Apêndice 1, assim,

$$\mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\alpha \equiv \mathbf{u}_\alpha \otimes \mathbf{u}_\alpha = u_\alpha \mathbf{e}_i \otimes u_\alpha \mathbf{e}_j = u_\alpha u_\alpha \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j, \quad (3.17)$$

onde \mathbf{e}_i representa o vetor de base unitário, $\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$ a díade, e o símbolo \otimes o operador diádico.

Portanto, a Equação (3.16), pode ser reescrita como

$$\frac{\partial (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha \otimes \mathbf{u}_\alpha) = \nabla \cdot (r_\alpha \bar{\mathbf{T}}_\alpha) + r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} + \mathbf{M}_\alpha + \Gamma_\alpha \mathbf{u}_\alpha. \quad (3.18)$$

A metodologia de volume de controle aplicada para a obtenção das equações de conservação da massa e quantidade de movimento padece de um sério problema de interpretação. Pela definição da Equação (3.2), quando o volume V tende a zero implica que V tende ao ponto \mathbf{x} , e fisicamente duas porções de matéria não podem estar presentes no mesmo ponto do espaço ao mesmo instante tempo³. Pois, segundo a hipótese do contínuo, há uma distribuição contínua de matéria, e para cada ponto do espaço matematicamente identificado assume-se que há apenas *uma* partícula de fluido associada. Assim, $r_\alpha(\mathbf{x}, t)$ é igual a um no ponto \mathbf{x} quando a fase α está presente no volume V e quando este tende a zero no ponto \mathbf{x} , ou igual a zero quando no ponto \mathbf{x} a fase α não estiver presente. A consequência disto é clara: a *descontinuidade* da Equação (3.2), o que contradiz o Teorema 3.1 e, portanto, $r_\alpha(\mathbf{x}, t)$ definida desta maneira não é uma propriedade que possa descrever rigorosamente os campos macroscópicos. Esta é a principal dificuldade na modelagem matemática destes escoamentos (ISHII e MISHIMA, 1984).

Pode-se argumentar que o volume V não seja tão pequeno como argumenta Drew (1992) em uma discussão similar a apresentada aqui, e contornar este problema, pois este volume material deve estar numa escala tal que as flutuações moleculares não afetem os

³ Sob a ótica da hipótese do contínuo e, portanto, desconsiderando fenômenos em escala quântica.

campos no seu interior, e nem que seja grande demais de modo que as variações espaciais sejam apreciáveis.

Uma outra forma mais intuitiva de entender este argumento pode ser a seguinte: tomando-se um *volume material arbitrário* diferente de zero, sua integral volumétrica não pode ser zero, pois seu volume é finito! Portanto, conclui-se que qualquer função contínua dentro deste volume integrada sobre esta região resulta nula se e somente se esta função é nula no domínio de integração. O que, sob o ponto de vista numérico, é aceitável, pois há sempre uma região com volume diferente de zero, e assim, na prática estar-se-ia utilizando como definição de fração volumétrica a Equação (3.1), ao invés da Equação (3.2).

A abordagem a ser apresentada na Seção seguinte não carece destes argumentos e possui maior rigor matemático.

3.3 Abordagem Euleriana

Teoricamente, tanto do ponto de vista físico como matemático, toda esta formulação apresentada não seria necessária, visto que cada fase possui a sua equação de conservação quantidade de movimento, energia e conservação de massa *local* na forma padrão. Caso se pudesse saber *exatamente* a posição de cada interface, a condição de contorno apropriada nesta posição seria uma condição de conservação de fluxo. Esta condição é comumente chamada de condição de salto (PASSMAN, 1989).

Localmente, um escoamento multifásico consiste em certo número de regiões preenchidas por uma *única fase* limitada por uma interface. Isto resulta em um problema com múltiplas fronteiras móveis e posições desconhecidas. Portanto, o volume ou região que cada fase ocupa seria o domínio de cálculo desta fase cujas fronteiras são determinadas pelo domínio físico do escoamento global onde são aplicadas as condições de contorno - caso a fase esteja em contato com esta fronteira, e pelas interfaces onde são aplicadas as condições de salto, fechando matemática e fisicamente o sistema (PASSMAN, 1989). A solução deste problema é hoje no mínimo impraticável, ou mesmo impossível (ISHII e MISHIMA, 1984).

Shen e Hwang (1989) argumentam que em um escoamento multifásico o fluxo em um determinado volume de controle é randômico e somente um comportamento médio pode ser descrito por um modelo matemático determinístico, e é o que será abordado na próxima Seção.

3.3.1 Promediação

Entende-se por promediação o ato de se calcular a média de qualquer conjunto de valores. Entretanto, há mais de um procedimento de promediação dependendo do problema. Talvez o mais conhecido procedimento de média no campo da mecânica dos fluidos seja a Média de Reynolds ou *Reynolds Average* que nada mais é do que uma média temporal das equações de quantidade de movimento. Esta promediação das equações de Navier-Stokes gera um conjunto de equações conhecido como *Reynolds Average Navier-Stokes Equations*, ou RANS. Esta promediação foi proposta por Reynolds em 1895 (REYNOLDS, 1895; WILCOX, 1994; JACKSON e LAUNDER, 2007) pelos mesmos motivos já expostos por Shen e Hwang (1989): o comportamento randômico ou caótico do sistema.

Médias volumétricas também são procedimentos comuns, muito aplicadas a escoamentos em meios porosos (WHITAKER, 1999). Todas estas médias têm a sua utilidade em certas situações específicas, mas também apresentam algumas deficiências (DREW, 1992), contudo, há de se ressaltar que estas incongruências surgem do mau uso destes procedimentos. Esta mesma opinião é expressa por Jackson (2000).

A média temporal é apropriada para escoamentos estacionários, ou seja, um escoamento que, na média, não varia com o tempo. A média temporal é definida como

$$F_T(\mathbf{x}) = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} f(\mathbf{x}, t) dt, \quad (3.19)$$

onde T é o intervalo de promediação.

A média volumétrica é mais apropriada para escoamentos homogêneos onde o escoamento é, na média, uniforme em todas as direções:

$$F_V(t) = \frac{1}{V} \iiint f(\mathbf{x}, t) dV. \quad (3.20)$$

Outra média também bastante comum é a média das realizações. É dada em termos de medidas de N experimentos idênticos:

$$F_R(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f_n(\mathbf{x}, t). \quad (3.21)$$

Este é o conceito mais elementar de média, e é muitas vezes também chamada de média conjunta na literatura (*ensemble average*) (DREW, 1983; DREW, 1992; BARBOSA JR, 2002). Uma generalização da *promediação conjunta* descrita a seguir é dada por Drew (1983).

Segundo a definição de Drew: um *processo* é definido como o *conjunto* dos possíveis *eventos* que podem ocorrer com determinadas condições de contorno e inicial. Uma

realização é definida como *um* possível evento que poderia ter ocorrido dentro do processo, ou seja, um dos elementos do conjunto. Assim, para um campo $f(\mathbf{x}, t)$ qualquer:

$$F_E(\mathbf{x}, t) = \int_E f(\mathbf{x}, t; \mu) dm(\mu), \quad (3.22)$$

onde $dm(\mu)$ é a *probabilidade* de se observar a realização ou evento μ dentro do conjunto ou “*ensemble*” – E - *de todos os possíveis eventos*. Este conceito de probabilidade irá ajudar a entender o significado das equações promediadas,

O procedimento de promediação utilizado aqui é o de média conjunta dada pela Equação (3.22), embora as Equações (3.21) e (3.22) sejam referidas por Paladino (2005) como o mesmo tipo de processo de promediação.

3.3.2 Função Indicadora de Fase

O comportamento aleatório de um escoamento multifásico é ocasionado não somente pelas flutuações turbulentas – quando este for o caso – mas também pelo movimento complexo das interfaces e a inevitável interação entre os dois fenômenos. Definir-se-á aqui um artifício matemático que permitirá descrever este tipo de escoamento.

Seja, portanto, definida a variável indicadora de fase ou variável característica de fase, χ_α , que indica a presença ou não da fase α em um ponto \mathbf{x} do domínio em um tempo t qualquer:

$$\chi_\alpha(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{se em } t \quad \mathbf{x} \in \alpha \\ 0 & \text{se em } t \quad \mathbf{x} \notin \alpha \end{cases}. \quad (3.23)$$

Uma propriedade desta função que será útil diz respeito à sua derivada material tomada sobre a interface i :

$$\frac{D_i \chi_\alpha}{Dt} = \frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_i \cdot \nabla \chi_\alpha = 0, \quad (3.24)$$

onde o sub-índice i representa a interface. Esta equação é denominada *equação topológica* (DREW, 1983; 1992).

3.3.3 Propriedades da Promediação

Algumas propriedades de interesse devem ser assinaladas de maneira a permitir o entendimento do procedimento a seguir. A promediação de funções submetidas a operadores diferenciais segue as seguintes regras:

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle f \rangle}{\partial t}, \quad (3.25)$$

$$\langle \nabla f \rangle = \nabla \langle f \rangle, \quad (3.26)$$

$$\left\langle \chi_\alpha \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \chi_\alpha f \rangle}{\partial t} - \left\langle f \frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t} \right\rangle, \quad (3.27)$$

$$\langle \chi_\alpha \nabla f \rangle = \nabla \langle \chi_\alpha f \rangle - \langle f \nabla \chi_\alpha \rangle, \quad (3.28)$$

onde o operador $\langle \rangle$ é o operador de promediação, segundo a Equação (3.22).

3.3.4 Equações Locais de Balanço

Dentro de cada fase as equações de balanço de quantidade de movimento, conservação da massa e, se for o caso, conservação da energia são válidas localmente e escritas em sua forma padrão. Tem-se então para conservação da massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (3.29)$$

Para a quantidade de movimento:

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot \bar{\mathbf{T}} + r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g}. \quad (3.30)$$

Assumindo o fluido Newtoniano e incompressível, o tensor tensão é dado por

$$\bar{\mathbf{T}} = -p\bar{\mathbf{I}} + 2\mu\bar{\mathbf{D}}, \quad (3.31)$$

onde p representa a pressão, $\bar{\mathbf{D}}$ o tensor taxa de deformação definido como:

$$\bar{\mathbf{D}} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \quad (3.32)$$

e $\bar{\mathbf{I}}$ o tensor identidade definido como:

$$\bar{\mathbf{I}} = \delta_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j, \quad (3.33)$$

onde δ_{ij} é o delta de Krönecker (ver Apêndice 1).

Todas estas equações são válidas dentro de cada material que compõe cada fase. De forma a facilitar o procedimento matemático, as Equações (3.29) e (3.30) podem ser representadas genericamente em sua forma canônica:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \phi = \nabla \cdot \mathbf{J} + \rho f, \quad (3.34)$$

onde ϕ é a propriedade conservada, \mathbf{J} o fluxo difusivo desta propriedade, f a sua fonte e/ou sumidouro, e \mathbf{u} o vetor velocidade. Na interface ocorre a descontinuidade das propriedades, contudo, os seus fluxos ainda devem ser conservados, assim sendo

$$[\rho \phi (\mathbf{u} - \mathbf{u}_i) + \mathbf{J}] \cdot \hat{\mathbf{n}} = S_i^\phi, \quad (3.35)$$

onde \mathbf{u}_i representa a velocidade da interface, S_i^ϕ a fonte ou sumidouro de ϕ sobre a interface e $\hat{\mathbf{n}}$ o vetor normal unitário à interface. Na Tabela 3.1 são definidas as propriedades que cada um dos termos supracitados podem representar.

Tabela 3.1. Variáveis das equações de conservação.

Equação de Conservação	ϕ	\mathbf{J}	f	S_i^ϕ
Massa	1	0	0	0
Quantidade de Movimento	\mathbf{u}	$\bar{\mathbf{T}}$	\mathbf{g}	\mathbf{m}_i^σ

Multiplicando-se a Equação (3.34) pela função indicadora de fase, χ_α , e aplicando o operador de promediação tem-se:

$$\left\langle \chi_\alpha \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \right\rangle + \langle \chi_\alpha \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \phi \rangle - \langle \chi_\alpha \nabla \cdot \mathbf{J} \rangle - \langle \chi_\alpha \rho f \rangle = 0. \quad (3.36)$$

Os campos das variáveis instantâneas podem ser decompostos como uma superposição linear de um campo médio mais uma flutuação.

$$\begin{aligned} \phi &= \langle \phi \rangle + \phi' & \mathbf{u} &= \langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}' \\ \rho &= \langle \rho \rangle + \rho' & \mathbf{J} &= \langle \mathbf{J} \rangle + \mathbf{J}' \end{aligned} \quad (3.37)$$

Deve-se agora, substituindo a Equação (3.37) e utilizando-se as Equações (3.24) a (3.28), desenvolver termo a termo a Equação (3.36),

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \chi_\alpha (\rho \langle \phi \rangle) \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \chi_\alpha (\rho \langle \mathbf{u} \rangle \langle \phi \rangle) \rangle - \nabla \cdot \langle \chi_\alpha [\langle \mathbf{J} \rangle - (\rho \mathbf{u}' \phi')] \rangle - \langle \chi_\alpha \rho f \rangle = \\ \left\langle \left\{ \rho \langle \phi \rangle [(\langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i] - (\langle \mathbf{J} \rangle + \mathbf{J}') \right\} \cdot \nabla \chi_\alpha \right\rangle \end{aligned} \quad (3.38)$$

O procedimento de cálculo detalhado consta no Apêndice 2.

A Equação (3.38) é a equação de conservação promediada da propriedade ϕ . Com o uso da Tabela 3.1 é possível agora obter cada equação de conservação. Para a conservação da massa tem-se:

$$\frac{\partial \langle \chi_\alpha \rho \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \chi_\alpha \rho \langle \mathbf{u} \rangle \rangle = \left\langle \rho [(\langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i] \cdot \nabla \chi_\alpha \right\rangle, \quad (3.39)$$

e para a quantidade de movimento:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \chi_\alpha (\rho \langle \mathbf{u} \rangle) \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \chi_\alpha (\rho \langle \mathbf{u} \rangle \langle \mathbf{u} \rangle) \rangle = \nabla \cdot \langle \chi_\alpha [\langle \bar{\mathbf{T}} \rangle - (\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}')] \rangle + \langle \chi_\alpha \rho \mathbf{g} \rangle + \dots \\ \dots + \left\langle \left\{ \rho \langle \mathbf{u} \rangle [(\langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i] - (\langle \bar{\mathbf{T}} \rangle + \bar{\mathbf{T}}') \right\} \cdot \nabla \chi_\alpha \right\rangle \end{aligned} \quad (3.40)$$

De acordo com a Equação (3.31) o tensor tensão para μ constante pode ser escrito como:

$$\langle \bar{\mathbf{T}} \rangle = -\langle p \rangle \bar{\mathbf{I}} + 2\mu \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle. \quad (3.41)$$

Substituindo a Equação (3.41) na Equação (3.40), tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \chi_\alpha (\rho \langle \mathbf{u} \rangle) \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \chi_\alpha (\rho \langle \mathbf{u} \rangle \langle \mathbf{u} \rangle) \rangle = & -\nabla \langle \chi_\alpha \langle p \rangle \rangle + \nabla \cdot \langle \chi_\alpha [2\mu \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle - (\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}')] \rangle + \dots \\ & \dots + \langle \chi_\alpha \rho \mathbf{g} \rangle + \left\langle \rho \langle \mathbf{u} \rangle [(\langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i] - (\langle \bar{\mathbf{T}} \rangle + \bar{\mathbf{T}}') \right\rangle \cdot \nabla \chi_\alpha \end{aligned} \quad (3.42)$$

3.3.5 Variáveis Promediadas

A forma que se apresentam as Equações (3.39) e (3.42) não é apropriada na descrição do escoamento, pois todas as propriedades locais são definidas em termos da função indicadora de fase. A aplicação do operador de média à função indicadora de fase resulta em uma variável que comumente é denominada de *fração volumétrica*. Mas isto é rigorosamente correto somente quando a promediação é espacial. Quando a promediação é temporal o termo adequado é *tempo relativo de residência* (DREW, 1983). Neste trabalho o termo fração volumétrica é preferido apenas pela familiaridade com o conceito já apresentado na Seção 3.2. Então:

$$r_\alpha \equiv \langle \chi_\alpha \rangle \quad (3.43)$$

A função indicadora de fase é por definição descontínua. A princípio pode parecer que o problema de singularidade nas equações ainda persiste. Todavia, apenas a sua média é usada, ou seja, dentro do operador integral agindo, portanto, como uma função *delta de Dirac*. À luz da discussão dos procedimentos de promediação e especificamente a Equação (3.22), a média da função indicadora de fase representa a *probabilidade* de se encontrar a fase α no ponto \mathbf{x} ao tempo t . E esta probabilidade é contínua variando de zero até um.

No chamado modelo de dois fluidos, geralmente diz-se que os campos das variáveis de cada fase são contínuos e interpenetrantes, os campos coexistem sobrepostos em uma posição \mathbf{x} do espaço. E assim à primeira vista, duas fases, dispersas ou não, podem ocupar o mesmo lugar no espaço ao *mesmo tempo*, o que, de acordo com a hipótese do contínuo, é inconsistente. Isto aparentemente é um paradoxo, e ainda temos o mesmo problema da metodologia de volumes de controle, e ainda gerado por uma abordagem algébrica mais laboriosa.

Entretanto, quando o conceito de probabilidade é levado em conta, esta argumentação não procede. O significado da Equação (3.38) é que o valor de um campo qualquer ϕ de uma fase α a uma coordenada de tempo-espaço definida é obtido pelo valor que o campo assume neste ponto vezes a probabilidade de esta fase estar presente neste ponto. Se a probabilidade neste ponto é zero o valor do campo observado é zero.

Deste modo, os resultados obtidos com o chamado modelo de dois fluidos representam a sobreposição de campos de probabilidade dos campos das variáveis instantâneas caso somente elas estivessem presentes no domínio. Assim, duas fases podem coexistir em determinado ponto, pois ambas possuem alguma probabilidade de serem encontradas ali. A única restrição é que o somatório das probabilidades seja igual à unidade, ou seja,

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} r_{\alpha} = 1 \quad (3.44)$$

onde N_f representa o número de fases. Esta equação é também chamada de *equação conservação do volume*.

Vale ressaltar que este modelo é válido assumindo-se que as fases estão misturadas em uma escala muito menor do que a que se deseja resolver.

Resta ainda um detalhe a ser assinalado quanto às equações promediadas: dificilmente os resultados de um único experimento, ou realização serão reproduzidos *exatamente* pelo modelo acima. O que estas equações fornecem é a média das realizações, ou seja, o modelo reproduz a média do conjunto de experimentos. E esta deve ser a resposta do modelo, as flutuações instantâneas se perdem do procedimento de promediação.

Tendo discutido isto, a média da variável indicadora de fase dada pela Equação (3.43) indicaria a *presença potencial da fase* (BURNS, 2002), mas o termo *fração volumétrica* ainda será usado apenas por convenção.

As demais variáveis são definidas como variáveis ponderadas. Pode-se ponderar em função de χ_{α} , e neste caso tem-se uma *média física*, ou pondera pela massa, $\chi_{\alpha}\rho$, e neste caso tem-se uma *média mássica*:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\alpha} \rangle &\equiv \frac{\langle \chi_{\alpha}\rho \langle \phi \rangle \rangle}{\langle \chi_{\alpha}\rho \rangle} = \frac{\langle \chi_{\alpha}\rho \langle \phi \rangle \rangle}{r_{\alpha}\rho} \\ \langle \phi_{\alpha} \rangle &\equiv \frac{\langle \chi_{\alpha} \langle \phi \rangle \rangle}{\langle \chi_{\alpha} \rangle} = \frac{\langle \chi_{\alpha} \langle \phi \rangle \rangle}{r_{\alpha}} \end{aligned} \quad (3.45)$$

Tem-se então para a concentração mássica:

$$\langle \rho_{\alpha} \rangle \equiv \frac{\langle \chi_{\alpha}\rho \rangle}{\langle \chi_{\alpha} \rangle} = \frac{\langle \chi_{\alpha}\rho \rangle}{r_{\alpha}} \Rightarrow r_{\alpha} \langle \rho_{\alpha} \rangle = \langle \chi_{\alpha}\rho \rangle; \quad (3.46)$$

Velocidade:

$$\langle \mathbf{u}_{\alpha} \rangle \equiv \frac{\langle \chi_{\alpha}\rho \langle \mathbf{u}_{\alpha} \rangle \rangle}{\langle \chi_{\alpha}\rho \rangle} = \frac{\langle \chi_{\alpha}\rho \langle \mathbf{u}_{\alpha} \rangle \rangle}{r_{\alpha} \langle \rho_{\alpha} \rangle} \Rightarrow r_{\alpha} \langle \rho_{\alpha} \rangle \langle \mathbf{u}_{\alpha} \rangle = \langle \chi_{\alpha}\rho \langle \mathbf{u}_{\alpha} \rangle \rangle; \quad (3.47)$$

Pressão:

$$\langle p_\alpha \rangle \equiv \frac{\langle \chi_\alpha \langle p \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \langle p \rangle \rangle}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \langle p_\alpha \rangle = \langle \chi_\alpha \langle p \rangle \rangle; \quad (3.48)$$

Tensor taxa de deformação:

$$\mu_\alpha \langle \bar{\mathbf{D}}_\alpha \rangle \equiv \frac{\langle \chi_\alpha \mu \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \mu \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle \rangle}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \mu_\alpha \langle \bar{\mathbf{D}}_\alpha \rangle = \langle \chi_\alpha \mu \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle \rangle; \quad (3.49)$$

Tensor de Reynolds:

$$\bar{\mathbf{T}}_\alpha^{Re} \equiv -\frac{\langle \chi_\alpha (\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}') \rangle}{\langle \chi_\alpha \rangle} = -\frac{\langle \chi_\alpha (\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}') \rangle}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \bar{\mathbf{T}}_\alpha^{Re} = -\langle \chi_\alpha (\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}') \rangle; \quad (3.50)$$

Força de corpo:

$$\langle \chi_\alpha \rho \mathbf{g} \rangle = \langle \chi_\alpha \rho \rangle \mathbf{g} = r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} \Rightarrow \langle \chi_\alpha \rho \mathbf{g} \rangle = r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \mathbf{g}. \quad (3.51)$$

Quando efetuada a promediação das equações de conservação locais, surgiram termos que não estavam presentes. Estes termos são o lado direito do sinal de igualdade da Equação (3.38) e representam a interação entre as fases pela interface.

Tem-se então para o fluxo de massa interfacial:

$$\Gamma_\alpha \equiv \langle \rho [(\langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i] \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle. \quad (3.52)$$

Para uma melhor compreensão, o último termo da Equação (3.42) será reescrito na forma

$$\langle \rho \langle \mathbf{u} \rangle [(\langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i] \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle - \langle (\langle \bar{\mathbf{T}} \rangle + \bar{\mathbf{T}}') \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle. \quad (3.53)$$

O 1º termo da Equação (3.53) representa a quantidade de movimento transportada pelo fluxo de massa interfacial Γ_α , então

$$\Gamma_\alpha \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \equiv \langle \rho \langle \mathbf{u} \rangle [(\langle \mathbf{u} \rangle + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i] \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle. \quad (3.54)$$

O 2º termo representa a resultante das forças que atuam na interface, assim

$$\mathbf{M}_\alpha \equiv -\langle \bar{\mathbf{T}} \cdot \nabla \chi_\alpha \rangle. \quad (3.55)$$

Substituindo as Equações (3.46) a (3.55) nas Equações (3.39) e (3.42) obtém-se as equações conservação promediadas para conservação da massa,

$$\frac{\partial (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) = \Gamma_\alpha, \quad (3.56)$$

e quantidade de movimento,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \otimes \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) = & -\nabla (r_\alpha \langle p_\alpha \rangle) + \dots \\ \dots + \nabla \cdot [r_\alpha (2\mu_\alpha \langle \bar{\mathbf{D}}_\alpha \rangle + \bar{\mathbf{T}}_\alpha^{Re})] + r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \mathbf{g} + \Gamma_\alpha \mathbf{u}_\alpha + \mathbf{M}_\alpha \end{aligned} \quad (3.57)$$

As condições de salto promediadas dizem que para a conservação da massa deve-se ter

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} \Gamma_{\alpha} = 0, \quad (3.58)$$

ou seja, o fluxo mássico deve ser conservado, e para a conservação de quantidade de movimento:

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} (\Gamma_{\alpha} \langle \mathbf{u}_{\alpha} \rangle + \mathbf{M}_{\alpha}) = \mathbf{m}_i^{\sigma}, \quad (3.59)$$

onde \mathbf{m}_i^{σ} é a força exercida na interface devido à tensão superficial e N_f o número de fases. Assim, o desequilíbrio de forças que surge na interface é contrabalançado pela força exercida pela tensão superficial. Quando os seus efeitos são desconsiderados, tem-se

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} (\Gamma_{\alpha} \langle \mathbf{u}_{\alpha} \rangle + \mathbf{M}_{\alpha}) = 0 \quad (3.60)$$

Diferentemente das equações obtidas pela metodologia de volumes de controle, os termos de interface surgiram naturalmente do processo de promediação, não sendo necessário postular a sua existência. As singularidades associadas à interface também não existem, pois a informação local agora não mais existe, e sim uma informação média, ou seja, houve perda de informação da escala microscópica. As condições de salto que eram condições de contorno aplicadas à interface, agora não passam de equações restritivas. Este é o ônus do processo de promediação.

O processo de promediação age como um filtro passa baixa eliminando flutuações locais instantâneas (ISHII e MISHIMA, 1984). Além disto, o sistema de equações locais que até então era matematicamente fechado, agora, devido ao procedimento de promediação, não o é mais, pois parte da informação foi perdida necessitando de equações de fechamento, as chamadas relações constitutivas (ISHII e MISHIMA, 1984; PASSMAN, 1989). Isto é muito similar ao que acontece na promediação temporal das equações de Navier-Stokes na modelagem da turbulência onde a tentativa de fechamento das equações gera momentos ou covariâncias de mais alta ordem (SILVEIRA NETO, 1998a)

O modelo deduzido aqui pode prever bem a distribuição das fases e dar bons resultados qualitativos e com dificuldade resultados quantitativos, pois é altamente dependente de como se modelam as forças interfaciais e a turbulência quando este for o caso (BURNS, 2002).

A Equação (3.57) foi obtida considerando-se os campos como uma superposição de uma média mais uma flutuação para que o tensor de Reynolds surgisse naturalmente em um único procedimento de promediação. Contudo, este não é o único modo e nem tão pouco tido

como o melhor ou mesmo correto, pois não há ainda uma concordância sobre o procedimento de média adequado para escoamentos multifásicos turbulentos.

O raciocínio aqui é o de que equações já são promediadas e contém o tensor de Reynolds não necessitando de uma promediação temporal subsequente. Esta é uma das abordagens possíveis (ver KASHIWA e VANDERHEYDEN, 2000; BURNS, 2002).

Um segundo procedimento seria a não aplicação da Equação (3.37) e ter-se-ia como resultado:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha \otimes \mathbf{u}_\alpha) = & -\nabla(r_\alpha p_\alpha) + \nabla \cdot (r_\alpha 2\mu_\alpha \bar{\mathbf{D}}_\alpha) + \dots \\ & \dots + r_\alpha \rho_\alpha \mathbf{g} + \Gamma_\alpha \mathbf{u}_\alpha + \mathbf{M}_\alpha \end{aligned} \quad (3.61)$$

a qual seria seguida de uma promediação temporal. O procedimento inverso poderia ser também praticado, efetuando-se primeiramente uma promediação temporal das equações de conservação gerando as conhecidas *RANS* com uma subsequente promediação conjunta. E, considerando-se $\mathbf{J} = \langle \bar{\mathbf{T}}_\alpha \rangle + \bar{\mathbf{T}}_\alpha^{Re}$, isto teria por conseqüência o surgimento explícito de componentes do tensor de Reynolds na resultante das forças que agem na interface.

Uma média ponderada pela massa ou de Favre também é possível o que gera uma covariância (ou momento de 2ª ordem) entre as flutuações dos campos de fração volumétrica e velocidade, denominada de dispersão turbulenta.

Estes procedimentos acabam por gerar termos adicionais nas equações de transporte, e por mais rigorosos e bem justificados que sejam no final há sempre a necessidade de se postular equações de fechamento e a imposição criteriosa de equações constitutivas é sempre muito dependente de ajuste experimental, e a universalidade destas equações é sempre questionável.

Todo o procedimento aqui descrito também pode ser aplicado às equações de transporte associadas à modelagem da turbulência, como os modelos *k- ω* ou *k- ϵ* , por exemplo. O efeito seria o surgimento de termos de interação destas propriedades através das interfaces e há alguns trabalhos que enveredam por este caminho. Isto será tratado ao seu tempo.

3.3.6 Modelo Heterogêneo

Retornando a Equação (3.57) há ainda algumas hipóteses que podem ser consideradas para o fechamento do sistema, pois temos $5N_f$ variáveis: $u_\alpha, v_\alpha, w_\alpha, p_\alpha$ e r_α em um conjunto de $3N_f$ equações de quantidade de movimento, N_f equações de continuidade e uma equação de restrição de fração volumétrica, ou seja, $4N_f + 1$ equações para um sistema de $5N_f$ variáveis

(desconsiderando por enquanto o tensor de Reynolds). Portanto, o sistema está sub-determinado.

Assumindo que o campo de pressão seja compartilhado entre as fases, tem-se

$$p_1 = p_2 = \dots = p_{N_f} = p. \quad (3.62)$$

Isto é numericamente conveniente, pois facilita o acoplamento das equações pelo campo de pressão e é aceitável para escoamentos subsônicos. Com esta restrição passa-se a ter $4N_f$ variáveis: \mathbf{u}_α , \mathbf{v}_α , \mathbf{w}_α , e r_α mais a pressão p fechando assim o sistema de $4N_f + 1$ variáveis com $4N_f + 1$ equações. Mas a hipótese pode levar o sistema a ser mal posto e em escoamentos gás-sólido e líquido-sólido outras formulações geralmente são preferidas (GIDASPOW, 1994), e neste caso, outras equações auxiliares, geralmente algébricas, são utilizadas.

Concluindo então, para este modelo, substituindo a definição do tensor taxa de deformação dada na Equação (3.32), tem-se:

$$\frac{\partial(r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) = \Gamma_\alpha \quad (3.63)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \otimes \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle) = & -\nabla(r_\alpha \langle p \rangle) + \dots \\ \dots + \nabla \cdot \left[r_\alpha \left(\mu_\alpha \langle \nabla \mathbf{u}_\alpha + \nabla \mathbf{u}_\alpha^T \rangle + \bar{\mathbf{T}}_\alpha^{Re} \right) \right] + r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \mathbf{g} + \Gamma_\alpha \mathbf{u}_\alpha + \mathbf{M}_\alpha \end{aligned} \quad (3.64)$$

$$\sum_{\alpha=1}^{N_p} r_\alpha = 1 \quad (3.65)$$

Este modelo é denominado heterogêneo, pois cada fase possui o seu próprio campo de velocidade. Um modelo apropriado para o tensor de Reynolds deve ainda ser determinado caso o escoamento seja turbulento, e equações constitutivas devem ser postuladas para se modelar a densidade de força interfacial. Caso contrário, os campos de velocidades não se “enxergam”, não se influenciando mutuamente. Uma breve discussão sobre estas equações terá lugar na Seção 3.6, pois grande parte dos sucessos e fracassos deste modelo se deve a elas.

3.3.7 Modelo Homogêneo

Um outro modelo muito útil é o chamado modelo homogêneo. Neste modelo além do campo de pressão, o campo de velocidade também é compartilhado por todas as fases, ou seja,

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 = \dots = \mathbf{u}_{N_f} = \mathbf{u}. \quad (3.66)$$

Este modelo se denomina homogêneo por existir apenas um campo de velocidade para todas as fases. Pode-se também pensá-lo como um caso limite do modelo heterogêneo onde

uma das fases é completamente arrastada pela outra e o campo de velocidade é contínuo pela interface. Somado-se as equações físicas de quantidade de movimento e desconsiderando a tensão superficial, obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t}(\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle) + \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle \otimes \langle \mathbf{u} \rangle) = -\nabla \langle p \rangle + \nabla \cdot \left[\left(\mu \langle \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \rangle + \bar{\mathbf{T}}^{Re} \right) \right] + \langle \rho \rangle \mathbf{g}, \quad (3.67)$$

onde se tem as chamadas propriedades de mistura

$$\langle \rho \rangle = \sum_{\alpha=1}^{N_p} r_{\alpha} \langle \rho_{\alpha} \rangle, \quad (3.68)$$

$$\mu = \sum_{\alpha=1}^{N_p} r_{\alpha} \mu_{\alpha}. \quad (3.69)$$

A conservação do volume ainda deve ser respeitada, e, por uma conveniência numérica que será tratada no Capítulo 4, a conservação da massa permanece a mesma do modelo heterogêneo, exceto que $\mathbf{u}_{\alpha} = \mathbf{u}$.

Segundo a condição de salto, o somatório das forças de interface deve ser igual a zero ou então igual a tensão superficial, caso ela seja considerada. Todos os termos de transferência de massa e quantidade de movimento interfacial se cancelam. Caso a tensão superficial seja importante, o somatório de todos os termos de interface deve ser igual a \mathbf{m}_i^{σ} e, portanto a Equação (3.67) recebe um termo fonte a mais:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle) + \nabla \cdot \left[\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle \otimes \langle \mathbf{u} \rangle - \left(\mu \langle \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \rangle + \bar{\mathbf{T}}^{Re} \right) \right] = -\nabla \langle p \rangle + \langle \rho \rangle \mathbf{g} + \mathbf{m}_i^{\sigma}. \quad (3.70)$$

Estas duas equações de quantidade de movimento têm a vantagem de não necessitar de modelagem dos termos de interface como o que descreve o arraste entre as fases, por exemplo, além de demandarem menor esforço computacional devido ao número menor de variáveis a serem calculadas. O uso do modelo homogêneo, com ou sem tensão superficial, não deve ser feito a qualquer tipo de escoamento sem uma análise criteriosa.

3.3.8 Modelo de Força Contínua de Superfície

Este modelo foi proposto por Brackbill, Kothe e Zemach (1992). O modelo interpreta a tensão superficial como um efeito tridimensional contínuo através da interface ao invés de uma condição de contorno na mesma. A interface é considerada como tendo uma espessura finita h comparável à resolução da malha, viz.: Figura 3.3.

Esta abordagem substitui o problema de valor de contorno na interface, pois a transição é formulada de maneira a ser suave e *contínua* entre os dois fluidos, contornando assim, o problema de descontinuidade associado à interface, ou seja, a condição de salto.

Na implementação utilizada no ANSYS CFX[®] Release 11.0, a força de superfície entre dois fluidos α e β é calculada como

$$\mathbf{m}_i^\sigma = \left(-\sigma_{\alpha\beta} \kappa_{\alpha\beta} \hat{\mathbf{n}}_{\alpha\beta} + \nabla_s \sigma_{\alpha\beta} \right) \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.71)$$

onde $\sigma_{\alpha\beta}$ é a tensão superficial entre os dois fluidos com unidade de força por comprimento.

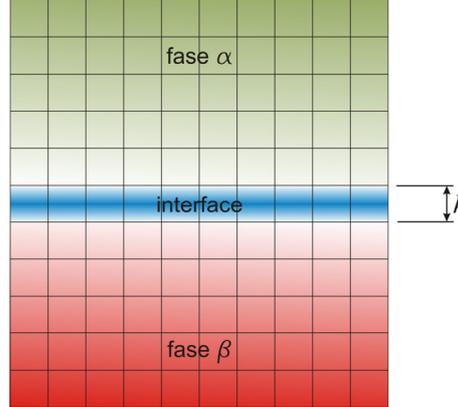


Figura 3.3. Espaçamento de malha e espessura de interface no modelo de força contínua.

O operador ∇_s é o operador gradiente sobre a superfície que define a interface. Caso a tensão superficial não seja uma constante, forças tangenciais tomarão parte na perturbação da interface. Este efeito é denominado efeito ou convecção de Marangoni. A tensão superficial pode variar por efeitos de gradientes térmicos ou de concentração de um composto químico como, por exemplo, um surfactante.

O parâmetro $\kappa_{\alpha\beta}$ é a curvatura da superfície calculada por

$$\kappa_{\alpha\beta} = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}_{\alpha\beta}, \quad (3.72)$$

onde $\hat{\mathbf{n}}_{\alpha\beta}$ é o vetor normal unitário à interface calculado de acordo com

$$\hat{\mathbf{n}}_{\alpha\beta} = \frac{\mathbf{n}_{\alpha\beta}}{|\mathbf{n}_{\alpha\beta}|} \equiv \frac{\nabla r_\alpha}{|\nabla r_\alpha|}. \quad (3.73)$$

Neste caso deve-se escolher um dos fluidos como fluido primário para o cálculo destes parâmetros. O parâmetro $\delta_{\alpha\beta}$ atua como uma função delta de interface que vale zero longe dela, e deste modo garante que a força superficial se fará sentir somente na região de transição. Ela é avaliada pelo gradiente da fração volumétrica:

$$\delta_{\alpha\beta} = |\nabla r_\alpha| \quad (3.74)$$

3.4 Turbulência

O objetivo desta Seção não é de ser uma revisão detalhada do fenômeno da turbulência. Este campo é por si só uma vasta senda de pesquisa e há muito ainda a ser feito. Quando associado aos escoamentos multifásicos, pouco se pode dizer sobre a aplicabilidade dos modelos, pois em sua concepção, em sua quase totalidade, são *calibrados* para certos tipos de escoamentos monofásicos e a simples extensão ao problema multifásico carece de maiores estudos tanto experimentais quanto numéricos.

De modo geral, deve-se atentar ao fato de que não há um único modelo de turbulência que possa prever todos os tipos de escoamentos turbulentos com confiabilidade. Cada modelo tem suas vantagens e fraquezas. Então, o modelo empregado deve sempre tentar incluir todas as características significantes do escoamento a ser investigado. Outro fator a ser considerado é o esforço computacional em relação à precisão requerida por um determinado problema, pois muitas vezes um modelo computacionalmente menos custoso pode prever comportamentos globais do fenômeno com o mesmo grau de confiabilidade de um modelo mais complexo e computacionalmente custoso (BLAZEK, 2001).

À parte de qualquer consideração física, a turbulência é inerentemente tridimensional e dependente do tempo. A turbulência tipicamente se desenvolve como uma instabilidade do fluxo laminar. A instabilidade resulta da interação entre os termos inerciais não-lineares e os termos viscosos e, à medida que o número de Reynolds aumenta (REYNOLDS, 1883a; 1883b), o comportamento do escoamento fica cada vez mais dependente das condições iniciais e de contorno que geram esta turbulência (LEVICH, 1987). Há ainda a complexidade adicional de ser rotacional, tridimensional e transiente. A importância em se tratar o fenômeno da turbulência é que a turbulência aumenta a difusão de massa, calor e quantidade de movimento (WILCOX, 1994)

Uma forma de ilustrar e de entender o surgimento do comportamento turbulento em um escoamento é, por exemplo, assumir que um fluido está sendo agitado por um dispositivo qualquer. Sejam a escala de comprimento $L \sim 1/k_o$ e a de velocidade U , onde k_o é a representação de L no espaço de Fourier. Assumindo também que $Re = UL/\nu \gg 1$, a agitação irá injetar energia no sistema a uma taxa média $\bar{\epsilon}$. No regime permanente a energia injetada no sistema deve ser dissipada à mesma taxa $\bar{\epsilon}$. Sendo a Equação de Navier-Stokes não-linear, há a possibilidade de se excitarem escalas $l < L$ ou, usando uma metáfora, “oitavas” no espaço de Fourier, $k > k_o$, como os harmônicos de um instrumento de cordas, com a transferência de parte da energia para estas escalas menores. Esta transferência prossegue

excitando, ou fazendo “ressoar” as menores escalas dissipativas onde o termo viscoso se equilibra ao acoplamento não-linear. Ou seja, nestas escalas dissipativas onde $l_d \sim 1/k_d$, o número de Reynolds efetivo é $Re^{eff} \sim 1$ (LEVICH, 1987; HUNT e VASSILICOS, 1991).

É nesta escala que a dissipação entra em cena. Assim, o acoplamento não-linear dos termos advectivos da equação de Navier-Stokes permite a transmissão de energia das maiores escalas, onde a dissipação é mais difícil, para as menores escalas, onde a dissipação da energia é fácil. Ou seja, a turbulência é o mecanismo pelo qual a Natureza tenta encontrar o equilíbrio entre o fluxo de quantidade de movimento advectivo e difusivo.

Este conceito de distribuição de energia levou Boussinesq a conceber o transporte turbulento de quantidade de movimento como um processo de *difusão* de quantidade de movimento. A Hipótese de Boussinesq assume que as tensões cisalhantes causadas pelos vórtices turbulentos se relacionam *linearmente* com a taxa de deformação do escoamento médio. A constante de proporcionalidade é então denominada *viscosidade turbulenta* (BOUSSINESQ, 1877; apud DESCHAMPS, 1998).

Mas antes de se aprofundar neste tópico, devemos primeiramente obter as *equações locais* de cada fase promediadas ou como já citado na Seção 3.3 as equações *RANS*. O único motivo de submeter às equações a um processo de promediação é a impossibilidade na maioria dos casos de se descrever o escoamento nas escalas de tempo e espaço em que os processos de transporte de quantidade de movimento ocorrem. E como já ressaltado, o comportamento turbulento é caótico.

As equações deduzidas nesta Seção serão as equações locais. A aplicação das mesmas ao escoamento multifásico é feita identificando os termos transientes, advectivos, difusivos e fontes, tal como os descritos na Tabela 3.1, substituindo-os na Equação (3.38) e definindo as variáveis promediadas.

3.4.1 Equações Promediadas de Reynolds

O processo de média temporal é denominado na literatura como *Reynolds Averaging* devido ao trabalho de Osborne Reynolds no final do Século XIX (REYNOLDS, 1895). Geralmente, os problemas de engenharia envolvem turbulência não-homogênea, e a média temporal é a forma mais apropriada de promediação (WILCOX, 1994) A velocidade instantânea, $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, é expressa como a superposição da média e da flutuação:

$$u_i(\mathbf{x}, t) = \langle u_i \rangle(\mathbf{x}, t) + u'_i(\mathbf{x}, t), \quad (3.75)$$

e

$$\langle u_i \rangle(\mathbf{x}, t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} u_i(\mathbf{x}, t) dt \Rightarrow T_1 \ll T \ll T_2, \quad (3.76)$$

onde T representa o período de promediação e que deve ser maior que o tempo característico da flutuação, T_1 ; e T_2 o tempo característico de flutuações suaves não turbulentas. Na Figura 3.4 pode-se entender melhor o porquê deste cuidado.

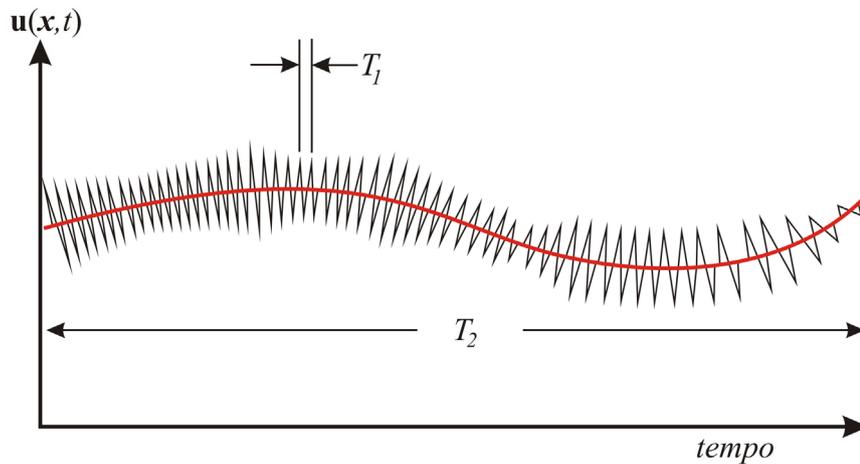


Figura 3.4. Promediação temporal para turbulência não-estacionária.

Caso a escala de tempo seja da ordem de T_1 , estar-se-á resolvendo o escoamento na escala de tempo em que se deveria, e a equação de quantidade de movimento por si mesma já é suficiente para descrever o escoamento, não sendo necessário se efetuar uma promediação, nem tão pouco propor um modelo de turbulência. Deste modo temos a então chamada simulação numérica direta – DNS, mas na maioria das situações isto não é possível e o processo de promediação é mister.

Para o caso de turbulência não-estacionária, o período deve ser menor que T_2 , pois caso contrário estar-se-á filtrando também a flutuação não-turbulenta⁴. O mesmo raciocínio é válido quando o procedimento de promediação é volumétrico. Deschamps (1998) discute a aplicação de promediação temporal em turbulência não-estacionária e em que condições ela pode ser usada, (ver também CELIK, 1999).

Estando o período de promediação dentro da condição necessária, o campo médio de um escoamento turbulento não-estacionário ainda é função do tempo, por isso a Equação (3.76) difere ligeiramente da definição dada pela Equação (3.19) pois esta última resulta em um campo médio que é função somente da posição.

Toda a discussão anterior acerca do processo de promediação é aplicável aqui, mas, com o intuito de esclarecer alguns procedimentos matemáticos, algumas correlações que

⁴ Quando a variação temporal ainda é mantida nas equações *RANS* elas são referidas na literatura como *Unsteady RANS* ou *URANS*.

envolvem as operações algébricas entre médias e flutuações devem ser assinaladas para facilitar o entendimento do leitor.

Como o uso de notação indicial doravante será constante e para facilitar a leitura das equações, o campo médio das propriedades está sendo representado por uma letra maiúscula enquanto a flutuação por uma letra minúscula seguida de apóstrofo.

$$\phi = \Phi + \phi'. \quad (3.77)$$

Aos não-familiarizados com a notação, as regras básicas da notação indicial constam no Apêndice 1. Assim sendo, temos que a média temporal de uma flutuação é nula. Isto é demonstrado por Wilcox (1994) e baseia-se na teoria da perturbação, portanto,

$$\left\langle \frac{\partial u_i}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial t}. \quad (3.78)$$

A média de produtos também é bem comum e assim temos,

$$\langle \phi\psi \rangle = \langle (\Phi + \phi')(\Psi + \psi') \rangle = \langle \Phi\Psi + \Phi\psi' + \Psi\phi' + \phi'\psi' \rangle = \Phi\Psi + \langle \phi'\psi' \rangle. \quad (3.79)$$

A promediação do produto de uma propriedade por sua flutuação resulta nula, contudo, o mesmo não se pode dizer sobre a promediação de produtos de flutuações. Este produto é conhecido como *covariância ou momento*, que neste caso é de segunda ordem.

Pode-se demonstrar que para o produto triplo temos,

$$\langle \phi\psi\xi \rangle = \Phi\Psi\xi + \langle \phi'\psi' \rangle \xi + \langle \psi'\xi' \rangle \Phi + \langle \phi'\xi' \rangle \Psi + \langle \phi'\psi'\xi' \rangle. \quad (3.80)$$

Neste caso surgem momentos de 2ª ordem multiplicando propriedades médias e o último termo representando um momento de 3ª ordem.

Tal qual a obtenção das equações multifásicas promediadas um problema de fechamento das equações irá surgir, pois, como uma promediação foi efetuada, parte da informação da microescala foi perdida e esta incerteza fica contida nos momentos de alta ordem que começam a surgir à medida que se tenta fechar o sistema de equações. Este círculo vicioso de geração de momentos de ordem mais elevada é o conhecido problema de fechamento da turbulência. Uma boa descrição deste problema é dada por Silveira Neto (1998a)

Submetendo as equações locais de conservação da massa e de quantidade de movimento para um fluido incompressível ou um escoamento isocórico a uma promediação temporal, e desconsiderando as forças de corpo por simplicidade, obtemos:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.81)$$

$$\rho \frac{\partial U_i}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x_j} (U_j U_i + \langle u'_j u'_i \rangle) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\mu D_{ji}) \quad (3.82)$$

A equação da massa instantânea neste caso tem divergência nula, e tanto o seu campo médio como a flutuação também têm divergência nula (BEJAN, 2004).

A Equação (3.82) pode ser reescrita na forma

$$\rho \frac{\partial U_i}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial x_j} (U_j U_i) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\mu D_{ji} - \rho \langle u'_j u'_i \rangle) \quad (3.83)$$

O termo $-\rho \langle u'_j u'_i \rangle$ é definido como o *Tensor Tensão de Reynolds*, então:

$$\tau_{ij} = -\rho \langle u'_i u'_j \rangle \quad (3.84)$$

O tensor tensão de Reynolds é simétrico, assim, $\tau_{ij} = \tau_{ji}$ e o tensor é escrito como:

$$\bar{\mathbf{T}}^{\text{Re}} = \tau_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \quad (3.85)$$

Sendo o tensor simétrico mais seis equações, ao invés de nove, são agora necessárias para fechamento do sistema, uma para cada componente do tensor, ou seja, temos que resolver o problema de fechamento do momento de segunda ordem. Para tanto, faz-se necessário deduzir uma equação de conservação para as componentes do tensor tensão de Reynolds. Esta dedução é apresentada no Apêndice 3.

3.4.2 O Conceito de Viscosidade Turbulenta

Com o auxílio da equação de conservação do tensor de Reynolds,

$$\frac{D_k \tau_{ij}}{Dt} = P_{ij} - \Pi_{ij} + \varepsilon_{ij} + \nabla_k \cdot (\nu \nabla_k \tau_{ij} + C_{ijk}) \quad (3.86)$$

as equações promediadas de Reynolds podem ser resolvidas. Não se deve deixar de lado o fato de que a Equação (3.86) deve ainda ser modelada de alguma maneira de forma a se fechar o sistema, pois esta se encontra em sua forma exata.

Esta é uma equação tensorial, e devido ao considerável número de equações a serem resolvidas para a obtenção das componentes do tensor de Reynolds, modelos alternativos foram propostos. Estes modelos são baseados no conceito de viscosidade turbulenta.

O tensor tensão de Reynolds representa a transferência de quantidade de movimento devido às flutuações turbulentas, a idéia então é enxergar este transporte turbulento como um processo de difusão de quantidade de movimento. A *Hipótese de Boussinesq* postula que esse processo difusivo gerado pelos vórtices turbulentos se relacionam *linearmente* com a taxa de deformação do escoamento médio. A constante de proporcionalidade é então denominada viscosidade turbulenta, μ_T , portanto,

$$-\rho \langle u'_i v'_j \rangle \equiv \mu_T \frac{\partial U}{\partial y} \quad (3.87)$$

A partir da Hipótese de Boussinesq, Kolmogorov (1942) *apud* Deschamps (1998) concluiu que as componentes do tensor tensão de Reynolds deveriam ser definidas como:

$$\tau_{ij} = -\rho \langle u'_i u'_j \rangle = 2\mu_T \langle D_{ij} \rangle - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (3.88)$$

onde $\langle D_{ij} \rangle$ denota o tensor taxa de deformação do escoamento médio.

A viscosidade turbulenta, μ_T , não é uma propriedade do fluido, mas sim do escoamento e, portanto, das condições locais do mesmo.

A hipótese de Boussinesq se tornou a base de muitos modelos de fechamento, contudo, há problemas em que a validade desta hipótese não é tão segura como, por exemplo, escoamentos com mudança súbita da taxa de deformação do escoamento médio; com acentuada curvatura das linhas de corrente; rotação e estratificação; e descolamento e recolamento de camada limite.

A principal limitação dos modelos baseados em viscosidade turbulenta é a premissa de equilíbrio entre a turbulência e o campo da taxa de deformação média, tanto como a invariância sob a rotação do sistema, o que nem sempre é verdade.

A fim de corrigir estas deficiências, modelos de viscosidade turbulenta não-lineares foram propostos estendendo a idéia de Boussinesq como uma *Série de Taylor* adicionando-se termos que envolvem o produto dos tensores taxa de deformação e vorticidade do escoamento médio. Obviamente, os modelos que se utilizam deste artifício são mais dispendiosos na solução, mas oferecem melhoras na capacidade de predição dos modelos em escoamentos complexos (BLAZEK, 2001).

Tanto Reynolds quanto Boussinesq com as suas respectivas abordagens foram imprescindíveis no desenvolvimento de todo o campo de estudo da turbulência, mas nenhum dos dois resolveu o problema de fechamento, apenas o criaram.

Desde então, os modelos para o fechamento dos momentos de 1ª ordem que então surgem tem como objetivo final, portanto, o cálculo da viscosidade turbulenta a qual é adicionada à viscosidade dinâmica na equação promediada de Navier-Stokes. O modelo mais simples é baseado no conceito de comprimento de mistura introduzido por Prandtl em 1925 (WILCOX, 1994).

3.4.3 Modelo a Duas Equações k - ε

O modelo k - ε é o mais difundido e usado modelo a duas equações baseado em viscosidade turbulenta. Prandtl na 1ª metade do século XX postulou que a escala característica da velocidade para turbulência, v_{mix} , deveria ser calculada escolhendo-se a energia cinética das flutuações turbulentas por unidade de massa como base para a escala de velocidade, pois $k \sim u^2$.

A energia cinética turbulenta por unidade de massa é definida como,

$$k = \frac{1}{2} \langle u'_i u'_i \rangle = \frac{1}{2} (\langle u'^2 \rangle + \langle v'^2 \rangle + \langle w'^2 \rangle). \quad (3.89)$$

Assim, a viscosidade turbulenta pode ser descrita em função da concentração mássica, da escala da turbulência e da energia cinética turbulenta:

$$\mu_T = cte \cdot \rho k^{1/2} \ell.$$

onde ℓ representa a escala de comprimento característica do escoamento turbulento.

Precisa-se então determinar k , e para isso toma-se o traço do tensor de Reynolds. Por isso a necessidade de se deduzir as equações de transporte para o tensor de Reynolds⁵. Para um fluido incompressível ou escoamento isocórico temos:

$$\tau_{ii} = -\rho \langle u'_i u'_i \rangle = -2\rho k.$$

Assim, tem-se que o traço do tensor de Reynolds é proporcional a k , pois $D_{ii} = 0$.

A energia cinética turbulenta é uma variável específica, mas mesmo assim é referida apenas como energia cinética turbulenta. Para a escala de comprimento com base em argumentos puramente dimensionais pode se demonstrar que

$$\mu_T \sim \frac{\rho k}{\omega} \quad \ell \sim \frac{k^{1/2}}{\varepsilon} \quad \omega \sim \frac{\varepsilon}{k}, \quad (3.90)$$

onde ω é a frequência turbulenta ou o inverso da escala de tempo em que a dissipação ocorre; e ε é a taxa de dissipação de energia cinética específica. As unidades de cada uma destas propriedades são dada por:

$$\nu_T = \left[\frac{L^2}{T} \right] \quad k = \left[\frac{L^2}{T^2} \right] \quad \varepsilon = \left[\frac{L^2}{T^3} \right] \quad \omega = \left[\frac{1}{T} \right], \quad (3.91)$$

de onde pode-se concluir que

$$\mu_T \sim \frac{\rho k^2}{\varepsilon} = \left[\frac{M}{L \cdot T} \right]. \quad (3.92)$$

⁵ Embora esta não seja a única maneira de se obter esta equação.

Então, determinando k e ε a escala da viscosidade turbulenta pode também ser determinada. A aplicação da Hipótese de Boussinesq às equações de conservação de quantidade de movimento promediadas pode então ser efetuada, fechando o sistema de equações diferenciais.

Para a dedução de uma equação de conservação para energia cinética turbulenta, k , como já dito, basta que tomemos o traço da equação de conservação do tensor de Reynolds, a Equação (3.86),

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tau_{ii}}{\partial t} + U_k \frac{\partial \tau_{ii}}{\partial x_k} &= -\tau_{ik} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \Pi_{ii} + \varepsilon_{ii} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\nu \frac{\partial \tau_{ii}}{\partial x_k} + C_{iik} \right] \\ -2\rho \frac{\partial k}{\partial t} - 2\rho U_k \frac{\partial k}{\partial x_k} &= -2\tau_{ik} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \Pi_{ii} + \varepsilon_{ii} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[-2\rho \nu \frac{\partial k}{\partial x_k} + C_{iik} \right] \end{aligned} \quad (3.93)$$

Para um escoamento isocórico ou fluido incompressível, o traço do tensor de redistribuição $\overline{\Pi}$ é nulo, pois o campo de velocidade da flutuação têm divergência nula.

$$tr(\overline{\Pi}) = \Pi_{ii} = - \left\langle p' \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u'_i}{\partial x_i} \right) \right\rangle = -2 \left\langle p' \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_i} \right) \right\rangle = 0. \quad (3.94)$$

Portanto,

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho U_k \frac{\partial k}{\partial x_k} = -\tau_{ik} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} - \nu \left\langle \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right\rangle + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mu \frac{\partial k}{\partial x_k} - \frac{1}{2} \rho \langle u'_i u'_i u'_k \rangle - \langle p' u'_k \rangle \right). \quad (3.95)$$

A dissipação é definida como

$$\varepsilon = \nu \left\langle \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right\rangle. \quad (3.96)$$

Trocando o subíndice \mathbf{k} por \mathbf{j} , pois os índices são mudos (ver Apêndice 1), obtém-se a equação exata de conservação para energia cinética por unidade de massa da flutuação turbulenta:

$$\underbrace{\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial k}{\partial x_j}}_I = - \underbrace{\tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j}}_{II} - \underbrace{\frac{\rho \varepsilon}{III} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial k}{\partial x_j} - \frac{1}{2} \overline{\rho u'_i u'_i u'_j} - \overline{p' u'_j} \right)}_{IV}. \quad (3.97)$$

A derivada material (termo I) e o transporte difusivo molecular (1º fator do termo IV) são termos exatos e definidos, já os demais envolvem correlações que não se conhecem a princípio. Para se fechar a equação, todos estes termos precisam ser modelados. O 2º fator do termo IV pode ser modelado segundo uma difusão de gradiente de um escalar qualquer, $-\overline{u'_j \phi'} \sim \mu_T \partial \Phi / \partial x_j$. Todavia, o mesmo não pode ser feito para o termo de pressão, o 3º fator. Estudos têm demonstrado que ele é pequeno comparado ao transporte turbulento (WILCOX, 1994), assim assume-se que:

$$\frac{1}{2} \rho \langle u'_i u'_i u'_j \rangle + \langle p' u'_j \rangle = \left\langle \left(\rho \frac{u'_i u'_i}{2} + p' \right) u'_j \right\rangle \equiv \frac{\mu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j}, \quad (3.98)$$

onde σ_k é uma constante de fechamento. Note que $u'_i u'_i / 2 = k$. Os termos *II* e *III* representam respectivamente a geração e a dissipação da energia cinética turbulenta. Tem-se então para a equação de conservação da energia cinética turbulenta,

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = -\tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]. \quad (3.99)$$

Para a obtenção da equação de conservação da taxa de dissipação o procedimento algébrico é mais laborioso, exigindo um algebrismo considerável. Como está sendo feito ao longo de todo este Capítulo, a dedução matemática detalhada pode ser encontrada no Apêndice 3. Da definição de ε dada pela Equação (3.96) tem-se a *equação exata* de transporte para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} &= -2\mu \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \left(\left\langle \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right\rangle \right) - 2\mu \left\langle u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right\rangle \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_k \partial x_j} + \dots \\ &\dots - 2\mu \left\langle \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right\rangle - 2\mu \nu \left\langle \left(\frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_j \partial x_k} \right)^2 \right\rangle + \dots \\ &\dots + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} - \mu \left\langle u'_j \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2 \right\rangle - 2\mu \left\langle \left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) \right\rangle + \right] \end{aligned} \quad (3.100)$$

Note que:

$$\mu u'_j \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2 = \rho u'_j \nu \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2 = \rho u'_j \varepsilon, \quad (3.101)$$

o que é muito similar ao termo correspondente na equação da energia cinética turbulenta. De forma genérica, temos para o transporte turbulento de uma propriedade genérica ϕ :

$$-\rho \langle v \phi \rangle \equiv \frac{\mu_T}{\sigma_T} \frac{\partial \phi}{\partial y}, \quad (3.102)$$

onde σ_T é uma constante de fechamento denominada número de Prandtl-Schmidt turbulento (RODI, 1981).

Segundo Wilcox (1994), a Equação (3.100) apresenta diversas correlações duplas e triplas que são praticamente impossíveis de medir com o devido grau de precisão. Sendo estes termos então modelados por meio de análise dimensional. Contudo, essas relações de fechamento ainda levantam dúvidas quanto ao seu rigor. É consenso de que elas são pelo menos dimensionalmente corretas. Sob este aspecto, o modelo k - ε não é muito diferente –

pelo menos no que tange à sua formulação – do modelo k - ω proposto por Kolmogorov que se baseou puramente em razões físicas e análise dimensional.

Wilcox (1994) chama a atenção de que se deve evitar modelar as equações diferenciais ao invés da física da turbulência. Isto não implica em não se referenciar às equações diferenciais, e formular um modelo que viole alguma característica física das equações de Navier-Stokes. O que não deve ser feito é ter a ilusão de que algum tipo de postulação que contorne as incertezas das equações diferenciais exatas de uma equação complexa como a de ε possa de alguma forma ser mais rigorosa do que uma aproximação das correlações baseada em argumentos de uma análise dimensional da física da turbulência. Assim, ela é *modelada* e cada termo representa um determinado mecanismo físico:

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = -C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right], \quad (3.103)$$

onde $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_ε , são constantes de fechamento. De forma compacta,

$$\rho \frac{D_j \varepsilon}{Dt} = P_\varepsilon + d_\varepsilon + D_\varepsilon. \quad (3.104)$$

Sendo que novamente temos, respectivamente, a derivada material; o termo de produção; o de destruição ou distribuição; e o difusivo. Deschamps (1998) tece uma excelente discussão acerca da modelagem e aplicabilidade do modelo k - ε .

Visto que a notação indicial não é mais necessária, podemos retomar a notação utilizada no começo deste Capítulo para o campo médio de velocidade, $\mathbf{U} \equiv \langle \mathbf{u} \rangle$. Assim, o modelo k - ε utilizado neste trabalho é dado por,

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \langle \mathbf{u} \rangle k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon, \quad (3.105)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \langle \mathbf{u} \rangle \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon). \quad (3.106)$$

A viscosidade dinâmica, uma propriedade do fluido, ainda é levada em consideração, embora possa se argumentar que o transporte molecular de k e ε comparado ao transporte turbulento é muito pequeno e, sendo assim, considerar o transporte molecular nas equações não adiciona nenhuma dificuldade ou inconsistência ao modelo. Pelo contrário, o transporte molecular existe.

O termo de produção de energia cinética, P_k , é modelado como

$$P_k = \mu_T \left(\nabla \langle \mathbf{u} \rangle + \nabla \langle \mathbf{u} \rangle^T \right) : \nabla \langle \mathbf{u} \rangle - \frac{2}{3} \nabla \cdot \langle \mathbf{u} \rangle \left(3\mu_T \nabla \cdot \langle \mathbf{u} \rangle + \rho k \right) + P_{kb}. \quad (3.107)$$

Para um escoamento incompressível a divergência do campo de velocidade é nula, $\nabla \cdot \langle \mathbf{u} \rangle = 0$, e a segunda parcela da Equação (3.107) desaparece. O termo P_{kb} representa a produção de energia cinética devido a interações entre flutuações das forças de corpo e campo de velocidade. Quando este não é levado em conta temos

$$P_k = 2\mu_T \langle \bar{\mathbf{D}} \rangle : \nabla \langle \mathbf{u} \rangle. \quad (3.108)$$

A viscosidade turbulenta então é definida com base em análise dimensional, segundo a Equação (3.92),

$$\mu_T = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (3.109)$$

onde C_μ é uma constante de fechamento.

3.4.4 Lei de Parede e Condições de Contorno para k - ε

O modelo k - ε apresenta algumas dificuldades numéricas quando se trata de resolver o escoamento junto à parede. Experimentalmente, três distintas regiões da camada limite turbulenta são discerníveis: a subcamada viscosa, onde o transporte de quantidade de movimento é devido aos efeitos difusivos moleculares e o escoamento é similar ao laminar; a camada logarítmica, ou de amortecimento, onde os transportes molecular e turbulento se equivalem; e a camada defectiva ou externa, onde $o(\mathbf{u}) \rightarrow o(\langle \mathbf{u}_\infty \rangle)$.

Devido a esta estrutura da camada limite o modelo k - ε ainda requer o uso de funções de amortecimento (*damping functions*) cuja função é limitar o comportamento de k e de ε junto à parede - ou na subcamada viscosa. Como as tensões viscosas nesta região sobrepõem as tensões turbulentas e o comportamento é laminar, as flutuações do campo de velocidade são praticamente nulas, e assim, de acordo com a definição da Equação (3.89) temos,

$$k \rightarrow 0 \quad \text{quando} \quad y \rightarrow 0 \quad (3.110)$$

A dissipação, ε , deve tender a zero, caso contrário k pode se tornar negativo e o seu termo de destruição (ou dissipação), d_ε , tender ao infinito (DESCHAMPS, 1998),

$$d_\varepsilon = C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.111)$$

Além disto, o termo de produção de dissipação deve ser proporcional à produção de energia cinética de maneira a evitar o crescimento ilimitado de k ,

$$P_\varepsilon = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k \quad (3.112)$$

Estas duas necessidades são antagônicas e geralmente o resultado é a divergência da solução.

O modelo $k-\varepsilon$ com funções de amortecimento também é chamado de *modelo para baixo número de Reynolds*. As funções de amortecimento podem sobreestimar os termos fontes das equações, sendo necessário uma boa resolução de malha próxima à parede e, de acordo com a Figura 3.5, a camada viscosa é muito pequena e resolver as equações de turbulência nessa região eleva o esforço computacional sobremaneira.

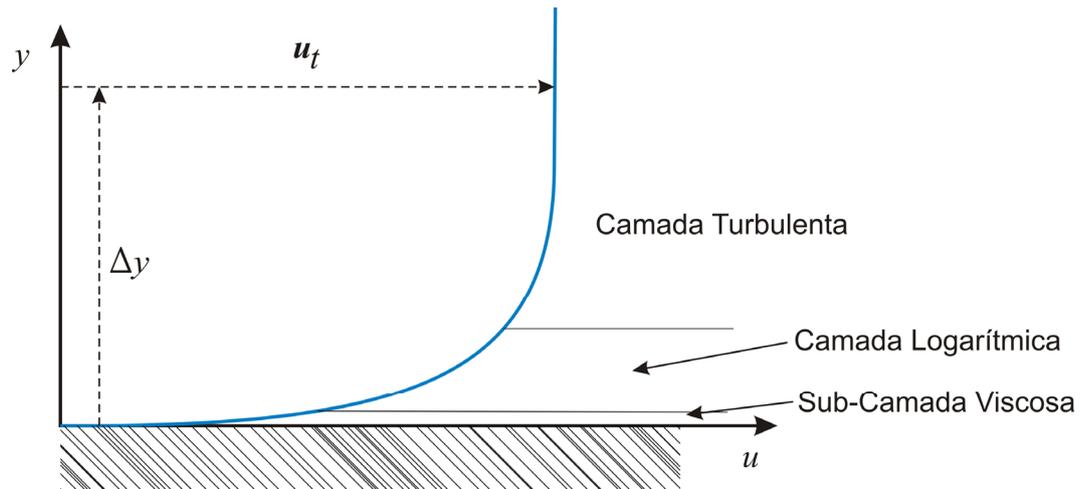


Figura 3.5. Camada limite turbulenta, onde u_t representa a magnitude da velocidade tangencial à parede e Δy a distância normal a mesma.

A camada logarítmica está tipicamente entre $30 \leq y^+ \leq 0,1\delta$, onde y^+ é a distância adimensional da parede e δ a espessura da camada limite. Na camada viscosa temos um comportamento linear da velocidade com a distância da parede, isto é ilustrado na Figura 3.6.

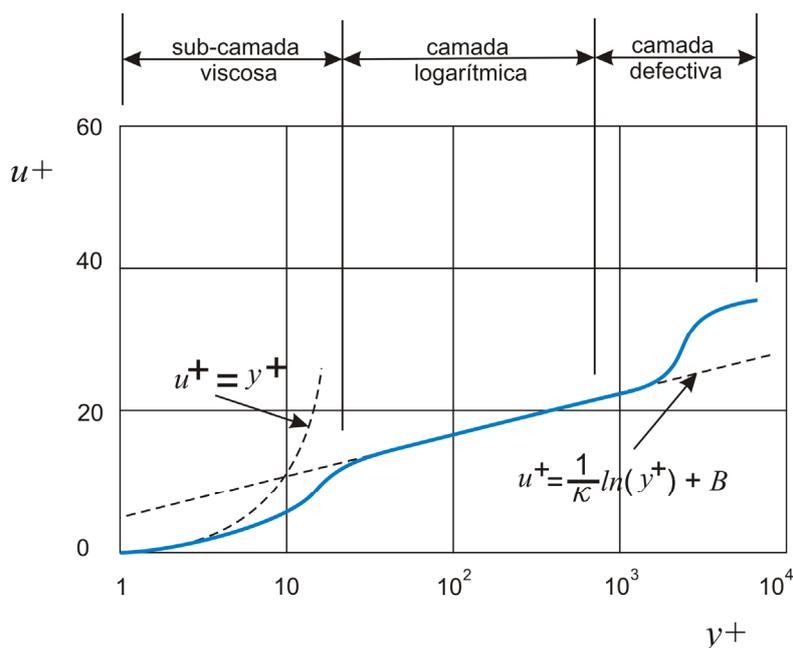


Figura 3.6. Perfil log-log da Camada Limite Turbulenta.

Matematicamente, há somente duas regiões: a subcamada viscosa e a defectiva. A camada logarítmica é apenas uma região de sobreposição onde as duas soluções são válidas agindo como um limite assintótico entre a camada interna e a externa.

Para o uso de funções de amortecimento, espera-se que o 1º nó da malha esteja a uma distância $y^+ \leq 1$, e dependendo do número de Reynolds e da complexidade do problema, isto pode ser impraticável, ou no mínimo desalentador, pois o esforço computacional será considerável.

Mas, ao invés de se resolver bem o perfil de velocidade junto à parede, as propriedades de interesse do escoamento podem ser obtidas do comportamento da camada limite turbulenta através do que se denomina *lei de parede*. Pode-se, mesmo sem resolver a camada limite, calcular o campo de velocidade e conseqüentemente o gradiente de velocidade e o tensor taxa de deformação, pois se sabe como é o perfil de velocidade junto à parede.

Para evitar um grande refinamento, malhas relativamente mais grosseiras com $10 \leq y^+ \leq 100$ podem ser usadas. Neste caso, as funções de amortecimento são desconsideradas, e tem-se o modelo para alto número de Reynolds (LAUNDER e SPALDING, 1974).

Com o uso de leis de parede as equações de turbulência *não são resolvidas nos nós pertencentes a parede*. Este artifício permite razoável precisão nos resultados para camadas limites *não descoladas*. Contudo o seu uso em escoamentos em que há descolamento da camada limite é questionável (BLAZEK, 2001). Quando isto ocorre, outros modelos como o *Shear Strees Transport (SST)* ou *Baseline k- ω (BSL-k- ω)* são mais adequados (MENTER, 1992; 1994; MENTER, KUNTZ e LANGTRY, 2003; MENTER e GROTHJANS, 2004; MENTER, 2006).

Para a dedução de uma lei de parede considerar-se-á uma camada limite com *campo de pressão constante*:

$$\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial x} + \frac{\partial \langle v \rangle}{\partial x} = 0, \quad (3.113)$$

$$\rho \langle u \rangle \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial x} + \rho \langle v \rangle \frac{\partial \langle v \rangle}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} + \tau_{xy} \right). \quad (3.114)$$

Como por definição *dentro da camada logarítmica* os termos inerciais são desprezíveis, o somatório da tensão viscosa e de Reynolds tem de ser constante (ver DESCHAMPS, 1998, Fig. 3.9):

$$\mu \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} + \tau_{xy} \approx \mu \left(\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} \right)_{wall} = \tau_w = \rho u_\tau^2, \quad (3.115)$$

onde u_τ é denominada velocidade de fricção ou friccional, $u_\tau = \sqrt{\tau_w / \rho}$.

A tensão de Reynolds é muito maior que a tensão viscosa nesta região e, de acordo com o modelo de comprimento de mistura tem-se:

$$\ell_{mix}^2 \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \approx u_\tau^2. \quad (3.116)$$

Considerando que ℓ_{mix} seja proporcional a y

$$\ell_{mix} = \kappa y, \quad (3.117)$$

onde κ é uma constante de fechamento. Substituindo (3.117) em (3.116) e integrando obtém-se

$$\langle u \rangle \approx \frac{u_\tau}{\kappa} \ln y + cte \quad (3.118)$$

Defini-se a velocidade e a distância normal adimensional respectivamente como

$$u^+ = \frac{\langle u \rangle}{u_\tau} \equiv \frac{u_t}{u_\tau}, \quad (3.119)$$

$$y^+ = \frac{u_\tau y}{\nu}, \quad (3.120)$$

sendo u_t a a velocidade tangencial à parede exatamente na distância Δy de acordo com a Figura 3.5.

Reescrevendo a Equação (3.118) em termos das variáveis adimensionais e obtém se a lei de parede,

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + B. \quad (3.121)$$

A constante κ é conhecida como constante de von Kármán, e B é uma constante adimensional. Maiores detalhes sobre a dedução de leis de parede podem ser encontrados em Wilcox (1994), Silva e Cruz (1998) e Deschamps (1998).

Esta função de parede se baseia na hipótese de equilíbrio, ou seja, o termo de produção de energia cinética turbulenta é assumido igual à taxa de dissipação (LAUNDER e SPALDING, 1974; AEA, 2002; ABRUNHOSA, 2003), portanto,

$$P_k = \rho \varepsilon, \quad (3.122)$$

onde P_k é calculado de acordo com a Equação (3.108).

Todavia, as funções de parede dependem da resolução da malha, e o refino não necessariamente melhora o resultado, pelo contrário, muitas vezes a solução diverge. Para

esclarecer esta aparente inconsistência, suponha-se um problema unidimensional. Da Equação (3.108) temos,

$$P_k = 2\mu_T \left(\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} \right)^2. \quad (3.123)$$

Integrando sobre um volume de controle unidimensional,

$$\int_y^{y+\Delta y} 2\mu_T \left(\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} \right)^2 dy \approx 2\mu_T \frac{\Delta \langle u \rangle^2}{\Delta y}. \quad (3.124)$$

É fácil perceber que à medida que $\Delta y \rightarrow 0$, ou seja, quando a malha é refinada, o termo de produção cresce indefinidamente, o que é fisicamente inconsistente. Além desta hipótese de equilíbrio, a tensão de Reynolds é praticamente constante (LAUNDER e SPALDING, 1974; MENTER, 1992; DESCHAMPS, 1998; AEA, 2002; ABRUNHOSA, 2003; ANSYS, 2004; 2007). Com base neste comportamento,

$$\rho \langle u'u' \rangle \approx \alpha \rho k^\infty, \quad (3.125)$$

onde k^∞ é a energia cinética do escoamento livre (*free stream*) e α uma constante de proporcionalidade, esta definição é conhecida como Hipótese de Bradshaw, e assim,

$$P_k = -\rho \langle u'u' \rangle \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y}. \quad (3.126)$$

Substituindo a definição dada em (3.125) na Equação (3.126),

$$\int_y^{y+\Delta y} -\alpha \rho k^\infty \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} dy \approx -\alpha \rho k^\infty \Delta \langle u \rangle, \quad (3.127)$$

que independe de Δy . Isto é fisicamente consistente, pois a produção de energia cinética turbulenta não pode crescer indefinidamente. Isto implica que a geração de energia cinética dentro da camada limite é dependente do escoamento médio externo à ela.

Uma estratégia para contornar estes problemas em malhas muito finas e permitir o uso seguro de malhas grosseiras são as *funções de parede escaláveis* (NIKRITYUK e MENTER, 2002; MENTER e GROTHJANS, 2004; MENTER, 2006; ANSYS, 2007).

Nesta formulação alternativa uma outra escala de velocidade é definida,

$$u^* = C_\mu^{1/4} k^{1/2}, \quad (3.128)$$

e,

$$\frac{u_t}{u_\tau} = u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^*) + B, \quad (3.129)$$

onde y^* é dado por

$$y^* = \frac{u^* \Delta y}{\nu}. \quad (3.130)$$

O valor absoluto da tensão, τ_w , é obtido então por

$$\tau_w = \rho u^* u_\tau. \quad (3.131)$$

Como y assume valores discretos na malha é preferível usar Δy como a distância do primeiro nó normal à parede ao invés de y . Então

$$y^* = \max(y^*; 11,06), \quad (3.132)$$

onde o valor 11,06 define a intersecção entre a subcamada viscosa e a logarítmica (ver Figura 3.6). Assim, mesmo que o primeiro nó esteja dentro da subcamada viscosa, não lhe é permitido que o valor computado fique abaixo deste limite e a inconsistência da malha refinada é evitada. Isso coloca *virtualmente* todos os nós fora da subcamada viscosa, como se ela fosse deslocada, permitindo a resolução da camada limite nas equações do movimento e evitando a divergência do modelo de turbulência.

O ANSYS CFX[®] possui duas variáveis que computam a distância adimensional do primeiro nó. A primeira é a definida pela Equação (3.120) e é calculada como

$$y^+ = \frac{\sqrt{\tau_w/\rho}}{\nu} \Delta n, \quad (3.133)$$

onde $\Delta n = n_2 - n_1$ é a distância do primeiro nó, pertencente à parede, e o segundo nó adjacente e normal a ela.

A segunda variável é denominada y_{solver}^+ e é a usada pelo código computacional, sendo definida como,

$$y_{solver}^+ = \max(y^*; 11,06), \quad (3.134)$$

e

$$y^* = \frac{u^* \Delta n/4}{\nu}. \quad (3.135)$$

Esta variável melhora a estabilidade e a robustez do modelo de turbulência, enquanto a primeira indica se a malha está adequada para, por exemplo, o cálculo da tensão cisalhante ou fluxo de calor na parede. Para o modelo k - ε é recomendado que

$$20 \leq y^+ \leq 300, \quad (3.136)$$

de tal maneira que os gradientes sejam bem calculados nesta região (ANSYS, 2007).

Os valores de k e ε na primeira camada de nós da malha são obtidos a partir da hipótese de equilíbrio assumida na Equação (3.122), então,

$$P_k = \mu_T \left(\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} \right)^2, \quad (3.137)$$

e

$$\tau = \mu_T \left(\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} \right), \quad (3.138)$$

portanto,

$$P_k = \frac{\tau^2}{\mu_T}. \quad (3.139)$$

Das Equações (3.122) e (3.139) tem-se, portanto,

$$\frac{\tau^2}{\mu_T} = \rho \varepsilon. \quad (3.140)$$

Substituindo a definição de viscosidade turbulenta do modelo dada pela Equação (3.109) em (3.140) obtém-se

$$\tau = \rho C_\mu^{1/2} k. \quad (3.141)$$

Resolvendo para k

$$k = \frac{1}{C_\mu^{1/2}} \left(\frac{\tau}{\rho} \right). \quad (3.142)$$

Para a taxa de dissipação temos,

$$\varepsilon = C_\mu^{1/2} k \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y}. \quad (3.143)$$

Das Equações (3.115), (3.119) e (3.120) pode-se escrever:

$$\frac{\partial \langle u \rangle}{\partial y} = \frac{\tau}{\mu} \frac{\partial u^+}{\partial y^+}. \quad (3.144)$$

Derivando a Equação (3.121) em relação ao y^+ ,

$$\frac{\partial u^+}{\partial y^+} = \frac{1}{\kappa y^+}, \quad (3.145)$$

e, portanto,

$$\varepsilon = C_\mu^{1/2} k \frac{\tau}{\mu_T} \left(\frac{1}{\kappa y^+} \right). \quad (3.146)$$

Substituindo a definição de y^+ dado pela Equação (3.120) e a da tensão, τ , dada pela Equação (3.141) conclui-se que

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{\kappa y}, \quad (3.147)$$

ou de forma genérica,

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{\kappa \Delta n}. \quad (3.148)$$

Tanto a Equação (3.142) quanto a (3.148) podem ser escritas em função da definição da velocidade friccional, u_τ , dada pela Equação (3.119),

$$k = \frac{u_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}}, \quad (3.149)$$

$$\varepsilon = \frac{u_\tau^3}{\kappa \Delta n}. \quad (3.150)$$

As condições de contorno implementadas no código ANSYS CFX[®] são de fluxo nulo de energia cinética na parede:

$$F_k = \nabla k \cdot \hat{\mathbf{n}}_w = 0, \quad (3.151)$$

onde $\hat{\mathbf{n}}_w$ é o vetor normal unitário à parede. E, para a dissipação, a Equação (3.150) é utilizada (MENTER, 2006).

A velocidade friccional é calculada explicitamente a partir da Equação (3.129) com os valores disponíveis da solução anterior e utilizando o método de Newton (NIKRITYUK e MENTER, 2002; MENTER, 2006).

Não se pode deixar de ressaltar que o comportamento da camada limite turbulenta nem sempre é o mesmo e nem se garantir que este comportamento vá respeitar a lei de parede descrita aqui (JONES e LAUNDER, 1973). Muitas características do escoamento podem alterar a sua estrutura, como por exemplo, gradiente adverso de pressão, curvatura de linhas de corrente, fluxo de massa pela parede, forças de empuxo e Coriolis.

Quando este modelo é então estendido a escoamentos multifásicos a incerteza da validade é ainda maior. Launder e Spalding (1974), quando da publicação do seu artigo, já reconhecem esta incerteza comparando a interface a uma parede flexível.

O modelo k - ε é muito controverso mesmo quando se trata de escoamentos monofásicos e esta controvérsia não é tão recente. Rodi e Scheuerer (1986) expressam o seu espanto em relação a incapacidade do modelo em reproduzir simples resultados experimentais quando há a presença de gradiente de pressão adverso - o que muitas vezes resulta em uma sobrestimação dos valores de tensão, e propõem modificações ao modelo, pois as constantes recomendadas para o fechamento do modelo (JONES e LAUNDER, 1972; 1973; LAUNDER e SPALDING, 1974), foram obtidas desconsiderando o gradiente de pressão. O que por si já é uma fonte de desvios. Contudo, a maior fonte de erros está na *equação modelada* da taxa de dissipação.

Todavia, mesmo sob várias críticas, o modelo tem a sua valia quando usado criteriosamente e com a noção clara de que os resultados podem não ser tão acurados quantitativamente. Mas, dependendo do intuito do experimentador, o modelo pode ser seguramente aplicado e é isto o que se vê. Geralmente a primeira escolha é o modelo k - ε e somente quando os resultados são bastante insatisfatórios é que se parte para um outro modelo

a duas equações como k - ω , SST e derivados, ou ainda simulação de grandes escalas quando é necessário e possível. Pode-se dizer até que é uma espécie de “modismo” o uso do modelo k - ε . Mas isto também pode ser considerado uma vantagem, pois sendo um modelo largamente utilizado, todas os sucessos e fracassos deste modelo estão bem documentados.

Outra fonte de erros é a própria Hipótese de Boussinesq. A hipótese foi proposta fazendo-se o mesmo paralelo da Hipótese de Stokes para o tensor viscoso para fluidos Newtonianos. Mas como sabidamente nem todos os fluidos são Newtonianos, nem todos os escoamentos vão obedecer a uma relação linear entre a taxa de deformação do escoamento médio e o tensor de Reynolds. Poder-se-ia propor uma relação do tipo,

$$\overline{\mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'} = \frac{2}{3} k \bar{\mathbf{I}} - 2\nu_T \bar{\mathbf{D}} + \bar{\mathbf{B}} \quad (3.152)$$

onde $\bar{\mathbf{B}}$ é uma função quadrática do gradiente de velocidade do escoamento médio (BRASIL JR, 1998). A dependência linear da taxa de deformação é uma fonte de erros comum a todos os modelos baseados na Hipótese de Boussinesq, e quando aplicada a escoamentos multifásicos, isto ainda é mais questionável (CROWE, TROUTT e CHUNG, 1996; TROSHKO e HASSAN, 2001b).

3.5 Modelagem da Turbulência em Escoamentos Multifásicos

Os modelos discutidos na Seção 3.4 são as equações locais de turbulência válidas dentro de cada fase. Mas, como discutido anteriormente, todas as equações de transporte se tornam singulares na interface. Nesta região uma condição de conservação deve ser aplicada – a condição de salto. Quando as equações de transporte são as das propriedades turbulentas, como k , ε ou ω , a condição de salto não é algo trivial e nem tão pouco bem entendida. Por exemplo, a condição de salto é matematicamente representada como

$$\left[\rho \phi (\mathbf{u} - \mathbf{u}_i) + \mathbf{J} \right] \cdot \mathbf{n} = S_i^\phi \quad (3.153)$$

ou seja, a Equação (3.35). Nesta equação há um termo fonte, S_i^ϕ , que deve ser definido. Então surge a pergunta: como se dá a geração de uma propriedade associada à turbulência na interface como, por exemplo, a energia cinética turbulenta? Esta pergunta não é fácil de ser respondida.

E, mesmo que se pudesse modelar corretamente a condição de salto, ter-se-ia ainda um problema de fronteira móvel. Para contornar isto, a promediação é utilizada para descrever o comportamento médio do campo turbulento.

Quando submetidas ao processo de promediação parte da informação contida nas equações locais são filtradas, ou perdidas, e esta incerteza surge naturalmente do processo de promediação como um termo fonte representando o comportamento do campo turbulento na interface.

A simulação numérica direta – DNS – de escoamentos multifásicos é ainda na maioria das situações impraticável. Uma boa opção é a Simulação de Grandes Escalas – LES – como, por exemplo, o modelo de Smagorinsky (1963) e derivados (ver GERMANO *et al.*, 1991; LESIEUR e METAIS, 1996; SILVEIRA NETO, 1998b), cuja abordagem não é relacionada ao processo de média e sim de filtragem das equações resolvendo-se as grandes escalas da turbulência e modelando as menores. Este tipo de modelo permite melhores resultados sem as incertezas dos modelos a duas equações baseados em viscosidade turbulenta. Contudo, a simulação de grandes escalas também demanda grande esforço computacional.

Frente a isto, também é interessante a extensão dos modelos baseados em viscosidade turbulenta a escoamentos multifásicos. O processo de obtenção das equações é idêntico ao das equações promediadas no início do Capítulo, assim, para o modelo k - ε , por exemplo, temos

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha k_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle k_\alpha) = \nabla \cdot \left[r_\alpha \left(\mu_\alpha + \frac{\mu_{T\alpha}}{\sigma_k} \right) \nabla k_\alpha \right] + r_\alpha (P_{k\alpha} - \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + T_\alpha^k, \quad (3.154)$$

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha \varepsilon_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha \langle \mathbf{u}_\alpha \rangle \varepsilon_\alpha) = \nabla \cdot \left[r_\alpha \left(\mu_\alpha + \frac{\mu_{T\alpha}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_\alpha \right] + r_\alpha \frac{\varepsilon_\alpha}{k_\alpha} (C_{\varepsilon 1} P_{k\alpha} - C_{\varepsilon 2} \rho_\alpha \varepsilon_\alpha) + T_\alpha^\varepsilon, \quad (3.155)$$

onde T_α^k e T_α^ε são escalares que representam os termos de transferência interfacial das equações de conservação da energia cinética turbulenta e taxa dissipação na interface na fase α , respectivamente.

Uma primeira aproximação é considerar de que há conservação de fluxo na interface sem termos fontes devido a interações entre as fases, assim, o termo S_i^ϕ na Equação (3.153) é igual a zero e temos, independentemente de como a condição de salto é modelada, a seguinte restrição:

$$\sum_{\alpha=1}^{N_p} T_\alpha^k = 0 \quad (3.156)$$

$$\sum_{\alpha=1}^{N_p} T_\alpha^\varepsilon = 0 \quad (3.157)$$

Portanto, uma das fases aumenta a energia cinética (ou taxa de dissipação) da outra fase às custas de uma diminuição da sua própria, ou seja, há a transferência de energia entre as fases.

A modelagem destes termos é sempre delicada e geralmente não leva em conta a complexidade das correlações que surgem das equações exatas. O grau de incerteza que então se tem é significativo, pois o modelo $k-\varepsilon$ é calibrado para certos tipos de escoamentos monofásicos e as equações diferenciais, principalmente da taxa de dissipação, já são modeladas e não usadas na sua forma exata. Não se sabe também se os valores que as constantes de fechamento assumem são válidos quando há a presença de uma outra fase.

Praticamente todos os modelos que tentam definir como a presença de uma outra fase interfere no campo turbulento modelando os termos de transferência interfacial dizem respeito a escoamento de bolhas ou partículas sólidas dispersadas (ver LOPEZ DE BERTODANO, LAHEY JR e JONES, 1994; NIKITOPULOS e MICHAELIDES, 1995; PFLEGER *et al.*, 1999; PFLEGER e BECKER, 2001; TROSHKO e HASSAN, 2001b; CHAHED, ROIG e MASBERNAT, 2003; LAHEY JR, 2005; ZHANG, DEEN e KUIPERS, 2006).

A presença de bolhas induz flutuações turbulentas e a turbulência interfere na distribuição das fases e isto incide diretamente na magnitude dos termos de transferência de quantidade de movimento. Na modelagem da densidade de força interfacial a turbulência ou é completamente ignorada ou o peso dos efeitos da dispersão turbulenta é atribuído ao coeficiente de arraste C_D . As interfaces modificam as escalas características da turbulência alterando os mecanismos de dissipação, produção e redistribuição. O modelo que aparentemente apresenta menos incertezas em sua modelagem é a equação de conservação do tensor de Reynolds (CHAHED, ROIG e MASBERNAT, 2003). Mas a complexidade na solução do sistema de equações é computacionalmente comparável à simulação de grandes escalas.

A característica comum a estes modelos a duas equações que consideram o efeito de uma outra fase é a decomposição do tensor de Reynolds em duas partes: a primeira devida à taxa de deformação do escoamento médio da fase, e a segunda devido ao deslocamento das bolhas ou partículas, ou seja,

$$\tau_{ij} = \tau_{ij}^D + \tau_{ij}^b \quad (3.158)$$

O nível de turbulência na fase dispersada pode ser desprezado ou proporcional ao nível de turbulência da fase contínua (TROSHKO e HASSAN, 2001b):

$$\frac{|\bar{\mathbf{T}}_D^{Re}|}{|\bar{\mathbf{T}}_C^{Re}|} \approx o\left(\frac{\rho_D}{\rho_C}\right) \quad (3.159)$$

Uma maneira de contornar toda a problemática de se definir os termos de transferência interfacial é considerar que estes termos são desprezíveis quando comparados aos demais termos e ignorá-los. Isto vai depender do caso.

A modelagem descrita até aqui é equivalente ao modelo heterogêneo ou modelagem *fluido-dependente*, pois não necessariamente o mesmo modelo de turbulência precisa ser aplicado a todas as fases.

Quando se tratando de escoamento de bolhas geralmente infere-se somente o efeito da fase dispersada na contínua, e a fase dispersada é tratada com uma relação do tipo descrito na Equação (3.159).

O tratamento homogêneo das equações também pode ser feito e é o recomendado pelo manual do ANSYS CFX[®] (ANSYS, 2004; 2007). Isto é feito considerando-se que os campos de energia cinética turbulenta e taxa de dissipação (no caso do modelo $k-\varepsilon$) são compartilhados pelas fases tal qual a hipótese de compartilhamento do campo de pressão e velocidade. Desta forma, temos para o modelo $k-\varepsilon$ as mesmas equações obtidas na Seção 3.4.3. E, tal qual o modelo homogêneo da Seção 3.3.7, as propriedades usadas são as de mistura:

$$\langle \rho \rangle = \sum_{\alpha=1}^{N_p} r_{\alpha} \langle \rho_{\alpha} \rangle \quad (3.160)$$

$$\mu = \sum_{\alpha=1}^{N_p} r_{\alpha} \mu_{\alpha} \quad (3.161)$$

e a viscosidade turbulenta em cada fase ponderada pela respectiva fração volumétrica, pois como os campos são os mesmos, e a viscosidade turbulenta obtida é uma só:

$$\mu_{T\alpha} = r_{\alpha} \mu_T \quad (3.162)$$

Há também a consideração implícita de que não há geração de nenhuma propriedade turbulenta na interface, ou que pelo menos que ela seja desprezível frente a outros processos, de modo que as Equações (3.156) e (3.157) são válidas e o modelo matematicamente não percebe mais um conjunto de fases, mas sim uma única formada por uma mistura com propriedades localmente variáveis. Esta formulação é preferida, pois as incertezas sobre os termos de transferência interfacial são contornadas. Contudo, isto pode dar resultados não coerentes com a realidade física do fenômeno em estudo e isto deve ser avaliado de acordo com o caso, mas é numericamente mais estável e menos custoso do que considerar campos distintos de turbulência sem os termos de transferência interfacial.

Acredita-se que isto se dá principalmente por que na interface as propriedades mudam bruscamente sem que haja a troca de informação entre as fases. Seria como usar o modelo heterogêneo sem os termos de transferência. As fases matematicamente não se “enxergariam” e nem trocariam energia (cinética, térmica, etc.) entre si, o que é fisicamente inconsistente. Contudo, não se pode afirmar exatamente o porquê de ser numericamente instável, pois nenhum estudo sobre isto foi realizado, ficando esta explicação somente como uma possível e

provável causa, visto que consistência é uma das condições necessárias para que uma solução numérica convirja. Mas o objetivo deste trabalho não é o de resolver esta questão e não nos aprofundaremos neste problema.

Um outro ponto crítico diz respeito ao tratamento da parede. Isto já é um problema controverso em escoamentos monofásicos e a extensão simples das formulações apresentadas não são fundamentadas em nada, sendo apenas a aplicação do que se tem para um problema em que a princípio não se conhece nada melhor. Troshko e Hassam (2001a) propuseram uma correção à lei de parede ao escoamento bifásico de bolhas que leva em conta a fração de vazio e alcançaram melhores resultados.

Esta interferência também não é levada em conta neste trabalho. O tratamento da parede é feito de acordo com o estabelecido para as equações locais nas Seções anteriores, ou seja, o perfil da camada limite é considerado independente da presença de uma outra fase. Esta assertiva pode ser questionada, contudo, não se tem ainda uma formulação para a lei de parede em escoamento multifásicos válida para qualquer regime e classe de escoamento, e a proposta de Troshko e Hassan, embora seja um avanço neste sentido, ainda requer mais estudos e esta não é a intenção aqui.

3.6 Modelagem da Densidade de Força Interfacial

Nas Seções 3.2 e 3.3, ao longo da dedução das equações de conservação da quantidade de movimento o termo de transferência interfacial de quantidade de movimento, ou densidade de força interfacial, \mathbf{M}_α , foi deixado à parte da discussão. Este termo fonte das equações físicas de Navier-Stokes é a conexão matemática e física que permite a interação entre as fases, como já comentado ao longo do Capítulo 3.

A modelagem deste processo físico é o ponto mais delicado dos modelos, pois o grau de interação é definido pelo modo como isto é tratado matematicamente. A menos que os termos de acoplamento das equações na interface sejam bem modelados, a vantagem do uso do modelo heterogêneo cai por terra e instabilidades numéricas surgem (ISHII e MISHIMA, 1984).

Vários processos físicos tomam parte nisto sendo que a densidade de força interfacial é na verdade uma superposição de vários processos de transferência de quantidade de movimento e que agem concomitantemente. A parcela que intuitivamente vem à mente é a força devido ao arrasto entre as fases, mas não é a única.

Ao lado da Força de Arrasto (*Drag Force*) temos as chamadas forças de não arrasto (*Non-Drag Forces*) como, por exemplo, Massa Virtual, Sustentação, Lubrificação, Dispersão Turbulenta e Basset.

Há diversas controvérsias na modelagem de cada uma destas forças, uma delas é a invariância em relação ao sistema de referência. Drew (1983; 1989; e 1992) discute a modelagem destes termos e a questão da invariância argumentando que estas forças devem ser funções somente de grandezas também invariantes para que isto ocorra, e demonstra que estas forças isoladamente não necessitam ser objetivas, somente o seu somatório é que deve ser (DREW, 1992).

Uma descrição detalhada destas forças é dada em Paladino (2005). Em seu trabalho sobre escoamentos de bolhas em medidores de pressão diferencial, além da força de arraste, Paladino considerou também as forças de sustentação, lubrificação e dispersão turbulenta, implementando uma formulação objetiva da força de massa virtual no código ANSYS CFX 4.0 via sub-rotinas em FORTRAN.

Pode-se demonstrar que algumas das formulações destas forças implementadas no ANSYS CFX 11.0 não são objetivas isoladamente. Caso, por exemplo, se queira considerar o efeito de Massa Virtual deve-se também considerar a Força de Sustentação *com os mesmos coeficientes iguais a 0,5* para que o seu somatório seja invariante. E isto é feito por *default*⁶.

Deve-se ser cuidadoso na escolha de qual força considerar ou não. Muitas delas tem efeito significativo sobre a distribuição das fases e sobre o gradiente de pressão (PALADINO, 2005). Os efeitos numéricos também devem ser levados em conta, pois a inclusão de uma destas forças implica em um termo fonte adicional e o processo de solução, dependendo do tratamento, pode ser custoso e/ou instável. O tratamento implícito dos termos fontes quando empregado proporciona um melhor condicionamento da matriz de coeficientes reforçando a sua dominância diagonal, mas isso nem sempre é possível ou fácil.

Outro detalhe diz respeito a como estes modelos são calibrados. Todos são projetados com base em dados experimentais. E, como quase todo processo matemático de fechamento, coeficientes são necessários e a universalidade dos valores comumente adotados ainda não foi bem estudada (LAHEY JR, 2005).

Difícilmente se consegue em algum experimento desacoplar todos os efeitos de forma a calibrar o coeficiente de uma força isolada. Além do mais, são muito dependentes dos regimes de escoamento.

A discussão sobre este tema é ampla e não cabe no escopo do trabalho, pois o modelo homogêneo é empregado de forma a contornar estas incertezas.

⁶ Termo usado para definir uma configuração padrão de determinado software.

3.7 Identificação da Interface

Um detalhe até então não comentado diz respeito à identificação da interface. Um dos métodos mais difundidos é o denominado na literatura como Volume of Fluid (VOF). Muitos trabalhos descrevem esta metodologia e suas variantes (HIRT e NICHOLS, 1981; TSAI e YUE, 1996; HIRT, 1999; MARONNIER, PICASSO e RAPPAPAZ, 1999; SCARDOVELLI e ZALESKI, 1999; MALISKA e DE VASCONCELLOS, 2000; THOMAS e ZHANG, 2001; BARKHUDAROV, 2004; NGUYEN e EVANS, 2006).

A característica comum é resolver uma equação de transporte para a fração volumétrica e de alguma forma inferir com base em argumentos geométricos e balanços de fluxo a posição da interface dentro de um volume de controle. Outra característica são os esquemas de discretização que tentam minimizar a difusão numérica da fração volumétrica e melhorar a resolução da interface. A equação de transporte comumente usada é a seguinte:

$$\frac{\partial \rho_l F}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{u}_l F) = 0 \quad (3.163)$$

onde F representa a fração de volume ocupada por uma determinada fase líquida, e ρ_l , a concentração mássica desta fase líquida, por exemplo.

Comparando esta equação com, por exemplo, a Equação (3.7) ou (3.63) de conservação da massa da fase α , a única diferença entre elas é o termo de transferência interfacial, Γ_α . Se este for nulo as equações são as mesmas e, portanto, já são resolvidas.

O ANSYS CFX[®] utiliza um esquema de discretização de alta resolução para minimizar a difusão numérica (BARTH e JESPERSEN, 1989; DARWISH e MOUKALLED, 2003). A posição da interface é obtida por meio de uma iso-superfície de fração volumétrica que é deixada a cargo do programa de pós-processamento. E por isso, grosso modo, a implementação do modelo homogêneo do ANSYS CFX[®] é uma classe de VOF, embora o seu manual não seja claro quanto a isto. A interface é consequência direta da boa resolução da malha e solução do sistema de equações. Contudo, o manual do ANSYS CFX[®] não é explícito quanto ao método de compressão da interface, provavelmente por questões de sigilo comercial. Diante disto, este tratamento não é utilizado no trabalho por não haver documentação que fundamente o método.

Um outro motivo para declinar do uso é quando porções de fluido pequenas da ordem do espaçamento da malha estão presentes, ou seja, finamente dispersadas como gotas ou bolhas. Neste caso pode ocorrer uma espécie de filtragem e os resultados não apresentarem esta dispersão. Para a boa resolução da interface o refino de malha adequado é suficiente.

3.8 Considerações Finais sobre a Modelagem Matemática

Foram apresentadas algumas das metodologias de obtenção das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e propriedades relacionadas à turbulência em escoamentos multifásicos, bem como a fundamentação matemática que as embasa. Deve-se reiterar que o que foi descrito aqui não é a última palavra no que tange ao tratamento matemático de escoamentos multifásicos. As metodologias utilizadas não são as únicas e nem tão pouco se pode afirmar como as melhores. Pode-se considerar uma boa e útil abordagem que serve ao seu propósito. Há ainda muitos outros modelos e abordagens não comentadas neste Capítulo e que tratam detalhes dos mais variados, cada uma com as suas vantagens e limitações.

O leitor atento pôde notar que há muito mais perguntas e incertezas do que respostas, e as que por enquanto existem não são de todo críveis e inabaláveis - como tudo na ciência, requerendo ainda mais pesquisa e confrontação de resultados. E embora tenha sido uma discussão reconhecidamente extensa, este Capítulo apenas arranhou a superfície do problema.

Espera-se que este Capítulo permita ao leitor o embasamento matemático necessário ao bom entendimento do trabalho.

CAPÍTULO

4

MÉTODO NUMÉRICO

Este Capítulo descreve o Método de Volumes Finitos Baseado em Elementos, ou EbFVM, empregado na solução do sistema de equações diferenciais deduzidas no Capítulo 3. A literatura acerca do que há de se seguir é vasta, e não se tem a pretensão aqui de se discorrer sobre todos os detalhes da metodologia. O Capítulo anterior já apresentou uma grande quantidade de informações sobre a matemática envolvida, e o objetivo do trabalho não é o de ser um compêndio sobre o tema; não há aqui esta pretensão. Apenas os princípios e fundamentos essenciais à boa compreensão do método serão apresentados. Ao leitor mais ávido pelo assunto recomenda-se a leitura dos seguintes autores que escreveram com propriedade sobre o assunto. No caso, sugere-se Maliska (2004), Cordazzo (2006) e Keller (2007). Estas três referências resumem, respectivamente, detalhes acerca da base teórica do método, a implementação computacional e algoritmos de solução dos sistemas de equações resultantes.

Contudo, alguns detalhes da metodologia deste trabalho são intrínsecos do EbFVM, e devem ser discutidos, o que raramente se faz quando se usa simuladores comerciais. No entendimento deste autor, esta discussão é necessária, assim como tudo o que foi abordado no Capítulo 3, pois nenhum trabalho científico é crível se não puder fornecer as bases para a sua reprodução por outros pesquisadores. E isto deve ser assim, independentemente do simulador ANSYS CFX[®].

Alguns dos tópicos abordados neste Capítulo poderiam muito bem ser incluídos no Capítulo anterior, mas visto alguns assuntos e detalhes como condições de contorno, por exemplo, por estarem muito intimamente relacionados à implementação numérica e ao código ANSYS CFX[®], optou-se por abordá-los aqui ao invés de apresentá-los como parte da modelagem matemática.

4.1 Introdução

O método de volumes finitos baseado em elementos pode ser visto como a associação entre o método clássico de balanços de volumes de controle, ou volumes finitos, muito utilizado na solução de escoamentos e transferência de calor por sua natureza conservativa - o que é um forte apelo físico -, com a versatilidade e liberdade geométrica comum e teoricamente muito bem fundamentada do método de elementos finitos, muito usado em problemas estruturais. Não que ambos não possam ser usados em qualquer problema, assim como tantos outros como diferenças finitas, elementos de contorno, colocação ortogonal, etc. Fundamentalmente, são todos uma classe de métodos variacionais com suas raízes no método de resíduos ponderados onde a diferença está na função peso utilizada. A diferença reside em para quê, em sua concepção, foram desenvolvidos e por quem, a princípio, eram usados. A Figura 4.1 apresenta um diagrama relacionando os métodos e suas diferenças.

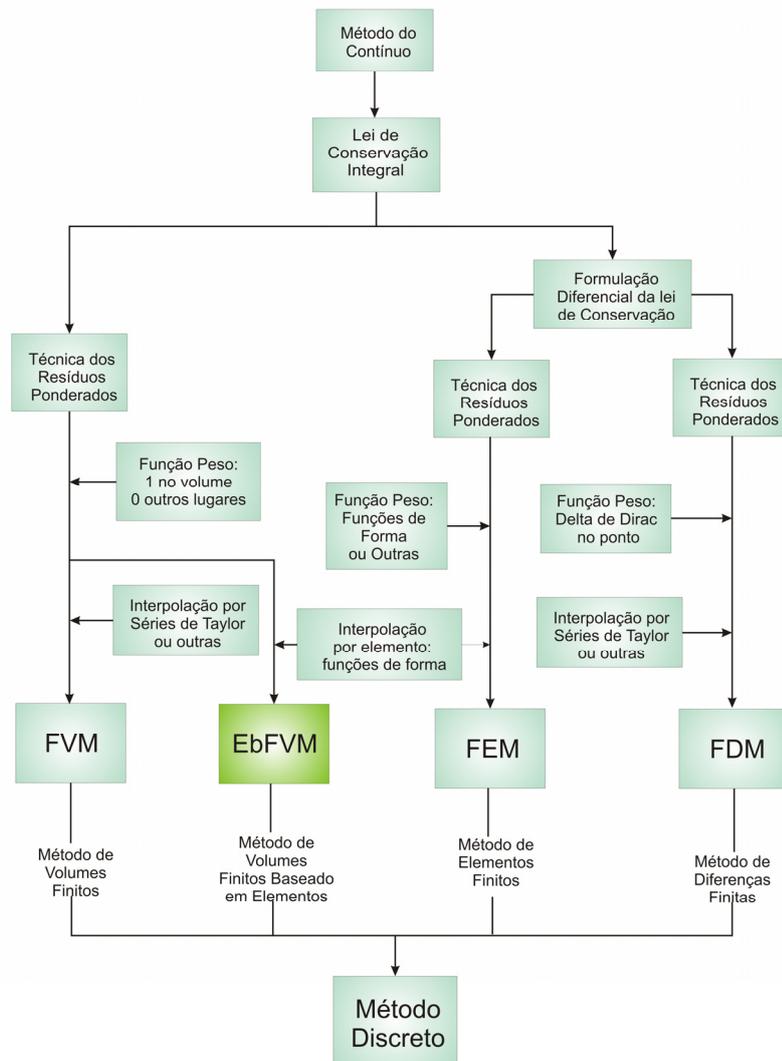


Figura 4.1. Diagrama das principais diferenças dos métodos numéricos. Adaptado de Cordazzo (2006).

A função básica de qualquer um destes métodos é, quando da impossibilidade da obtenção de uma solução analítica de um conjunto de equações diferenciais, reduzir este sistema a um conjunto de equações algébricas e então resolver este sistema por alguma metodologia numérica. Assim, ao invés de se ter uma solução contínua ao longo do domínio de cálculo para todo e qualquer ponto como se teria com uma solução analítica, obtém-se uma solução em regiões pré-determinadas que podem ser os pontos de colocação, volumes de controle, elementos, nós, etc, ou seja, a solução numérica é dada a um conjunto de pontos ou regiões discretas, ou finitas. A este artifício denomina-se *discretização*.

À medida que se aumenta a densidade deste conjunto de pontos, ou seja, quando a distância, h , entre estes pontos discretos tende a zero, o conjunto de equações algébricas deve retornar à formulação diferencial que a originou. A esta característica do método de discretização denomina-se *consistência*. Esta é uma característica muito importante, pois esta é uma condição necessária para que um sistema de equações algébricas obtido da discretização das equações diferenciais convirja para uma solução. Este cuidado é observado no método. A Figura 4.2 ilustra estes dois conceitos.

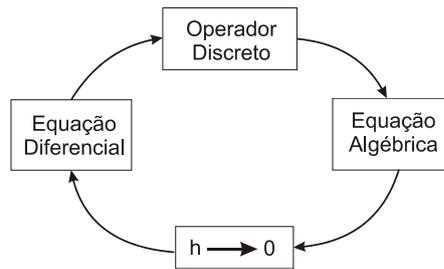


Figura 4.2. Representação gráfica da discretização e da consistência de um método numérico.

Como o nome indica, o EbFVM é um método de volumes finitos, embora seja baseado em elementos, assim, um volume de controle deve ser usado para a integração das equações diferenciais. O volume de controle é uma entidade geométrica discreta. Portanto, dado um domínio de cálculo, este deve ser discretizado também, e portanto, geometricamente subdividido. A estrutura resultante denomina-se *malha*. Os pontos de intersecção da malha são denominados *nós*.

A montagem de um volume de controle pode ser efetuada de duas maneiras: *cell vertex* ou *cell center*. A formulação *cell center* é aquela onde o elemento é o próprio volume de controle com o seu centro posicionado no *centro da célula*, enquanto que na formulação *cell vertex*, o centro dos volumes de controle são posicionados sobre os nós, os *vértices das células*. O método EbFVM utilizado tem uma formulação *cell vertex*.

A Figura 4.3 apresenta um exemplo de discretização de um domínio de cálculo bidimensional, e a representação geométrica de alguns dos conceitos apresentados. Um

detalhe: a malha resultante poderia ser usada também pelo método de diferenças finitas ou elementos finitos, sem a necessidade de se definir um volume de controle.

Então, em princípio, pode-se pensar que a malha é um ente à parte do método numérico que se pretende empregar, mas isso não é um conceito que se possa generalizar. Muitos problemas e/ou modelos matemáticos requerem um tipo específico, ou uma malha com certas características para uma boa representação da física do fenômeno, e muitas vezes manter a estabilidade da solução numérica. Portanto, o processo de geração de malha está implicitamente ligado a um bom resultado de uma simulação. Malhas mal projetadas dificultam ou mesmo impossibilitam a boa aplicação de um método numérico. Isto posto, ao seu tempo será dedicado um tópico à parte ao processo de geração de malha.

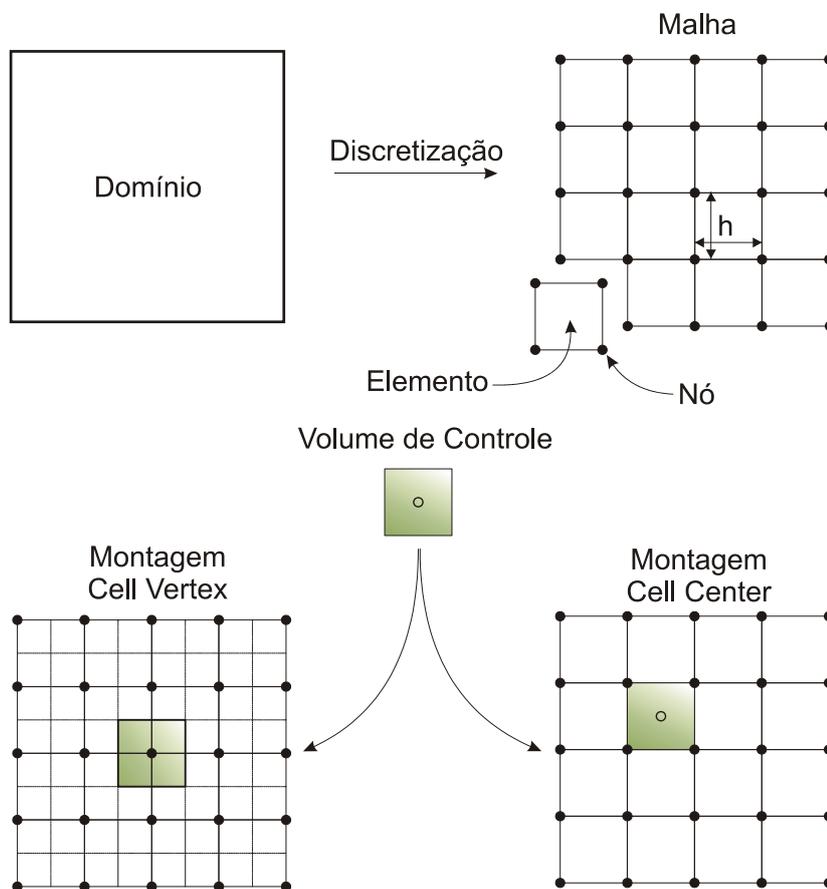
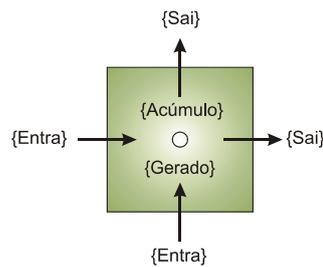


Figura 4.3. Exemplo bidimensional da discretização de um domínio e os esquemas de montagem dos volumes de controle.

4.1.1 Discretização do Domínio de Cálculo

No método clássico de volumes finitos as equações de conservação de massa, quantidade de movimento, etc, devem ser integradas sobre cada volume de controle, e o somatório dos fluxos da propriedade em questão devem ser, mesmo de maneira discreta,

conservados. A Figura 4.4 ilustra o balanço de uma propriedade qualquer em um volume de controle bidimensional quadrangular regular.



$$\{Entra\} - \{Sai\} + \{Gerado\} = \{Acúmulo\}$$

Figura 4.4. Balanço de uma grandeza qualquer em um volume de controle.

No método EbFVM com formulação cell vertex, o volume de controle é formado pelo somatório dos sub-volumes de controle adjacentes que envolvem o nó. Na Figura 4.5 isto é deixado mais claro: há uma malha formada por quatro elementos - três triangulares e um quadrangular -, e seis nós. Define-se o baricentro de cada elemento (círculo aberto) e então divide-se o elemento em sub-regiões: os sub-volumes de controle iguais em número ao número de nós que definem o elemento, portanto, elementos triangulares possuem três sub-volumes; quadrangulares, quatro; e assim por diante. Visto que um nó pode pertencer a mais de um elemento, como é o caso do nó central (N2) na Figura 4.5, pode haver mais de um sub-volume associado a um mesmo nó, e a união destes sub-volumes é que determina o volume de controle entorno deste nó.

É necessário se calcular o fluxo que atravessa a fronteira do volume de controle, e isto é feito nos chamados *pontos de integração* - π_i . Estes pontos localizam-se na fronteira entre dois sub-volumes de controle adjacentes dentro de um *mesmo elemento*. São nestas regiões que os fluxos entre dois volumes de controle *diferentes* são avaliados.

Esta forma de se avaliar os fluxos nas faces já traz em si uma vantagem em relação ao método de volumes finitos clássico: se recorrermos novamente à Figura 4.3, para o caso 2D, a montagem cell center permite que se avalie o fluxo em quatro faces com quatro pontos de integração, como mostrado na Figura 4.4, enquanto a cell vertex faz isso em oito faces com oito pontos de integração. Além disso, a área das faces é menor, e uma integração em um área menor é muito mais representativa do valor médio do fluxo desta face, portanto, mais preciso. E, o número de nós envolvidos - *o estêncil* - é maior, o que gera um melhor acoplamento na matriz dos coeficientes. Assim, em teoria, a mesma malha da Figura 4.3 usando uma montagem cell vertex com n^2 nós deveria ser tão precisa quanto uma malha com montagem cell center com $(2n-1)^2$ nós. E isso se verifica. No caso da montagem cell vertex, o número de volumes de controle *será igual ao número de nós e não igual ao número de elementos*, como

na montagem cell center, portanto, para a malha da Figura 4.3, a montagem cell vertex gera n^2 volumes de controle, enquanto a cell center $(n-1)^2$ volumes de controle.

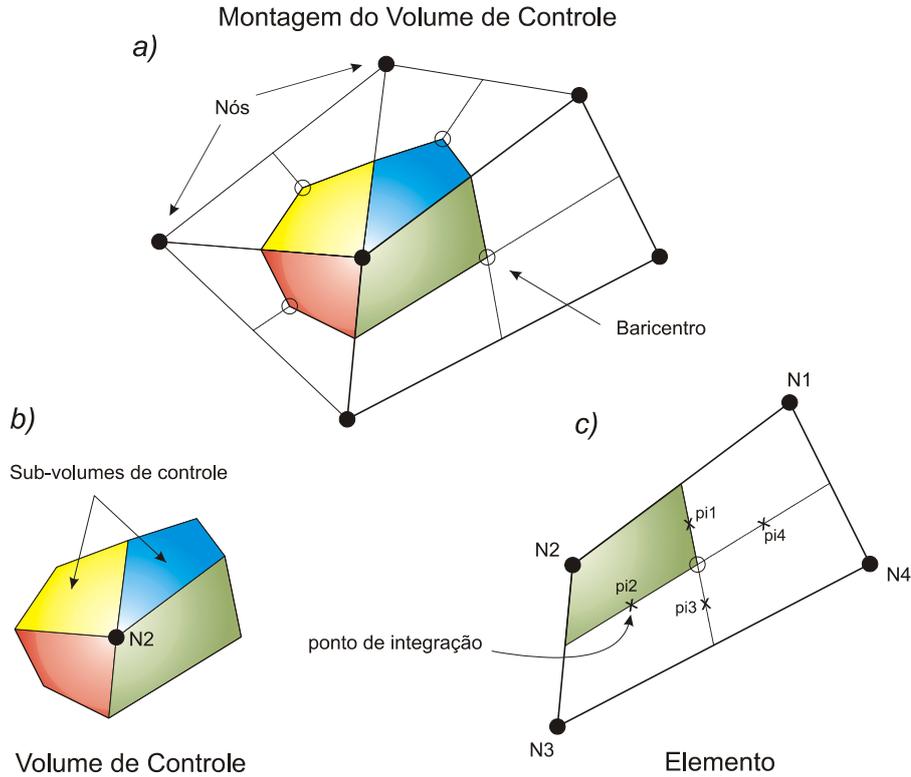


Figura 4.5. Volume de controle. Em **a)** exemplo de montagem do volume de controle a partir de elementos triangulares e quadrangular; em **b)** detalhe do volume de controle resultante; em **c)** detalhe de um elemento quadrangular mostrando seus pontos de integração, nós e sub-volumes de controle.

4.1.2 Discretização das Equações

O processo de discretização passa pela integração das equações diferenciais em sua *forma conservativa* sobre o volume de controle. Com base no *Teorema de Gauss*, algumas integrais de volume podem ser representadas como integrais de superfície, no caso, a superfície do volume de controle. Assim, para conservação da massa, quantidade de movimento e um escalar passivo tem-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j) = 0, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j U_i) = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right] + S_{U_i}, \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_j \phi) = + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\Gamma_{eff} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) \right] + S_{\phi}. \quad (4.3)$$

Integrando sobre o volume de controle e considerando que a região de integração não muda com o tempo, por Gauss e Leibniz tem-se,

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV + \int_S \rho U_j dn_j = 0, \quad (4.4)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho U_i dV + \int_S \rho U_i U_j dn_j = - \int_S P dn_j + \int_S \mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) dn_j + \int_V S_{U_i} dV, \quad (4.5)$$

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV + \int_S \rho U_j \phi dn_j = \int_S \Gamma_{eff} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) dn_j + \int_V S_\phi dV. \quad (4.6)$$

onde V representa o volume de integração; S a superfície de integração e dn_j a componente diferencial de superfície orientada de acordo com o vetor normal unitário à superfície apontando para fora. Estas integrais representam o somatório dos fluxos que atravessam cada uma das superfícies do volume de controle, $\mathbf{n}dS$.

Os termos volumétricos (acúmulo e fontes) são aproximados de forma discreta pelos seus valores específicos em cada sub-volume de controle, enquanto os fluxos são aproximados sobre cada elemento diferencial de superfície sobre o ponto de integração, pi , sendo este valor considerado representativo da média dos fluxos que atravessam o elemento diferencial de superfície. As integrais então representam o somatório de todas estas contribuições. Assim,

$$V \left(\frac{\rho - \rho^o}{\Delta t} \right) + \sum_{pi} (\rho U_j \Delta n_j)_{pi} = 0, \quad (4.7)$$

$$V \left(\frac{\rho U_i - \rho^o U_i^o}{\Delta t} \right) + \sum_{pi} (\dot{m}_{pi} U_i)_{pi} = - \sum_{pi} (P \Delta n_i)_{pi} + \sum_{pi} \left(\mu_{eff} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \Delta n_j \right)_{pi} + \overline{S_{U_i}} V, \quad (4.8)$$

$$V \left(\frac{\rho \phi - \rho^o \phi^o}{\Delta t} \right) + \sum_{pi} (\dot{m}_{pi} \phi_i)_{pi} = \sum_{pi} \left(\Gamma_{eff} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \Delta n_j \right)_{pi} + \overline{S_\phi} V, \quad (4.9)$$

sendo que $\dot{m}_{pi} = (\rho U_j \Delta n_j)_{pi}$ representa o fluxo de massa através do elemento de superfície discreto orientado Δn_j . O superescrito o representa o nível de tempo anterior. A discretização temporal neste caso usa uma aproximação de Euler regressiva de 1ª ordem. Apesar desta formulação implícita ser robusta, conservativa e estável, é uma aproximação de primeira ordem, e como tal, está sujeita à difusão numérica quando do tratamento de um acentuado gradiente na coordenada de tempo, como o que ocorre de forma muito semelhante a funções de interpolação upwind de 1ª ordem dos termos advectivos. Uma aproximação de segunda ordem debela a difusão numérica. Assim, de forma geral tem-se

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV \approx V \frac{(\rho \phi)^{n+\frac{1}{2}} - (\rho \phi)^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t}, \quad (4.10)$$

onde $n + 1/2$, e $n - 1/2$ representam o fim e o começo do passo de tempo, respectivamente. E, para uma aproximação de Euler regressiva de segunda ordem,

$$(\rho \phi)^{n-\frac{1}{2}} = (\rho \phi)^o + \frac{1}{2} \left[((\rho \phi)^o - (\rho \phi)^{oo}) \right], \quad (4.11)$$

$$(\rho \phi)^{n+\frac{1}{2}} = (\rho \phi) + \frac{1}{2} \left[((\rho \phi) - (\rho \phi)^o) \right]. \quad (4.12)$$

Desenvolvendo,

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi dV \approx \frac{V}{\Delta t} \left[\frac{3}{2} (\rho \phi) - 2 (\rho \phi)^o + \frac{1}{2} (\rho \phi)^{oo} \right]. \quad (4.13)$$

Embora esta formulação seja também robusta, conservativa e com aproximação de 2ª ordem, está sujeita a oscilações numéricas, o que pode criar resultados não físicos. Pode-se ganhar em precisão mas pode-se perder em estabilidade. Mas para o tratamento de quantidades como frações volumétricas ela é preferível pela precisão, e o uso de passos de tempo e malhas com espaçamento adequados asseguram a estabilidade (COURANT, FRIEDRICHS e LEWY, 1967).

4.1.3 Funções de Forma

Diferentemente do método de volumes finitos clássico onde as propriedades nas fronteiras devem ser interpoladas, geralmente por uma expansão em série de Taylor⁷, os valores das propriedades são obtidos por meio de funções de forma. Funções de forma ou funções peso são funções que descrevem como uma determinada propriedade varia dentro de cada elemento, sendo contínuas e diferenciáveis dentro do mesmo. *Elas são escritas em função do sistema de referência local do elemento.* As funções podem ser de vários tipos e a literatura de elementos finitos é vasta sobre isto (ver, por exemplo, HUTTON, 2004; LI, 2006). Assim, uma propriedade qualquer pode ser escrita como

$$\phi = \sum_{i=1}^{N_{nó}} N_i \phi_i, \quad (4.14)$$

onde N_i é a função de forma para o nó de índice i e ϕ_i é o valor que ϕ assume no nó i . Estas funções de forma tem a seguinte propriedade:

⁷ Séries de Taylor são apenas uma dentre outras maneiras de se obterem funções de interpolação. Outras formas de interpolação mais robustas podem ser encontradas em Maliska (2004).

$$\sum_{i=1}^{N_{\text{nó}}} N_i = 1 \quad \text{no nó } j \quad N_i = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}. \quad (4.15)$$

As funções de forma implementadas no simulador Ansys CFX são *funções trilineares*. Os elementos podem assumir uma infinidade de formas geométricas, contudo, neste trabalho apenas dois tipos de elementos são utilizados: Hexaédricos e Prismáticos. Na Figura 4.6 tem-se uma representação dos dois. Eles não precisam ser necessariamente regulares como nota-se pela figura. O sistema de referência local é usado para avaliação das funções de forma e a numeração dos nós, em relação a este sistema, quando definida, deve ser aplicada igualmente a todos os elementos. No caso, ela é anti-horária a partir da origem aplicada primeiramente ao plano definido pelos vetores de base s e t , depois ao plano à frente ainda no sentido anti-horário.

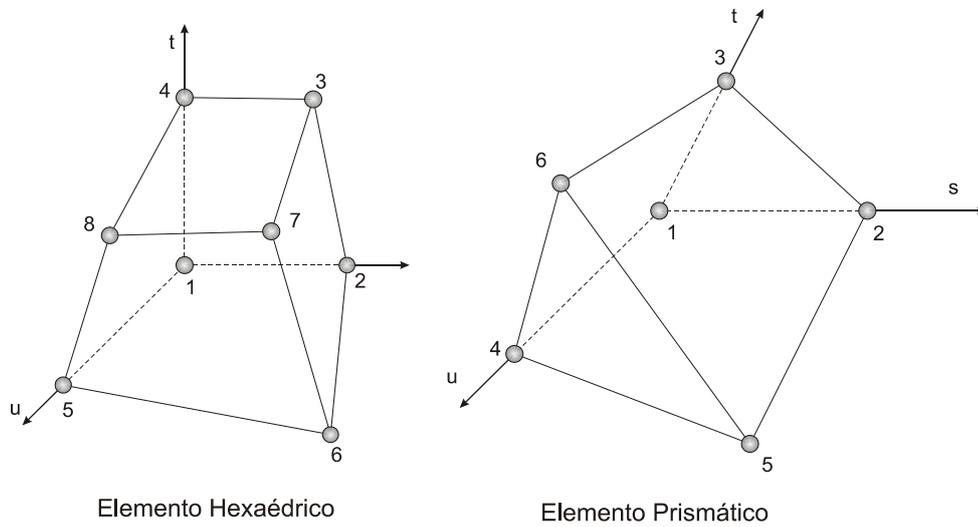


Figura 4.6. Representação dos dois tipos de elementos usados neste trabalho, hexaédrico e prismático, bem como a enumeração dos seus nós dentro do sistema de referência local onde s , t e u variam de 0 até 1.

Para o elemento hexaédrico tem-se

$$\begin{aligned} N_1(s, t, u) &= (1-s)(1-t)(1-u) \\ N_2(s, t, u) &= s(1-t)(1-u) \\ N_3(s, t, u) &= st(1-u) \\ N_4(s, t, u) &= (1-s)t(1-u) \\ N_5(s, t, u) &= (1-s)(1-t)u \\ N_6(s, t, u) &= s(1-t)u \\ N_7(s, t, u) &= stu \\ N_8(s, t, u) &= (1-s)tu \end{aligned} \quad (4.16)$$

E, para o prismático,

$$\begin{aligned}
N_1(s, t, u) &= (1-s-t)(1-u) \\
N_2(s, t, u) &= s(1-u) \\
N_3(s, t, u) &= t(1-u) \\
N_4(s, t, u) &= (1-s-t)u \\
N_5(s, t, u) &= su \\
N_6(s, t, u) &= tu
\end{aligned} \tag{4.17}$$

Assim, qualquer propriedade, em qualquer posição *dentro do elemento*, inclusive as coordenadas (x, y, z) no sistema de referência global dos nós, podem ser escritas como uma superposição linear dos valores que as mesmas possuem nos nós, ponderadas pela função de forma de cada um, como assinala a Equação (4.14). Portanto, as coordenadas dos pontos de integração, podem ser obtidas a partir das coordenadas dos nós no sistema de referência global, bastando para isso avaliar as funções de forma em *relação ao sistema de referência local do elemento*, e com isso, calcular-se propriedades geométricas de interesse, como comprimentos, áreas e volumes:

$$\phi_{pi} = \sum_n N_n(s_{pi}, t_{pi}, u_{pi}) \phi_n. \tag{4.18}$$

Para o cálculo de fluxos e gradientes, basta que se tomem as derivadas das funções de forma, e usando a regra da cadeia, temos então

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{ip} = \sum_n \left. \frac{\partial N_n}{\partial x} \right|_{ip} \phi_n, \tag{4.19}$$

onde,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial x} \\ \frac{\partial N}{\partial y} \\ \frac{\partial N}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial s} & \frac{\partial z}{\partial s} \\ \frac{\partial x}{\partial t} & \frac{\partial y}{\partial t} & \frac{\partial z}{\partial t} \\ \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial u} & \frac{\partial z}{\partial u} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N}{\partial s} \\ \frac{\partial N}{\partial t} \\ \frac{\partial N}{\partial u} \end{bmatrix}. \tag{4.20}$$

A matriz que surge é a *Matriz Jacobiana* da transformação do sistema de referência físico para o local do elemento. A vantagem das funções de forma sobre as séries de Taylor do método clássico é que as derivadas não são aproximações discretas, e sim derivadas de funções que são, como já dito, contínuas. Claro, pode-se argumentar que o comportamento dentro do elemento não é linear, e as funções de forma trilineares não se aplicam, basta então que se proponha outra função que se adeque melhor ao comportamento da propriedade em estudo. Neste trabalho as funções são tomadas como trilineares.

4.1.4 Gradiente de Pressão

O termo de pressão passa pela avaliação do termo $(P\Delta n_{pi})_{pi}$. A pressão no ponto de integração é então calculada com base no valores nodais usando a Equação (4.18):

$$P_{pi} = \sum_n N_n(s_{pi}, t_{pi}, u_{pi}) P_n. \quad (4.21)$$

4.1.5 Termo Advectivo

O termo advectivo é avaliado por uma formulação upwind que tem a forma

$$\phi_{ip} = \phi_{up} + \beta \nabla \phi \cdot \Delta \vec{r}, \quad (4.22)$$

sendo ϕ_{up} o valor de ϕ no nó a montante (upwind); β o peso ou fator de mistura; $\nabla \phi$ o gradiente de ϕ e $\Delta \vec{r}$ o vetor posição entre o nó a montante e o ponto de integração.

A segunda parcela da Equação (4.22) atua como uma contra-difusão gerada pela aproximação de 1ª ordem (ver MALISKA, 2004 p. 88). Para $\beta = 0$ tem-se upwind de 1ª ordem, robusto e susceptível à difusão numérica, enquanto $\beta = 1$ tem-se um esquema de 2ª ordem mais acurado e sem difusão numérica, mas susceptível a oscilações diante de gradientes espaciais acentuados. No esquema de alta resolução o valor de β é automaticamente escolhido entre estes dois valores dependendo das condições locais (BARTH e JESPERSEN, 1989; DARWISH e MOUKALLED, 2003).

4.1.6 Acoplamento Massa - Pressão -Velocidade

O método utilizado é o método Rhie-Chow (MENDES, 2007) com arranjo co-localizado. Não entraremos em detalhes da discretização, por dois motivos: o 1º é por ser extensa, o segundo é devido a falta de informação do manual do ANSYS CFX 11. A descrição que se segue é discutida em Burns (2002). Assim, segundo Burns (2002), tem-se para as velocidades nos pontos de integração:

$$U_{i,pi} = \bar{U}_{i,pi} + f_{pi} \left[\frac{\partial p}{\partial x_i} \Big|_{pi} - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \Big|_{pi} \right] - c_{pi} f_{pi} (U_{i,pi}^o - \bar{U}_{i,pi}^o), \quad (4.23)$$

onde

$$f_{ip} = \frac{d_{ip}}{1 - c_{ip} d_{ip}}, \quad d_{ip} = -\frac{V}{A}, \quad c_{ip} = \frac{\rho}{\Delta t}, \quad (4.24)$$

sendo A a aproximação dos coeficientes excluindo o termo transiente, e V o volume do volume de controle. As barras superiores indicam valores médios em torno do ponto de integração.

A forma discreta da equação de conservação da massa para cada fase é dada por:

$$\frac{\rho_\alpha V}{\Delta t} (r_{\alpha,i}^{n+1} - r_{\alpha,i}^n) + \sum_{i=ip} (\rho_\alpha r_{\alpha,ip}^{n+1} U_{\alpha,ip}^n + \rho_\alpha r_{\alpha,ip}^n U_{\alpha,ip}^{n+1} - \rho_\alpha r_{\alpha,ip}^n U_{\alpha,ip}^n) \cdot \mathbf{A}_{ip} = 0, \quad (4.25)$$

sendo \mathbf{A}_{ip} a matrix de coeficientes do termo advectivo nos pontos de integração. Substituindo a Equação (4.23) e desprezando a segunda parcela,

$$\begin{aligned} & \frac{\rho_\alpha V}{\Delta t} (r_{\alpha,i}^{n+1} - r_{\alpha,i}^n) + \sum_{i=ip} [\rho_\alpha (r_{\alpha,i}^{n+1} - r_{\alpha,i}^n) U_{\alpha,ip}^n] \cdot \mathbf{A}_{ip} + \dots \\ & \dots + \sum_{i=ip} \left(\rho_\alpha r_{\alpha,ip}^n \left[\overline{U}_{\alpha,i}^{n+1} + f_{pi} (\nabla P - \overline{\nabla P})^{n+1} \right] \right) \cdot \mathbf{A}_{ip} = 0 \end{aligned} \quad (4.26)$$

Nas Equações (4.25) e (4.26) foi usada a linearização de Newton-Raphson (ver GALPIN e RAITHBY, 1986; e MALISKA, 2004 p. 151). Isso, mais a Equação (4.23) permite uma equação para evolução das frações acoplada ao campo de velocidades e pressão.

Para a evolução da pressão tem-se que a conservação do volume é dada por,

$$\sum_{\alpha} r_{\alpha,i}^{n+1} = 1. \quad (4.27)$$

Substituindo-se a Equação (4.26) em (4.27), temos

$$\sum_{\alpha} \sum_{i=ip} [\rho_\alpha (r_{\alpha,i}^{n+1} - r_{\alpha,i}^n) U_{\alpha,ip}^n] \cdot \mathbf{A}_{ip} + \sum_{\alpha} \sum_{i=ip} \left(\rho_\alpha r_{\alpha,ip}^n \left[\overline{U}_{\alpha,i}^{n+1} + f_{pi} (\nabla P - \overline{\nabla P})^{n+1} \right] \right) \cdot \mathbf{A}_{ip} = 0, \quad (4.28)$$

que é uma equação discreta de Poisson para pressão acoplada às frações das fases α e à velocidade. Estas equações mais a forma discreta das *equações físicas* de Navier-Stokes formam um sistema fechado e acoplado de equações algébricas, como exemplo:

$$\frac{r_{\alpha}^n \rho_{\alpha} V_i}{\Delta t} \left[(U_{\alpha}^k)_i^{n+1} - (U_{\alpha}^k)_i^n \right] + (\mathbf{A}_{\alpha}^k)_{ij} (U_{\alpha}^k)_j^{n+1} = -r_{\alpha}^n \sum_{i=pi} (P_{pi} A_{pi}^k)^{n+1} + V_i \sum_{\beta} c_{\alpha\beta} (U_{\beta}^k - U_{\alpha}^k)_i^{n+1}, \quad (4.29)$$

onde \mathbf{A}_{α}^k representa a matriz de coeficientes de advecção-difusão para componente de velocidade U_{α}^k , sendo k a iteração na atualização dos coeficientes dentro do passo de tempo n .

Neste caso, está sendo considerado o modelo heterogêneo, e os campos de velocidade estão acoplados pelos termos de transferência interfacial. Para o modelo homogêneo, como há apenas um campo de velocidades, o último termo desaparece, e o campo de velocidades permanece acoplado ao de pressão e frações volumétricas por meio das Equações (4.26) e (4.28).

Por isso no Capítulo 3, mesmo quando se deduziu o modelo homogêneo, mantiveram-se as equações de conservação da massa para cada fase, ao invés de, a partir da

conservação do volume, Equação (4.27), somá-las e escrever a equação de conservação global da massa que resultaria em:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (4.30)$$

Esta equação, embora fisicamente correta, numericamente não é prática, pois não resta equações onde a variável ativa⁸ é a fração volumétrica e o sistema não fecha, embora isto seja mais relevante para a solução segregada. Portanto, manter as equações físicas de conservação da massa é um bom artifício, pois permite que as frações volumétrica tenham equações evolutivas no tempo acopladas aos outros campos; e para a pressão, a conservação do volume permite o acoplamento e fechamento do sistema. E, nada mais natural do que usar as próprias equações de quantidade de movimento para os campos de velocidade.

A filosofia que se apresentou tem por objetivo resolver todas as variáveis no mesmo passo iterativo ao mesmo tempo. Quando convergida, esta metodologia garante que o somatório das frações seja igual a unidade, o que nem sempre ocorre em outros métodos (BURNS, 2002). Pode haver tanto perda quanto ganho de massa, não garantindo, portanto, a conservação das propriedades. Contudo, um mal condicionamento da matriz dos coeficientes afeta o *solver*, o que freqüentemente resulta em divergência. Assim, ou esta abordagem converge para um resultado correto e conservativo dentro dos critérios estabelecidos, ou ela diverge. Então o problema deve ser bem posto, o que é uma obrigação em qualquer método, e a malha e passos de tempo devem ser planejados com critério, além de outros artifícios algébricos, como sub ou sobre relaxações, garantir a dominância diagonal da matriz, escolha do esquema de aglomeração do multigrid algébrico (AMG), etc.

4.1.7 Solução do Sistema Linear

Após a discretização do sistema de equações, ele é reduzido a um sistema linear de equações algébricas do tipo

$$\sum_{nb_i} A_i^{nb} \phi_i^{nb} = B_i, \quad (4.31)$$

onde nb indica os nós vizinhos ao nó i . Escrevendo de forma matricial tem-se,

$$[A]\{\phi\} = \{B\}. \quad (4.32)$$

O sistema linear acima é então resolvido de forma iterativa,

⁸ Por variável ativa entende-se o seguinte: qualquer uma das equações, conservação da massa de cada fase, conservação do volume ou quantidade de movimento pode ser usada para se explicitar a solução de qualquer uma das variáveis do sistema de equações, a variável que se explicita, é no caso a variável ativa, as demais entram como coadjuvantes no acoplamento, ou apenas nos coeficientes, e são explicitadas nas demais equações.

$$\phi^{k+1} = \phi^k + \phi', \quad (4.33)$$

sendo ϕ' a solução aproximada da iteração k ,

$$A\phi' = r^k. \quad (4.34)$$

Como ϕ' não é a solução exata do sistema ela não reproduz a identidade da Equação (4.31) e temos que o resíduo r^k é obtido por

$$r^k = B - A\phi^k, \quad (4.35)$$

onde ϕ^k é a solução da iteração anterior.

O ANSYS CFX[®] utiliza como método de solução uma decomposição LU incompleta, que é uma variante do método de eliminação de Gauss. A matriz dos coeficientes é decomposta em duas matrizes diagonais, uma inferior (*Lower*) e outra superior (*Upper*), sendo escrita como $[A]\{\phi\} = [L][U]\{\phi\} = \{B\}$. Resolve-se primeiramente o sistema $[U]\{\phi\} = \{D\}$, e em seguida $[L]\{D\} = \{B\}$. Este, contudo é um método direto e computacionalmente custoso. Principalmente em se tratando de matrizes esparsas, pois o método manipula todos os coeficientes inclusive os nulos, por isso a decomposição LU incompleta é empregada, com o intuito principal de tirar proveito da esparsidade da matriz manipulando apenas os termos não-nulos e obtendo uma matriz aproximada. Assim, podemos escrever

$$[L][U] = [A] + [A']. \quad (4.36)$$

A decomposição LU neste caso não é exata pois gera duas matrizes. A matriz $[A']$ deve ser tal que permita uma fácil obtenção da decomposição,

$$[A + A']\{\phi\}^{k+1} = [A + A']\{\phi\}^k - \{[A]\{\phi\}^k - \{B\}\}. \quad (4.37)$$

Quando a solução é obtida, o segundo termo da Equação (4.37) deve ser igual a zero, pois ele representa o resíduo

$$[A]\{\phi\}^k - \{B\} = \{R\}^k, \quad (4.38)$$

evicenciando que $\{\phi\}^{k+1} = \{\phi\}^k$ e portanto, a matriz $[A']$ não tem nenhum efeito sobre o resultado da solução, mas pode ter sobre a velocidade da mesma, ou mesmo sobre a convergência. A diferença entre as soluções em cada iteração k é dada por

$$\{\delta\}^{k+1} = \{\phi\}^{k+1} - \{\phi\}^k. \quad (4.39)$$

Substituindo (4.38) e (4.39) em (4.37) tem-se,

$$[A + A']\{\delta\}^{k+1} = -\{R\}^k. \quad (4.40)$$

Utilizando (4.36), obtém-se:

$$[L][U]\{\delta\}^{k+1} = -\{R\}^k. \quad (4.41)$$

E, como na decomposição completa, resolvemos $[L]\{V\} = -\{R\}^k$ e em seguida $[U]\{\delta\}^{k+1} = \{V\}$ obtendo-se então $\{\delta\}^{k+1}$, que por meio da Equação (4.39) permite encontrar o valor de $\{\phi\}^{k+1}$ no próximo passo iterativo. O processo segue até que o resíduo dado pela Equação (4.38) esteja abaixo da tolerância especificada.

Contudo, nem sempre o método de solução consegue minimizar o resíduo abaixo da tolerância. Muitas vezes a solução fica estagnada em certo patamar, e isto acontece por vários motivos, e entre estes, podemos ter mal condicionamento da matriz, problemas mal postos, esparsidade, termos fontes, etc. Todavia, um dos principais problemas é que relaciona muitos dos que foram citados diz respeito a anisotropia dos coeficientes. O ideal é que os coeficientes tenham o mesmo “peso” dentro do processo de solução, pois uma matriz com coeficientes muito anisotrópicos pode ser mal condicionada, possuir auto-valores complexos ou muito maiores que a unidade, não ser positiva nem negativa definida (ponto de sela), e apresentar uma outra série de características indesejáveis para a solução do sistema linear.

Esta anisotropia dos coeficientes pode ser de origem física, devido a um meio realmente anisotrópico onde as propriedades físicas assumem comportamentos diferentes em diferentes direções; ou mesmo por uma malha com uma razão de aspecto inadequada. O que se observa na prática é que os erros são minimizados rapidamente na direção dos maiores coeficientes e o oposto se dá na direção dos menores ou coeficientes menos “pesados”. O espaçamento da malha tende a minimizar rapidamente os erros que possuem comprimento de onda da mesma ordem, e feito isso, a solução estagna e a convergência é lenta ou mesmo nem obtida. Caso malhas diferentes fossem usadas, toda a banda de frequências de erros poderia ser reduzida acelerando a convergência.

Esta idéia é empregada nos métodos denominados *multigrid*, todavia, isto não é feito com refino adaptativo, isto é feito de maneira mais abstrata, ou seja, matematicamente. O procedimento básico é “engrossar” a malha na direção dos coeficientes menos pesados igualando a magnitude dos mesmos aos demais. Isto pode ser feito mais de uma única vez em um ou mais ciclos de aglomeração e refinamento, pois ao final a informação deve retornar à malha original. O critério de escolha pode ser tanto por meio da malha (Multigrid Geométrico), e neste caso apenas o efeito geométrico está sendo levado em conta, ou dos coeficientes (Multigrid Algébrico), neste caso o efeito algébrico é considerado e este implicitamente carrega o efeito geométrico.

O ANSYS CFX[®] utiliza o método multigrid algébrico (AMG) de correções aditivas (ACM) (MALISKA, 2004; KELLER, 2007). Considerando a equação discretizada, ou o sistema linear

$$A_i \phi_i - \sum A_{nb} \phi_{nb} = b_i, \quad (4.42)$$

tem-se que i é o índice na variável na malha fina, e A_{nb} são todos os coeficientes associados aos seus vizinhos nb . Itera-se um pouco nesta malha o suficiente para eliminar os erros de alta frequência. Passa-se então para uma malha mais grosseira onde os erros de baixa frequência serão eliminados e assim sucessivamente dependendo do tipo de ciclo. A Figura 4.7 ilustra um exemplo de aglomerações sucessivas. Vale reiterar que esta fusão de volumes de controle é meramente algébrica ou virtual e não geométrica, não há refinamento ou engrossamento real da malha original. Eles nem mesmo precisam ser vizinhos contíguos.

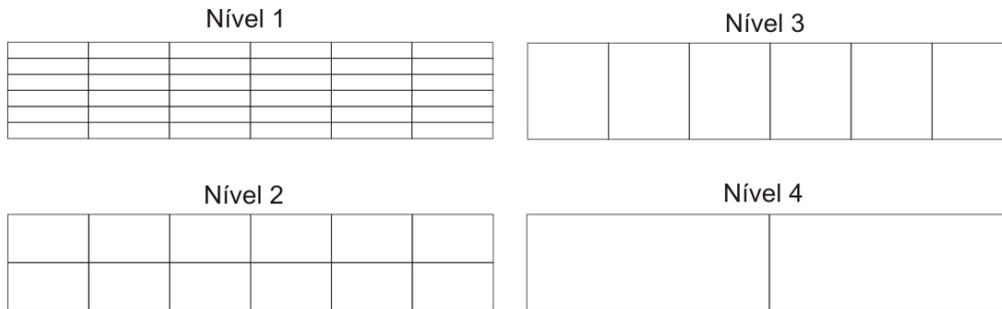


Figura 4.7. Exemplo da aglomeração aplicada a uma malha inicialmente refinada.

A solução da malha no último nível deve ser repassada à malha do nível anterior e assim sucessivamente. A correção da variável no nível i é dada por

$$\tilde{\phi}_i = \phi_i + \phi_{I,i}^*, \quad (4.43)$$

onde ϕ_i é a solução na malha fina i , e $\phi_{I,i}^*$ a correção aplicada na malha grossa I . Os volumes da malha I são obtidos por *aglomeração algébrica* dos volumes da malha i , como ilustrado na Figura 4.7. O método deve ser conservativo, então o resíduo da correção deve ser nulo, assim,

$$\sum_{i \text{ de } I} \tilde{r}_i = 0, \quad (4.44)$$

$$\tilde{r}_i = b_i - A_i \tilde{\phi}_i + \sum_{nb \text{ de } i} A_{nb} \tilde{\phi}_{nb} = 0, \quad (4.45)$$

substituindo (4.43),

$$\tilde{r}_i = b_i - A_i (\phi_i + \phi_{I,i}^*) + \sum_{nb \text{ de } i} A_{nb} (\phi_{nb} + \phi_{NB,nb}^*) \tilde{\phi}_i = \phi_i + \phi_{I,i}^* = 0, \quad (4.46)$$

$$\tilde{r}_i = b_i - A_i \phi_i + \underbrace{\sum_{nb \text{ de } i} A_{nb} \phi_{nb}}_{r_i} - A_i \phi_{I,i}^* + \sum_{nb \text{ de } i} A_{nb} \phi_{NB,nb}^* = 0, \quad (4.47)$$

isolando r_i ,

$$\sum_{i \text{ de } I} r_i = \sum_{nb \text{ de } i} (A_i \phi_{i,I}^* - A_{nb} \phi_{NB,nb}^*) = 0. \quad (4.48)$$

Ou seja,

$$A_i \phi_{i,I}^* = \sum_{nb \text{ de } i} A_{nb} \phi_{NB,nb}^* + b_I, \quad (4.49)$$

onde $b_I = \sum_{i \text{ de } I} r_i$.

Este sistema linear é então resolvido para determinar ϕ^* , a correção no bloco I , que por sua vez corrige $\tilde{\phi}_i$. A idéia é então resolver malhas mais grosseiras eliminando toda a faixa de frequências dos erros até que se chegue a um sistema linear onde uma solução direta, possa ser usada. Uma vez obtida a solução, inicia-se o processo de correção em cada nível, por isso o nome correções aditivas. Claro que isso requer uma considerável alocação de memória, pois a informação deve ser repassada intacta para o 1º nível.

O critério de aglomeração adotado neste trabalho foi a anisotropia dos coeficientes das equações de velocidade.

4.1.8 Geração de Malha

Grande parte do sucesso de uma simulação está relacionada com a qualidade da malha empregada. Isto vai depender do método numérico, dos modelos e da física do problema em estudo. Para escoamentos multifásicos, a região que define a interface deve sempre que possível possuir um espaçamento de malha adequado, caso contrário a definição desta interface será difusa, e efeitos como quebra e coalescência podem ser induzidos por uma malha com um espaçamento inadequado. O modelo $k-\varepsilon$ também requer uma certa distância do primeiro nó à parede para que a lei de parede usada na condição de contorno seja válida.

Nós que pertencem a mais de uma região com condições de contorno distintas também são problemáticos, pois o volume de controle em torno deste nó tem sub-volumes com condições de contorno diferentes, o que pode alterar valores de grandezas especificadas como velocidades ou temperatura, *pois a condição de contorno não é aplicada ao nó e sim à face*.

A Figura 4.8 mostra um exemplo disto. Em azul há uma parede com condição de não-deslizamento, enquanto ao centro uma região com velocidade prescrita *normal ao plano* do papel. Apenas a título de ilustração, desconsiderando o domínio após o plano do papel, qual o valor de velocidade que os nós pertencentes às duas regiões vão assumir? Fazendo-se um balanço do fluxo de quantidade de movimento no volume de controle destacado em torno de um destes nós, o mesmo terá um valor de velocidade entre o das duas regiões. Mas qual valor? Mais próximo de zero, ou da condição de entrada?

Isto vai depender do tamanho de cada sub-volume de controle, pois a integração vai ser uma média das contribuições de cada um deles ponderada pelo volume de cada um, ou em se tratando de fluxos, ponderado pela área. Neste caso, como a malha é uniforme todos os sub-volumes tem a mesma dimensão ou “peso”, então se tem um valor médio para este nó que deve ser 50% do valor prescrito para a entrada. Para os nós dos cantos, isto ainda é mais crítico, pois o valor médio será de 25% deste valor. O único volume de controle e nó que terão realmente o valor exato da condição de contorno prescrita para a entrada será o nó central e o volume de controle em torno deste. O resultado é que a *velocidade média* da região de entrada é muito menor do que a que foi prescrita, e deve-se atentar para este fato.

Uma maneira de contornar isto é minimizar a influência destes nós de fronteira refinando-se a malha. Assim, as áreas e volumes discretos serão pequenos e terão menos influência sobre o resultado médio da região.

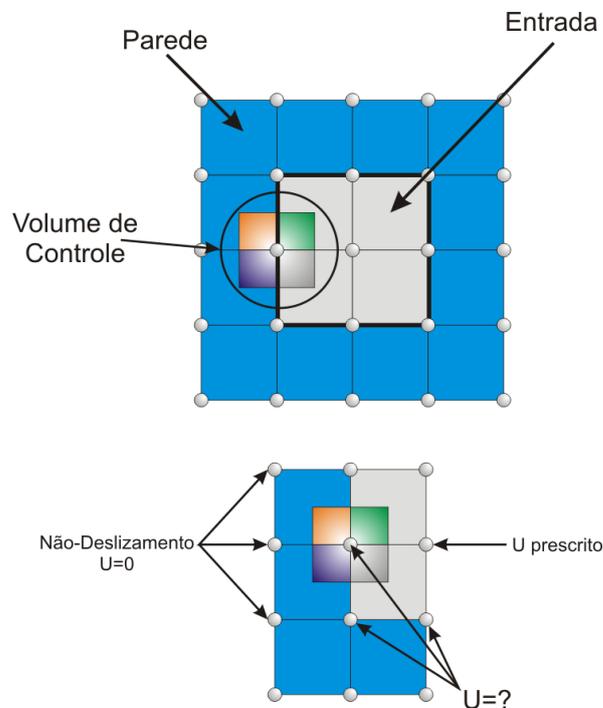


Figura 4.8. Exemplo de problemas que podem ocorrer em nós que pertencem a regiões com condições de contorno diferentes.

Este problema é especialmente crítico quando se resolve um jato líquido aberto para atmosfera, como se pretende neste trabalho. Ou a região azul da Figura 4.8 é uma parede, ou é uma abertura com pressão prescrita. Caso a malha não seja refinada adequadamente nesta região, a *velocidade média* de saída do jato líquido vai ser diferente do que a prescrita e, muito provavelmente, a sua trajetória. Este cuidado foi tomado durante a geração da malha.

Para o modelo $k-\varepsilon$, recomenda-se que o valor da distância adimensional do 1º nó à parede esteja entre 11 e 300. E esta distância deve ser calculada com base no número de Reynolds,

$$\text{Re}_L = \frac{\rho U_\infty L}{\mu} \quad (4.50)$$

Partindo da definição do coeficiente de atrito temos,

$$c_f = 2 \frac{\rho u_\tau^2}{\rho U_\infty^2} = 2 \left(\frac{u_\tau}{U_\infty} \right)^2 \quad (4.51)$$

onde $u_\tau = \sqrt{\tau_w / \rho}$ é a já conhecida velocidade friccional, definida no Capítulo 3, Seção 3.4.4, Equação (3.115). A definição da distância adimensional é dada por,

$$\Delta y^+ = \frac{\Delta y u_\tau}{\nu} \quad (4.52)$$

Substituindo (4.51) em (4.52) pode-se escrever:

$$\Delta y = \Delta y^+ \sqrt{\frac{2}{c_f}} \frac{\nu}{U_\infty} \quad (4.53)$$

O coeficiente de atrito pode ser eliminado substituindo-se a seguinte correlação na Equação (4.53), (ANSYS, 2007):

$$c_f = 0,025 \text{Re}_x^{-1/2} \quad (4.54)$$

Isso e a Equação (4.50) permite-nos escrever,

$$\Delta y = L \Delta y^+ \sqrt{80} \text{Re}_x^{1/4} \frac{1}{\text{Re}_L} \quad (4.55)$$

Uma aproximação prática é considerar Re_x proporcional a Re_L : $\text{Re}_x = C \text{Re}_L$. Pode-se assumir que $C^{1/4} \approx 1$, assim,

$$\Delta y = L \Delta y^+ \sqrt{80} \text{Re}_L^{-1/4} \quad (4.56)$$

Esta equação permite com base no número de Reynolds e em uma escala de comprimento *estimar* a altura do primeiro nó para qualquer Δy^+ .

Para este trabalho, o número de Reynolds está em torno de 200.000. Considerando a velocidade dentro do canal da ordem de 0,1m/s (GONDOLF, RANDAL e LANGE, 2001; LUOMALA *et al.*, 2001; HE *et al.*, 2002a; HE *et al.*, 2002b; BEGNIS, BRANDALEZE e TOPOLEVSKY, 2005; STEVENSON e HE, 2005) e uma escala de comprimento de 1,2m correspondente à altura da superfície livre, a altura do 1º nó deve estar entre 1mm e 10 cm. Isto pode ser averiguado na Figura 4.9.

Respeitar esta necessidade do modelo de turbulência é simples, mas implica em algumas conseqüências. A razão de crescimento entre os elementos, por exemplo, não pode ser muito alta, o que se traduz em uma número elevado de elementos para se manter a transição adequada entre as regiões que exigem refino e as que poderiam ser mais grosseiras, ou seja, a qualidade geométrica da malha é importante para o bom andamento e robustez da

solução numérica. Os parâmetros mais importantes e que tem atenção recomendada pelo simulador são: ortogonalidade, ângulos máximos e mínimos, razão de aspecto, fator de expansão ou razão entre dois volumes adjacentes, e razão de arestas. Alguns valores recomendados para o ANSYS CFX[®] se encontram na Tabela 4.1.

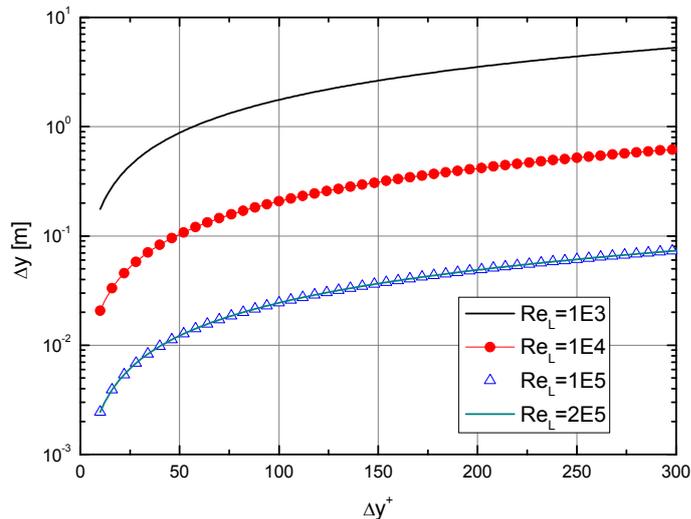


Figura 4.9. Variação da altura do primeiro nó em relação ao y^+ para alguns números de Reynolds.

Manter o y^+ dentro dos valores recomendados e respeitar os parâmetros da Tabela 4.1 não é tarefa simples e requer atenção. Na geração da malha mostrada na Figura 4.10, estes parâmetros foram respeitados. Uma malha bem projetada é uma grande parte do caminho a se percorrer para se alcançar o sucesso de uma simulação. Respeitar estes parâmetros permite que eventuais problemas numéricos, quando ocorrerem, não estejam relacionados a uma malha mal projetada. Assim, se malha estiver adequada, muito provavelmente os problemas estão relacionados à modelagem ou a outros parâmetros de controle do solver.

Tabela 4.1. Parâmetros de malha recomendados para uma boa solução numérica, (ANSYS, 2007).

Ângulos	Fator de expansão	Razão de volumes	Razão de aspecto	Razão de arestas
$10^\circ < \theta < 170^\circ$	< 20	< 5	< 100	< 20

Elementos hexaédricos permitem um bom controle destes parâmetros e do número de nós. Para malhas densas, o número de nós é aproximadamente igual ao número de hexaedros, diferentemente de malhas tetraédricas cuja geração é mais simples, mas o controle dos elementos é mais complicado e muitas vezes impossível sem se extrapolar no número de elementos.

As malhas utilizadas neste trabalho foram geradas pelo software ICEM CFD[®] Release 11, também da ANSYS, sendo na opinião deste autor o gerador de malhas mais completo que se conhece, pois dá ao usuário controle total sobre praticamente todos os parâmetros da geometria e da malha.

A malha utilizada neste trabalho é uma malha hexaédrica não-estruturada formada por cerca de 375 mil elementos, o que se traduz em quase 400 mil nós, com refino adequado para captura da interface e uso da lei de parede. A Figura 4.10 apresenta a malha utilizada neste trabalho.

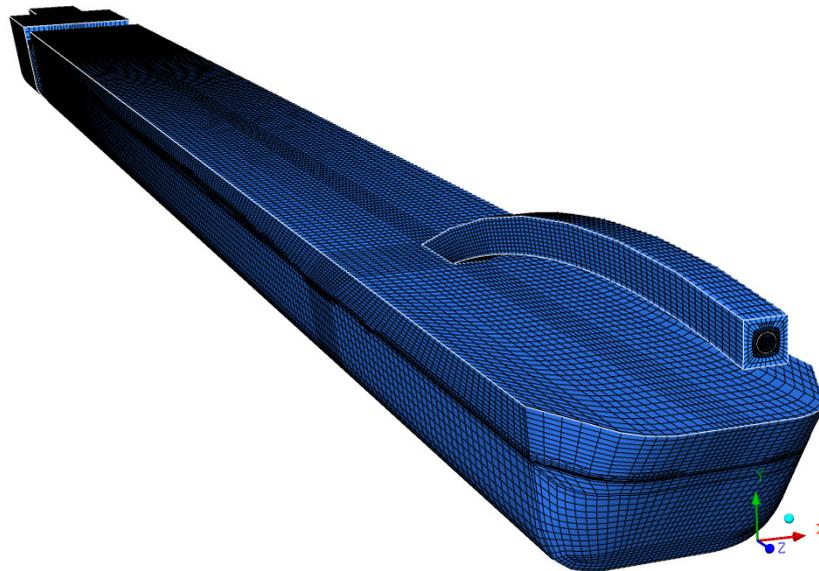


Figura 4.10. Malha hexaédrica empregada na solução do escoamento no canal de alto-forno.

4.1.9 Condições de Contorno e Iniciais

Antes de descrever as condições de contorno empregadas, é necessário esclarecer alguns detalhes da implementação do ANSYS CFX[®]. O primeiro é em relação à pressão. No simulador há várias variáveis relacionadas à pressão e que causam certa confusão àqueles que não estão familiarizados com o mesmo.

A variável p das equações de Navier-Stokes, por exemplo, pode sem problemas assumir valores negativos. Para as equações do movimento, isto não é nenhum empecilho uma vez que o que lhes interessa é o *gradiente de pressão* e não o seu valor absoluto. Assim, para que então se tenha a pressão absoluta, uma pressão de referência deve ser especificada. Considera-se aqui a pressão de referência igual à pressão atmosférica, ou seja, 1 atm.

A pressão absoluta é calculada como a soma da pressão hidrodinâmica, obtida pela solução da equação Navier-Stokes, mais a pressão de referência,

$$p_{abs} = p + p_{ref} . \quad (4.57)$$

Quando o empuxo é considerado, esta contribuição é incorporada à pressão absoluta. Neste caso,

$$p_{abs} = p + p_{ref} + \rho \mathbf{g} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ref}), \quad (4.58)$$

onde $(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ref})$ implica na diferença de altura local em relação ao sistema de referência. Além disso, quando o modelo $k-\varepsilon$ é usado, o que é o caso deste trabalho, a flutuação de velocidade deve ser ainda levada em conta e a variável pressão sofre uma modificação de acordo com⁹

$$p' = p + \frac{2}{3} \rho k. \quad (4.59)$$

Assim, para a pressão absoluta tem-se:

$$p_{abs} = p + \frac{2}{3} \rho k + p_{ref} + \rho \mathbf{g} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ref}) \quad (4.60)$$

A seguir são descritos os três tipos de condições de contorno empregadas: entrada, abertura e parede; e as condições iniciais.

- **Condição de Entrada com Velocidade Prescrita (Inlet):**

Esta condição permite apenas o influxo de massa sendo as componentes do vetor velocidade prescritas:

$$\mathbf{u}_{inlet} = u_{spec} \hat{\mathbf{i}} + v_{spec} \hat{\mathbf{j}} + w_{spec} \hat{\mathbf{k}} \quad (4.61)$$

As frações volumétricas têm seus valores prescritos na entrada com a restrição de seu somatório ser igual à unidade:

$$\begin{aligned} r_\alpha &= r_{\alpha, prescrito} \\ \sum_{\alpha=1}^{N_f} r_\alpha &= 1 \end{aligned} \quad (4.62)$$

Como o escoamento é considerado turbulento, condições de contorno adequadas devem ser especificadas, assim, a intensidade turbulenta na entrada é prescrita e os valores absolutos de k , ε , e μ_T são então computados com base no valor especificado. A intensidade turbulenta é definida como a razão entre a flutuação e o campo médio de velocidade:

$$I = \frac{u'}{u}, \quad (4.63)$$

assim, tem-se

⁹ Ver Capítulo 3, Seção 3.4.2, Equação (3.88)

$$k = \frac{3}{2} I^2 u_n^2, \quad (4.64)$$

$$\varepsilon = \rho C_\mu \frac{k^2}{\mu_T}, \quad (4.65)$$

$$\mu_T = 1000 \cdot I \mu, \quad (4.66)$$

sendo u_n a magnitude da velocidade normal à fronteira, ou seja, $u_n = \mathbf{u}_{inlet} \cdot \hat{\mathbf{n}}$. Esta condição foi aplicada ao *furo de gusa* na parede do alto-forno, a região vermelha no detalhe da Figura 4.11

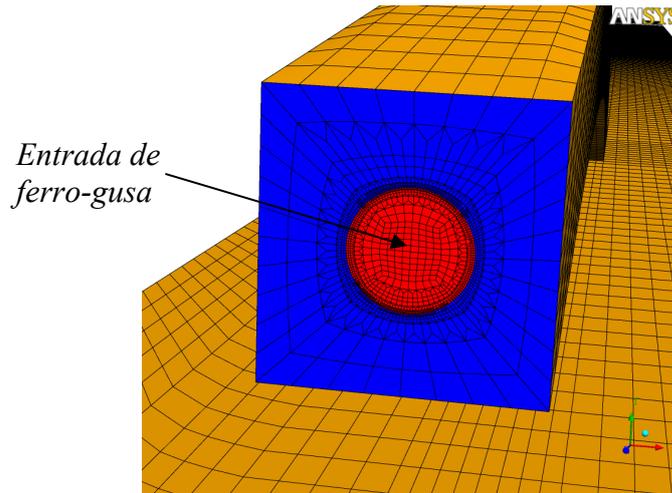


Figura 4.11. Região onde foi empregada a condição de entrada.

- **Condição de Abertura (Opening):**

Esta condição permite tanto a entrada como a saída de fluido do domínio dependendo da diferença de pressão na fronteira. É uma condição de pressão prescrita onde a direção e o módulo do vetor velocidade são partes da solução. Esta condição é preferida quando não se sabe se a condição é de entrada ou de saída. A condição é empregada no *farfield* sobre a superfície do metal e em torno do jato. Na região mostrada na Figura 4.12, apenas a pressão relativa na fronteira é especificada

$$p_{open} = p_{spec}, \quad (4.67)$$

e a magnitude da velocidade normal à fronteira, u_n , é calculado com base na variação de pressão,

$$\Delta p_{loss} = \frac{1}{2} \rho u_n^2, \quad (4.68)$$

sendo que deve ser respeitada a seguinte restrição para a pressão

$$p_{spec} \pm \frac{1}{2} \rho u_n^2 = p_{stat}, \quad (4.69)$$

onde o sinal negativo representa influxo de massa, e o positivo efluxo de massa do domínio computacional; p é a pressão hidrodinâmica do escoamento. Esta condição força o gradiente de velocidade perpendicular à fronteira a ser nulo e é mais estável, pois a direção do vetor velocidade não é imposta e sim parte da solução. Esta condição foi empregada no *farfield* do domínio.

Na saída de gusa, mostrada na Figura 4.13 entretanto, impor a direção de entrada se demonstrou mais estável, que neste caso é considerada normal à superfície.

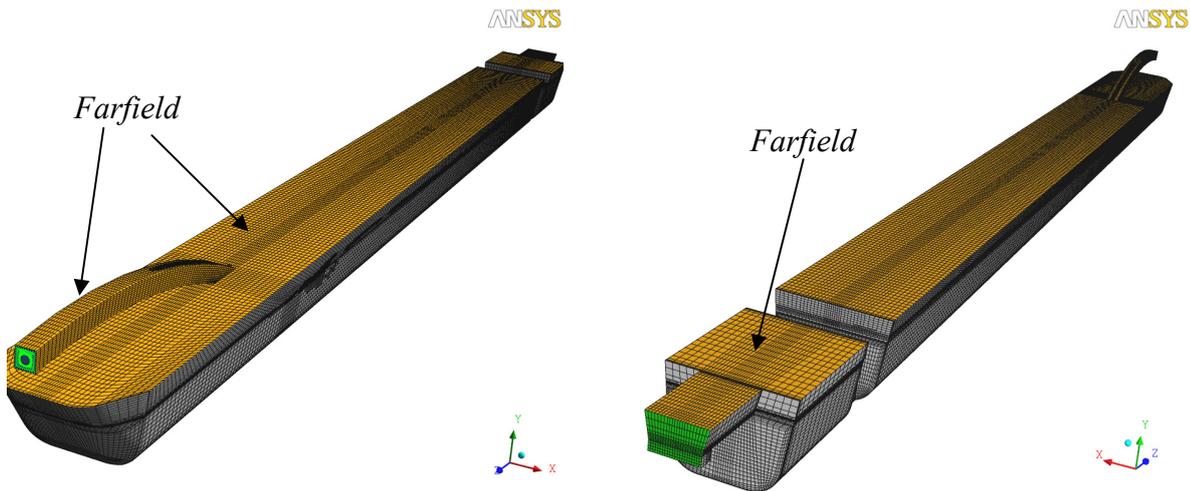


Figura 4.12. Regiões onde a condição de abertura com pressão estática prescrita é aplicada.

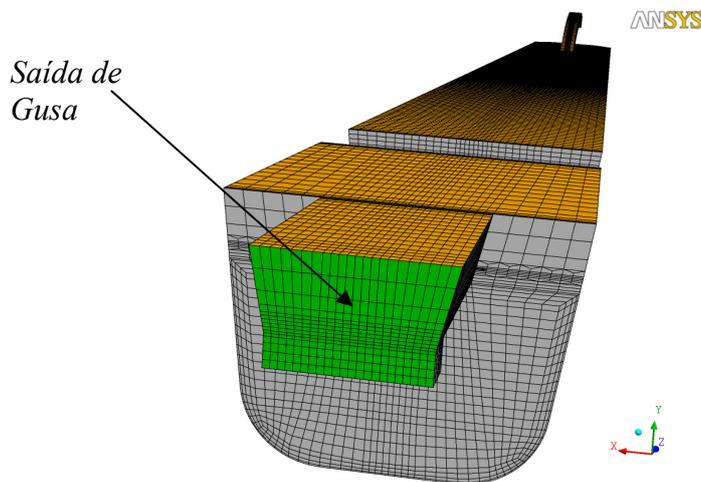


Figura 4.13. Região onde a condição de abertura com pressão estática prescrita e a direção normal do vetor velocidade imposta são empregadas.

Como esta condição permite o influxo de massa, tanto as frações volumétricas quanto as propriedades turbulentas devem ter condições de contorno, assim, para estas variáveis as condições de contorno são do mesmo tipo que às de entrada: valor prescrito para as frações volumétricas e intensidade turbulenta especificada para $k-\varepsilon$. Esta condição foi aplicada ao *farfield* e saída de gusa do canal, pois são abertos à atmosfera.

- **Condição de Parede (Wall):**

Esta condição já foi abordada em detalhes no Capítulo 3 e na Seção 3.4.4, ou seja, condição de não-deslizamento para velocidade e uso de lei de parede para turbulência. As frações volumétricas não necessitam de condições de parede. Nenhum modelo de adesão é empregado. O valor que as frações volumétricas assumem junto às paredes é parte da solução. As regiões onde a condição de parede é aplicada são: a parede do alto-forno em torno do furo de gusa; e a parede refratária do canal do alto-forno, representadas na Figura 4.14.

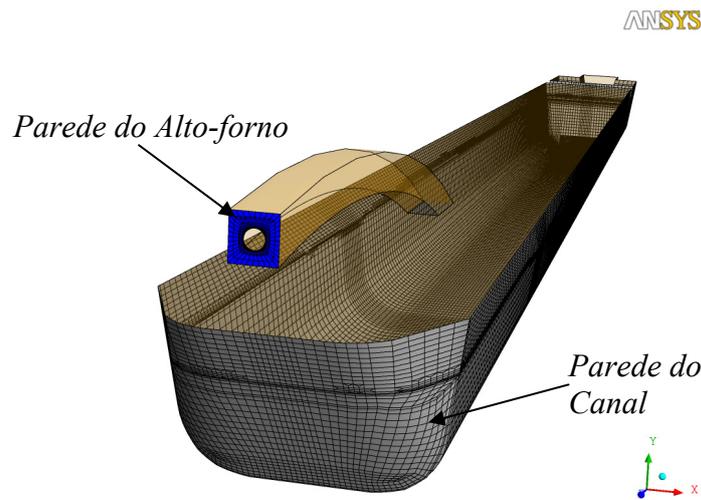


Figura 4.14. Regiões aonde se aplicou a condição de parede.

- **Condições Iniciais**

Para o campo de velocidades, a condição inicial é simples: fluido em repouso, que implica em

$$\mathbf{u}^{\circ} = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (4.70)$$

onde \mathbf{x} é o ponto pertencente ao domínio Ω . O superescrito $^{\circ}$ significa no tempo $t = 0$.

As condições iniciais para as frações volumétricas requerem certos cuidados. A inicialização de um problema de superfície livre apresenta alguns detalhes quanto à estabilidade da solução. Neste trabalho, por se tratar de uma interface gás-líquido, a razão de concentrações mássicas de cada fase é da ordem de 10^3 . A mudança brusca de propriedades físicas geralmente leva a problemas de estabilidade numérica já nas primeiras iterações, resultando quase sempre em divergência do sistema linear ou a um resultado não confiável. Isso geralmente ocorre quando se usam funções do tipo degrau para se definir os campos de fração volumétrica.

O ideal é que todas as propriedades sofram uma transição suave através da interface. Além disso, a malha deve ser o mais uniforme possível nesta região, pois qualquer diferença de posição dos nós implica em uma interceptação da função degrau do nó imediatamente vizinho ao que se pretendia. No caso de uma superfície livre em repouso, isso resultaria em uma interface rugosa, cheia de pequenos montes e vales, pois alguns nós estariam um pouco acima e outros abaixo da altura especificada.

Para se contornar este problema, primeiramente uma malha adequada deve ser gerada, e de posse desta, uma função de transição deve ser preferida à função degrau. A função de transição empregada foi a tangente hiperbólica,

$$r_{liq}^o = \left(0,5 \cdot \tanh\left(\frac{h^o - y}{\delta_i}\right) + 0,5 \right), \quad (4.71)$$

$$r_{ar}^o = 1 - r_{gusa}^o$$

sendo h^o a altura inicial; y a coordenada vertical; e δ_i a espessura de transição da interface. Esta espessura deve ser de no mínimo um espaçamento de malha de maneira a interceptar pelo menos dois nós adjacentes. Pode-se regular a transição da interface por quantos nós se deseje escolhendo-se o valor de δ_i igual a um, dois ou quantos espaçamentos de malha se achar ou for necessário. Isto é melhor compreendido observando-se a Figura 4.15. A imagem da função de transição é o intervalo $I=[0,1]$, tal como as frações volumétricas.

Outras funções podem ser usadas, como seno e cosseno, o importante é garantir a suavidade dos campos de fração volumétrica através da interface.

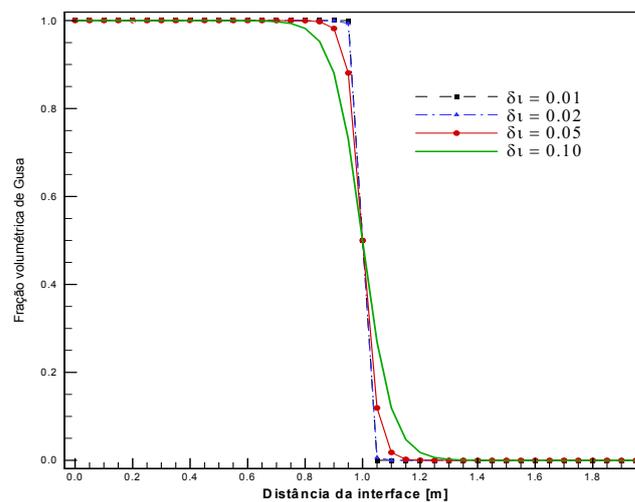


Figura 4.15. Comportamento da função de transição para várias espessuras de transição.

O campo de pressão também deve ser inicializado por garantias, considerando a contribuição hidrostática, embora após a 1ª iteração ela já seja inclusa, mesmo que a condição inicial seja de pressão zero. A inicialização é sempre aconselhável. Assim,

$$P^o = r_{liq} \rho_{liq} g (h^o - y). \quad (4.72)$$

Para efeito do cálculo da estimativa inicial do campo de pressões, o peso específico do gás foi desprezado por ser muito menor do que o do líquido.

As equações de turbulência também precisam de uma condição inicial. Em princípio, como o sistema está em repouso, pode-se dizer que o campo é nulo. Contudo, isto gera problemas nos termos de produção do modelo $k-\varepsilon$ e no cálculo da viscosidade turbulenta no tempo inicial. Esta condição inicial é numericamente instável por apresentar singularidades quando a energia cinética é nula, pois o modelo não contempla transição de regimes. O resultado é divergência nas primeiras iterações.

Para contornar isto, o ANSYS CFX[®] usa o tratamento automático, utilizando a intensidade turbulenta e o campo de velocidade, de acordo com,

$$k^o = \frac{3}{2} \left[I \cdot \max(u_s, |u^o|) \right]^2. \quad (4.73)$$

Nesta equação, u_s representa o limiar inferior para a escala de velocidade igual a 0,01 m/s. Isto evita que quando o módulo da velocidade inicial ou da estimativa inicial, u^o , for zero, a energia cinética seja zero. A intensidade turbulenta é considerada média e igual a 5% ($I=0,05$).

A taxa de dissipação então pode ser computada de acordo com

$$\varepsilon^o = \frac{C_\mu k^2}{\nu \left(\frac{\mu_T}{\mu} \right)} \quad (4.74)$$

onde ν representa a difusividade cinemática, e (μ_T/μ) a razão de viscosidade feita igual a 10.

Contudo, como a condição inicial de velocidade é nula, o limiar u_s vai ser usado como escala de velocidade e um valor para k será especificado automaticamente. Esta condição não tem nenhuma relação com a física do problema, pois não advém de nenhuma informação do escoamento. Esta abordagem se demonstrou extremamente instável.

Sendo assim, as equações para turbulência não foram consideradas ativas nos primeiros passos de tempo, ou seja, o problema foi considerado laminar. Após um certo número de passos de tempo, as equações eram ativadas e o campo turbulento calculado com base na escala de velocidade local e resultante da física que se desenvolveu. Esta abordagem se demonstrou mais robusta e sem prejuízos aos resultados, pois para cada nó há um valor de k , ε , e μ_T ao invés de um único valor para todo o domínio como seria no caso automático.

4.1.10 Força de Empuxo

Fisicamente, em um sistema em repouso, a força de empuxo surge naturalmente devido à ação das tensões normais à interface de um volume material e do peso do fluido que ocupa este volume, ou seja, isto já está implícito nas equações do movimento no termo de força de corpo e no tensor tensão, mas como as interfaces não são superfícies materiais definidas e conhecidas, esta informação *não tem onde ser computada*. Assim, um termo fonte deve ser adicionado às equações do movimento, então,

$$S_{empuxo} = (\langle \rho \rangle - \rho_{ref}) \vec{g}, \quad (4.75)$$

que determina a força de empuxo por unidade de volume. A concentração mássica de referência é um artifício que gera a força de empuxo. Esta concentração mássica de referência geralmente é a do fluido mais leve.

O uso da concentração mássica de referência tem a seguinte consequência: para um escoamento gás-líquido onde a referência é o gás, o termo de empuxo é nulo para o gás e diferente de zero para o líquido apontando na direção do vetor aceleração da gravidade. Ou seja, o líquido é empurrado para baixo, e o gás preenche o volume de controle antes ocupado pelo líquido. O inverso poderia ser feito: escolher o líquido como referência, e neste caso o gás seria empurrado para cima. Contudo o efeito físico em ambos os casos é o mesmo, apenas a questão numérica é que pode levar a uma escolha ou outra. Sendo um termo fonte, instabilidades podem surgir durante a solução e onde aplicar o “peso” do mesmo pode fazer diferença durante a estabilidade da solução do sistema linear. Mas isto é muito particular. Neste trabalho a concentração mássica de referência é considerada como a do gás.

4.1.11 Abordagem Numérica

O problema de que trata este trabalho é essencialmente transiente, contudo, a operação real na planta industrial leva cerca de 1,5 horas. Simular este período de tempo com passos de tempo da ordem de milésimos de segundo é computacionalmente proibitivo, pois seriam necessários cerca de 5,4 milhões de passos de tempo, e para cada passo de tempo pelo menos dez iterações! Mesmo em processamento paralelo, este transiente seria muito longo para se analisar com a precisão necessária

Esta dificuldade foi contornada da seguinte maneira:

1. Simula-se um certo período dos instantes iniciais para se captar o desenvolvimento do jato, sua colisão com a superfície livre, e parte da dinâmica do sistema.

2. Feito isto, a partir do último passo de tempo da simulação transiente usando-o como estimativa inicial, inicia-se uma simulação pseudo-transiente.

O passo de tempo nesta situação atua como um parâmetro de controle da solução do sistema linear, acelerando e/ou estabilizando o processo. Ao final desta simulação, tem-se uma solução equivalente ao tempo físico decorrido no falso transiente. A Figura 4.16 apresenta um resumo gráfico do procedimento.

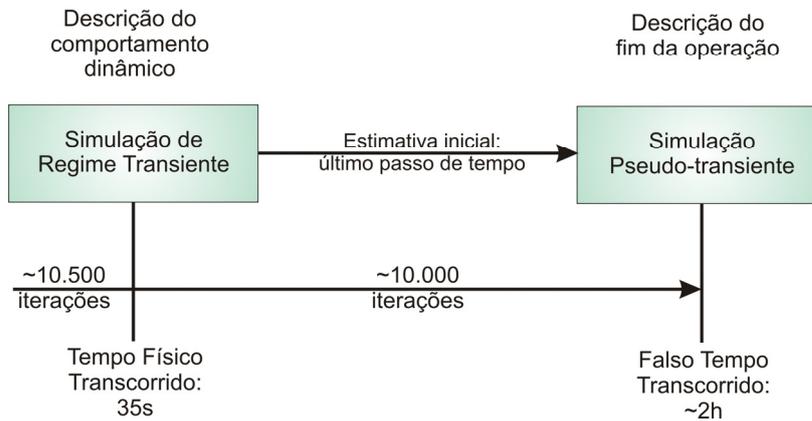


Figura 4.16. Esquema da abordagem numérica.

Na simulação pseudo-transiente, cada equação de conservação pode ter seu próprio passo de tempo independente das outras. Esta opção não foi utilizada, o passo de tempo é homogêneo visto se objetivar uma solução representativa do final da operação, e o efeito de passos de tempo diferentes sobre a solução final não poderia ser estabelecida a priori, apesar de isto até poder acelerar a convergência. Por isso se optou por evoluir todas as equações simultaneamente com o mesmo passo de tempo, garantindo que todas, ao final, estão representando campos acoplados no mesmo nível de tempo, ou falso tempo transcorrido (*false elapsed time*).

Outro detalhe diz respeito ao refinamento da interface. Para a simulação de regime transiente a posição da interface é conhecida inicialmente e a sua posição e variação no período de análise é também aproximadamente conhecida, o que permite refinar a malha nesta região. Não obstante, na simulação de regime permanente, o tempo físico de simulação é equivalente a duas horas, assim, o nível de líquido vai se modificar ao longo das iterações como um copo enchendo de água até seu extravazamento. Poder-se-ia gerar uma malha estimando-se onde seria a posição média final da interface, mas este é um dos resultados que se deseja obter.

Assim, optou-se pelo refino adaptativo de malha tendo como critério minimizar o gradiente de fração volumétrica. Este critério permite que junto à interface haja um refinamento que suavize o salto de todas as propriedades e resolva-se bem a interface sem

grandes efeitos difusivos, que, por melhor que seja a malha, sempre estão presentes. A questão é sempre tentar minimizar o possível estes efeitos e o refino adaptativo permite que a densidade da malha seja adequada para isto.

4.1.12 Refino de Malha Adaptativo

Esta seção se restringe à simulação *pseudo-transiente*, pois o refino adaptativo em regime transiente não é aplicável, pois não há como garantir a conservação das grandezas calculadas.

O refino adaptativo visa aumentar a precisão em regiões onde gradientes espaciais elevados estão presentes. O algoritmo básico é o seguinte:

1. Calcula-se o critério de adaptação para cada nó;
2. Adiciona-se um número apropriado de nós à malha pré-existente;
3. A solução antiga é então linearmente interpolada para a malha refinada.

O critério de adaptação adotado foi a variação da solução (*Solution Variation*). Caso a variação seja brusca, toma início a adaptação.

Esta adaptação quando aplicada a elementos hexaédricos gera elementos prismáticos, por isso este tipo de elemento foi apresentado na Seção 4.1.3. O processo de adaptação pode alterar para pior alguns parâmetros de malha, como razão de aspecto e ortogonalidade, o que à primeira vista parece prejudicar a convergência, contudo, como o processo minimiza os gradientes e suaviza a solução, esta região geometricamente ruim talvez não vá repercutir na convergência, ou seja, há uma compensação do efeito, ou pelo menos espera-se isso!

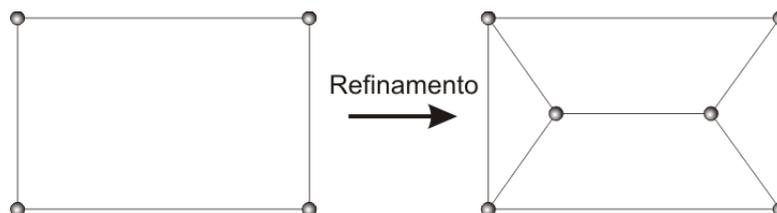


Figura 4.17. Vista lateral simplificada do esquema de refinamento de um elemento hexaédrico.

O que pode acontecer é que, após um ciclo de refinamento, haja um súbito aumento do resíduo devido à interpolação, pois esse processo não é necessariamente conservativo, não sendo por isso aplicado ao regime transiente. Após algumas iterações este efeito deve ser amortecido, caso contrário há indícios de que algo não vai bem na solução¹⁰.

¹⁰ O refino de malha adaptativo altera as escalas características do escoamento que a malha original podia captar, e perturbações que antes eram amortecidas ou mesmo filtradas, agora podem ser talvez importantes e o setup original, afinado à situação anterior, pode não ser mais adequado à nova situação, e o solver apresentar dificuldades de convergência.

Para este trabalho, o refino adaptativo aumentou de 400 mil para 750 mil o número de nós da malha em 3 níveis de adaptação, cerca de 87% de nós a mais, e não houve problemas de convergência devido a mudanças da qualidade geométrica da malha.

Um cuidado que deve ser tomado é em relação à alocação de memória, como o número de nós é geralmente aumentado¹¹ deve-se ter memória RAM suficiente para isto, e em sistemas 32 bits, o processo não pode superar os 2GB, caso contrário o sistema operacional (Windows XP SP2) o interrompe por não poder manipular esta quantidade de instruções e dados, mesmo que se tenha fisicamente mais memória disponível.

4.1.13 Passo de Tempo Adaptativo

O passo de tempo adaptativo permite que, de acordo com as condições locais do escoamento, o melhor passo de tempo possa ser usado. O critério para adaptação é o valor do número de Courant (COURANT, FRIEDRICHS e LEWY, 1967) definido para um caso unidimensional como

$$C = \frac{u\Delta t}{\Delta x}. \quad (4.76)$$

Definem-se o passo mínimo e o máximo, como os limites inferiores e superiores:

$$\Delta t_{\min} \leq \Delta t \leq \Delta t_{\max} \quad (4.77)$$

O processo inicia-se pelo limite inferior, ou por um outro passo intermediário estipulado, e se o valor RMS (Root Mean Square), ou o valor máximo (MAX) do número de Courant for menor do que um limite superior estipulado, o passo de tempo é incrementado. Isto se dá a cada iteração no tempo até que o número de Courant atinja o limite superior. Caso o número de Courant viole este limite, o passo de tempo é decrementado. O algoritmo tenta sempre usar o maior passo de tempo com menor número de Courant possível. Como o número de Courant depende também da velocidade local, o passo de tempo pode ser reduzido caso a velocidade aumente, impedindo que informação viaje mais que um espaçamento de malha durante o intervalo do passo de tempo utilizado.

Para este problema, este artifício parece o mais indicado, visto que as condições locais do escoamento são muito diferentes ao longo do domínio e no tempo, o que obrigaria a usar passos de tempo fixos muito pequenos devido a intabilidades pontuais, enquanto para o restante do domínio poder-se-ia usar um passo de tempo maior e acelerar a convergência.

¹¹ Algumas regiões podem sofrer aglomeração de elementos, o que pode compensar o refino em outras regiões e o número total de nós pode ser aproximadamente constante em cada nível de refinamento.

Para problemas de superfície livre onde há a geração de ondulações e choques entre as mesmas, esta abordagem se mostrou mais robusta e estável. Para esta simulação fixou-se como critério o valor *máximo* do número de Courant igual a 5 que se mostrou suficiente, e o passo de tempo dentro dos limites

$$0,00001s \leq \Delta t \leq 0,04s . \quad (4.78)$$

Para este problema, este valor máximo geralmente resulta num número de Courant máximo menor que cinco e um valor RMS em torno da unidade.

A cada passo de tempo deve-se iterar o sistema linear de modo a tratar as não-linearidades do sistema. O número máximo de iterações foi fixado em 15, o que se mostrou suficiente para manter os resíduos abaixo do critério. Todavia, este número de iterações é usado somente em caso de instabilidades (o que indica que algo deve ser repensado) ou nas primeiras iterações no tempo. Após isso, a tendência é convergir em apenas uma iteração e estabilizar os resíduos num certo patamar.

Para forçar uma boa convergência, o número mínimo de iterações por passo de tempo foi fixado em dois. Assim, mesmo que o resíduo da primeira iteração esteja abaixo do critério, ela vai ser reduzido ainda mais iterando uma segunda vez, evitando oscilações dos resíduos próximas do limite do critério estabelecido.

Para o pseudo-transiente, o tempo era calculado automaticamente especificando-se a escala de comprimento em 0,1m (aproximadamente o diâmetro do jato) e o fator de relaxação em 0,5 com passo de tempo máximo fixado em 5s:

$$\Delta t \leq 5,0s \quad (4.79)$$

Na simulação pseudo-transiente, o principal critério de parada foi o fechamento do balanço do fluxo de massa. Assim,

$$\text{Diferença \%} = \frac{(\sum \text{inflow} - \sum \text{outflow})}{\sum \text{inflow}} \cdot 100\% \leq 5\% . \quad (4.80)$$

A Figura 4.18 ilustra o comportamento da Equação (4.80) para a simulação de regime permanente deste trabalho.

O valor de 5% foi escolhido visto o problema mesmo em “regime permanente” ter um comportamento oscilatório. Oscilações próximas deste valor foram postuladas como aceitáveis. Mas mesmo com este critério sendo respeitado, os resíduos do sistema linear podem se manter acima do especificado, o que se verificou com esse passo de tempo. Assim, uma vez estabelecido o fluxo de massa, perto ao fim do processo iterativo, o passo de tempo máximo foi mudado para minimizar o resíduo do sistema linear:

$$\Delta t \leq 10^{-5}s \quad (4.81)$$

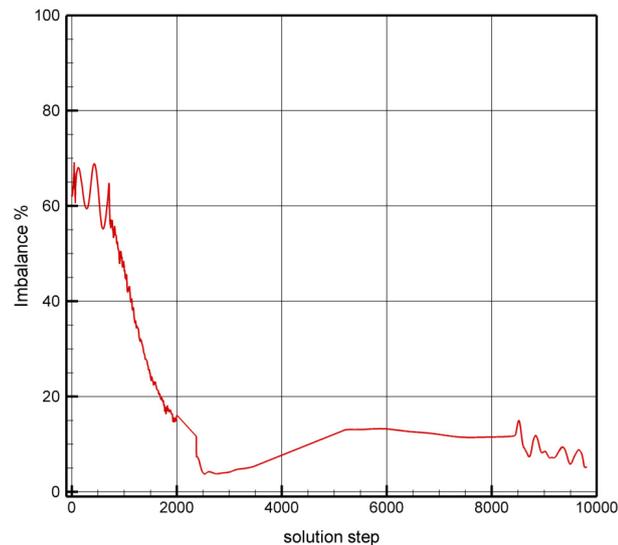


Figura 4.18. Imbalanço do fluxo de massa da simulação em regime permanente.

Estes subterfúgios permitiram uma solução estável e bem comportada com *oscilações suaves dos resíduos bem abaixo do critério estabelecido*, no caso o RMS inferior a 1.10^{-5} de todas as equações do modelo.

4.1.14 Processamento Paralelo

As malhas utilizadas variam de 400 a 750 mil nós. Para o modelo homogêneo bifásico, a malha possui oito graus de liberdade ou oito variáveis a serem determinadas: as três componentes da velocidade, pressão, fração volumétrica para as duas fases e taxa de dissipação e energia cinética turbulenta.

As equações de turbulência são resolvidas de forma segregada, o que reduz um pouco o tamanho dos sistemas lineares, mas não muito, as matrizes ainda são de tamanho repetível¹². Algumas variáveis como fração volumétrica e as demais que são funções da mesma, como curvatura, gradientes, densidade de área interfacial, etc., requerem um grau de precisão alto, pois pequenos erros de truncamento na fração volumétrica podem resultar em grandes erros no cálculo da curvatura da interface, por exemplo.

As equações de turbulência também sofrem com a simples precisão devido às propriedades físicas de mistura utilizadas, as quais são funções das frações volumétricas, assim como a definição da interface.

Devido a estes problemas e detalhes, a dupla precisão além de ser recomendada deve ser tomada não como opção, e sim como protocolo obrigatório. Isto contorna uma série de

¹² Para a malha de 400 mil nós tem-se uma matriz esparsa de cerca de 2 milhões x 2 milhões de elementos para o sistema linear principal. E para o sub-sistema das equações de turbulência: 0,8 milhões x 0,8 milhões.

problemas numéricos e evita resultados pobres e difusos, mas tem um preço: a alocação de memória é aumentada sobremaneira.

Em sistemas Windows 32 bits, onde se pode teoricamente no máximo alocar cerca de 2GB, é necessário o uso de processamento paralelo, pois processamento serial em dupla precisão facilmente supera este limite. A paralelização permite a subdivisão do domínio em partições menores, ou matematicamente: sub-matrizes, que são repassadas para os demais processadores. Cada partição é resolvida simultaneamente de forma isolada. Efetuada uma iteração, a informação então é repassada pelas fronteiras entre as partições que atuam como condições de contorno dinâmicas, permitindo a troca de informações entre os sub-sistemas pelas fronteiras. Parte destes nós de fronteira são redundantes para aumentar o acoplamento entre as partições, ou seja, há a sobreposição de regiões, *ou overlapping*, que responde por cerca de 5% do aumento de alocação de memória. A Figura 4.19 apresenta de forma bem simples o conceito de particionamento e *overlapping*.

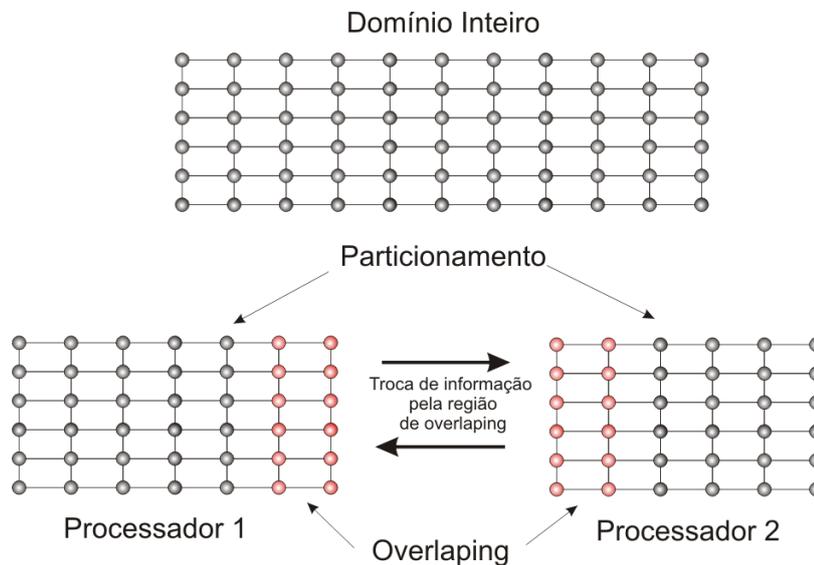


Figura 4.19. Ilustração do processo de particionamento de um domínio computacional em dois processos. Os nós destacados representam a região de *overlapping*.

Alguns cuidados devem ser observados quando se utiliza processamento paralelo. O 1º deles é quanto ao número de partições. Pode-se pensar que quanto mais processos, ou partições se tiver, mais rápido será a solução. Isto até certo ponto é verdade, mas como as partições devem trocar informações entre si, o processo de comunicação de dados também pesa no processo. Recomenda-se que não se tenha partições com menos do que 100 mil nós. Abaixo disso o tempo de comunicação pode ser tornar superior ao tempo de processamento.

Outro cuidado diz respeito a problemas de superfície livre. A direção de particionamento pode ser escolhida automaticamente, ou definida pelo usuário. A segunda opção é preferida, pois não é recomendado que uma fronteira de partição intercepte *paralelamente* a superfície livre ou alguma posição em que a mesma possa surgir devido ao

escoamento. Isto quase sempre resulta em divergência, pois nesta região as propriedades físicas mudam bruscamente. Recomenda-se que a direção de particionamento seja *perpendicular* ao plano da superfície livre.

Mesmo com este cuidado, esta região está sempre com a informação atrasada, e gradientes acentuados sobre a mesma são problemáticos. Portanto, além de se escolher a direção de particionamento adequada ao problema, deve-se usar sub-relaxações aos nós da região de *overlapping*, principalmente em problemas com propagação e colisão de ondas como os de superfície livre. Estes cuidados foram atentados neste trabalho usando-se um fator de sub-relaxação igual a 0,75.

Os computadores utilizados e suas configurações constam na Tabela 4.2. Vale citar que este cluster teve de ser criado. Apesar dos computadores estarem em uma rede, o processamento paralelo do ANSYS CFX[®] precisa ser configurado em cada uma das máquinas. A montagem e configuração deste cluster tomou um tempo considerável do trabalho.

Nem todos os computadores da Tabela 4.2. foram usados simultaneamente. Eles foram usados em combinações distintas e de forma alternada, pois os PC's não eram exclusivos para este trabalho. Outros usuários faziam uso deles o que muitas vezes obrigava a alterar uma das *slaves* durante o processamento para permitir a utilização dos demais. O único computador sempre presente em todas as simulações era o *master* Nadia. Para a simulação em regime transiente usaram-se três processadores mantendo-se pouco mais de 130 mil nós por partição. Para a simulação pseudo-transiente, usaram-se até cinco processadores mantendo-se cerca de 150 mil nós por partição.

Tabela 4.2. Arquitetura do cluster utilizado na solução numérica

Computador	Processador	Velocidade	Memória	OS
Nadia (master)	Intel Core 2 Duo	2,13GHz	3GB	Windows XP 32 bits
Marge (slave)	Intel Core 2 Duo	2,33GHz	2GB	Windows XP 32 bits
Sofia (slave)	Intel Core 2 Duo	2,33GHz	2GB	Windows XP 32 bits
Carla (slave)	Intel Core 2 Duo	2,33GHz	2GB	Windows XP 32 bits
Rebeca (slave)	Intel Pentium 4	3,0GHz	2GB	Windows XP 32 bits
Paula (slave)	Intel Pentium 4	3,0GHz	2GB	Windows XP 32 bits
Laura (slave)	Intel Pentium 4	3,0GHz	1GB	Windows XP 32 bits

CAPÍTULO

5

RESULTADOS E DISCUSSÃO**5.1 Introdução**

Este Capítulo apresenta os resultados da simulação do escoamento de ferro-gusa no canal de alto-forno, bem como a discussão sobre os mesmos. O modelo matemático utilizado é reapresentado assim como alguns dos parâmetros utilizados e já comentados no Capítulo anterior. Isto é para deixar claro ao leitor as informações necessárias para o entendimento rápido do trabalho sem a necessidade de se recorrer aos capítulos anteriores.

5.2 Hipóteses do Modelo

Para este estudo as seguintes hipóteses foram consideradas:

- escoamento gás líquido transiente;
- ambas as fases são contínuas e comportam-se como fluidos Newtonianos;
- o escoamento é isotérmico, turbulento e isocórico;
- validade da hipótese de Boussinesq;
- a lei de parede não é afetada pela presença de outra fase;
- não há transferência de massa entre as fases;
- o coeficiente de tensão superficial é considerado constante;
- e o campo de velocidade é compartilhado pelas fases (modelo homogêneo).

Antes de continuar, algumas questões devem ser discutidas e justificadas. Embora haja pelo menos três fases fluidas presentes (ferro-gusa, escória e ar), apenas o ar e o ferro-gusa são considerados. Esta assertiva facilita a análise do ponto de vista computacional e matemático, pois diminui drasticamente o tamanho do sistema linear a ser resolvido, bem como facilita a geração de malha. Pode-se questionar que a presença da escória é imprescindível para o estudo do escoamento em todos os seus detalhes, o que é verdade, contudo, não se tem a ilusão aqui de se descrever todos os detalhes deste problema complexo.

No Capítulo 2 comentou-se sobre a falta de trabalhos numéricos e experimentais sobre este problema. Assim, mesmo se tratando apenas de duas fases, isso se constitui em um grande desafio e avanço no estudo matemático e numérico desta operação, e que com certeza vai servir de base a trabalhos futuros onde a fase escória esteja presente.

Este problema possui muitas peculiaridades físicas, e mesmo assim, a principal dificuldade não é o tratamento matemático destas particularidades, e sim a falta de conhecimento e/ou dificuldade de determinar a maioria dos parâmetros físicos necessários à alimentação destes modelos, isso sem considerar ainda a mudança da morfologia do escoamento que dificulta a modelagem matemática das forças interfaciais que são dependentes tanto do regime quanto da morfologia. Uma pergunta então que surge é: quando o jato colide com a superfície livre como se dá a distribuição dos diâmetros das gotas e bolhas formadas pelo impacto? *Não se sabe, e por isso ambas as fases são consideradas contínuas.*

A consequência matemática desta hipótese é que todos os termos que dependem direta ou indiretamente de um comprimento característico, como densidade de área interfacial, curvatura e tensão superficial, por exemplo, são calculados com base no gradiente de fração volumétrica e não com base no diâmetro de partícula que é desconhecido e localmente variável, ou seja, são todos calculados dinamicamente e de acordo com a fenomenologia local.

Por não possuir equações de fechamento, o modelo homogêneo não precisa que estas questões como “Qual correlação para o coeficiente de arrasto se aplicar?” sejam respondidas, sendo por essa razão preferido o seu uso neste trabalho. Isso também permite a aplicação dos modelos de turbulência a duas equações com tratamento homogêneo sem se preocupar com termos de transferência interfacial para turbulência, o que raramente é feito no modelo de dois fluidos devido a uma série de incertezas já comentadas no Capítulo 3. O tratamento homogêneo torna os modelos a duas equações mais estáveis de se trabalhar¹³. As equações de fechamento para a interface são ainda um vasto campo aberto de estudos (TROSHKO e HASSAN, 2001b; 2001a; BARBOSA JR, 2002).

A tensão interfacial deve ainda ser considerada, pois por menor que possa ser o seu efeito devido à curvatura local, ela existe e é o único elo no modelo homogêneo que ainda relaciona uma fase a outra.

¹³ Pode-se argumentar que o modelo homogêneo não é apropriado ao problema em questão, e estar comentando algum tipo de erro em se propor este modelo. Há a consciência disto, mas erra-se menos que um modelo de dois fluidos onde não se tem equações de fechamento adequadas para as forças interfaciais e para os modelos de turbulência a duas equações em um problema onde a morfologia é tão dispare ao longo do domínio.

Desconsiderar os gradientes de temperatura também pode ser uma hipótese questionável. Mesmo assim, caso se tentasse resolver o balanço de energia, deve-se determinar com precisão o comportamento de todas as propriedades físicas com a temperatura, além da presença de uma fase gasosa que é capturada por um líquido a 1600°C, e com certeza os efeitos de expansão do gás serão importantes, mas também difíceis de se resolver e serão fortemente sentidos no termo de empuxo, um termo fonte.

Tanto o comportamento reológico Newtoniano dos fluidos como a hipótese de Boussinesq para viscosidade turbulenta são hipóteses muito boas e acredita-se que são aproximações adequadas ao problema. Contudo, a lei de parede monofásica extrapolada a este caso pode sim ser questionada, mas, na ausência de algo melhor, é a única alternativa disponível.

Embora o sistema seja reativo, não se tem documentado exatamente como ele o é, nem como as diferentes espécies químicas presentes se difundem e reagem. Assim, a transferência de massa e reações químicas são desprezadas, e desta forma, sem transferência de massa nem gradientes térmicos, o coeficiente de tensão superficial pode ser considerado constante. A consequência direta é a ausência do efeito Marangoni que, como descrito no Capítulo 2, tem uma grande importância do processo de desgaste (MUKAI, 1998), contudo, como tem-se escoamento, é bem provável que o efeito da advecção supere o efeito Marangoni.

Todas estas hipóteses podem ser questionadas por estarem muito aquém da realidade do problema e muitos efeitos importantes serem suprimidos por isso, mas, mesmo com todas estas simplificações, tem-se ainda um escoamento bifásico, transiente, turbulento com superfície livre e jato aberto de um metal líquido para se resolver, o que é por si só muito difícil.

As demais características, como mudança de fase, reação química, balanço de energia, convecção natural, radiação, escoamento de partículas sólidas, escória, interação termo-fluido-estrutural, efeito Marangoni, etc., são demasiado complexas para serem tratadas em um único trabalho simultaneamente. Mesmo modelando, o modelo precisa ser resolvido, e uma série de parâmetros físicos seriam incertos e imprecisos. Este trabalho então, tenta dar o seu quinhão de contribuição descrevendo a fluido dinâmica do escoamento de ferro-gusa no canal de alto-forno da forma mais simples sem com isso perder o foco da realidade física do problema. Esta é uma primeira abordagem a um tema praticamente não estudado com os requintes de engenharia de alto nível, e praticamente não documentado.

5.3 O Modelo Matemático

O modelo matemático utilizado, como já comentado, foi o modelo homogêneo deduzido no Capítulo 3. O modelo de turbulência usado foi o modelo $k-\varepsilon$ (JONES e LAUNDER, 1972; 1973; LAUNDER e SPALDING, 1974; WILCOX, 1994) com uso de lei de parede logarítmica monofásica, também já deduzidos e discutidos.

5.3.1 Conservação da Massa

As equações físicas de conservação da massa são mantidas como no modelo de dois-fluidos conservando o termo transiente. Isto permite, como discutido no Capítulo 4, o acoplamento das frações volumétricas ao campo de velocidade na matriz de coeficientes. Assim, *sem transferência de massa entre as fases*, a conservação da massa para cada fase é dada por

$$\frac{\partial (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \mathbf{u} \rangle) = 0, \quad (5.1)$$

com a conservação do volume dada por

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} r_\alpha = 1. \quad (5.2)$$

5.3.2 Conservação da Quantidade de Movimento

Os campos de velocidade das fases são considerados iguais e representados por

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 = \mathbf{u} \quad (5.3)$$

Deste modo, o somatório das equações físicas de conservação de quantidade de movimento resulta em uma única equação de transporte com propriedades físicas variáveis de acordo com a fração volumétrica de cada fase. Assim, para a quantidade de movimento tem-se,

$$\frac{\partial (\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle)}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle \otimes \langle \mathbf{u} \rangle) = \nabla \cdot (\mu_{eff} \langle \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \rangle) - \nabla \langle p \rangle + (\langle \rho \rangle - \rho_{ref}) \mathbf{g} + \mathbf{m}_i^\sigma \quad (5.4)$$

5.3.3 Turbulência

$$\frac{\partial (\langle \rho \rangle k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle k) = \nabla \cdot \left[\left(\langle \mu \rangle + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + (P_k - \langle \rho \rangle \varepsilon), \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial(\langle \rho \rangle \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \langle \mathbf{u} \rangle \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\langle \mu \rangle + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \langle \rho \rangle \varepsilon), \quad (5.6)$$

com $P_k = 2\mu_T \langle \mathbf{D} \rangle : \nabla \langle \mathbf{u} \rangle$. A viscosidade turbulenta é calculada de acordo com

$$\mu_T = C_\mu \langle \rho \rangle \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (5.7)$$

A Tabela 5.1 apresenta os valores das constantes utilizadas no modelo $k-\varepsilon$.

Tabela 5.1. Valores das constantes utilizadas no modelo $k-\varepsilon$.

C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	σ_k	σ_ε
0,09	1,44	1,92	1,0	1,3

Fonte: Launder e Spalding (1974).

5.3.4 Propriedades de Mistura

Os fluidos, ar e ferro-gusa, são matematicamente equivalentes a um único material com propriedades físicas variáveis calculadas da seguinte maneira:

$$\langle \rho \rangle = \sum_{\alpha=1}^{N_f} r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle, \quad (5.8)$$

$$\langle \mu \rangle = \sum_{\alpha=1}^{N_p} r_\alpha \langle \mu_\alpha \rangle, \quad (5.9)$$

$$\mu_{eff} = \langle \mu \rangle + \mu_T. \quad (5.10)$$

5.3.5 Tensão Superficial

De acordo com a condição de salto (Equação (3.35)), as forças agindo sobre a interface devem ser equilibradas pela tensão superficial, assim, aplicou-se um modelo de força contínua proposto por Brackbill Kothe e Zemach (1992). Para um coeficiente de tensão superficial constante tem-se:

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} \mathbf{M}_\alpha = \mathbf{m}_i^\sigma = (-\sigma_{\alpha\beta} \kappa_{\alpha\beta} \hat{\mathbf{n}}_{\alpha\beta}) \delta_{\alpha\beta}, \quad (5.11)$$

sendo a curvatura da interface, $\kappa_{\alpha\beta}$, calculada por

$$\kappa_{\alpha\beta} = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}_{\alpha\beta}. \quad (5.12)$$

O vetor normal unitário à interface é calculado com base no gradiente da fração volumétrica normalizado,

$$\hat{\mathbf{n}}_{\alpha\beta} = \frac{\mathbf{n}_{\alpha\beta}}{|\mathbf{n}_{\alpha\beta}|} \equiv \frac{\nabla r_\alpha}{|\nabla r_\alpha|}. \quad (5.13)$$

A função delta de interface, $\delta_{\alpha\beta}$, evita descontinuidades e eventuais problemas numéricos. Portanto,

$$\delta_{\alpha\beta} = |\nabla r_{\alpha}|. \quad (5.14)$$

5.3.6 Condições de Contorno

As condições de contorno já foram abordadas e discutidas no Capítulo 4. A Tabela 5.2 apresenta os valores utilizados nas condições de contorno e os locais de aplicação das mesmas. A velocidade de entrada é de cerca de 7,5 metros por segundo com 10° de inclinação para cima. As componentes de velocidade da Tabela 5.2 são definidas em relação ao *sistema de referência local do domínio*, que pode ser visto na Figura 5.1 no canto inferior direito.

Tabela 5.2. Valores prescritos para as condições de contorno utilizadas.

Local	Tipo	Condição
		$\langle \mathbf{u} \rangle_{in} = [0, 0\hat{\mathbf{i}} + 7,5 \sin(10^\circ)\hat{\mathbf{j}} - 7,5 \cos(10^\circ)\hat{\mathbf{k}}] \text{ m/s}$
Furo de Gusa	Entrada (inlet)	$r_{gusa} = 1$ $r_{ar} = 0$ $I = 5\%$
Parede do Canal e do Alto-Forno	Parede (wall)	No-slip: $\langle \mathbf{u} \rangle = 0 \text{ m/s}$ e lei de parede para k e ε
		$p_{static} = 0 \text{ Pa}$
Saída de Gusa	Abertura (opening) Opening Pressure and Direction	$r_{gusa} = 0$ $r_{ar} = 1$ $I = 1\%$
		Velocidade normal à fronteira
		$p_{static} = 0 \text{ Pa}$
Farfield	Abertura (opening) Static Pressure for Entrainment	$r_{gusa} = 0$ $r_{ar} = 1$ $I = 10\%$

A intensidade turbulenta, I , da entrada foi estabelecida como média, enquanto a de todo o *farfield* como alta. *Estes valores foram os que se demonstraram estáveis. Níveis diferentes de intensidade turbulenta não convergiram.*

Um detalhe ainda não comentado diz respeito à saída de gusa. Tomou-se o cuidado de manter um degrau de descida para que todo o metal escoasse somente para fora e para baixo, como uma pequena cachoeira. A Figura 5.1 ilustra uma secção longitudinal do domínio assinalando o degrau na saída de gusa.

Outra observação: os valores de fração volumétrica prescritos nas condições de abertura são usados quando houver influxo de massa para o domínio. Eles não interferem no que sai dele mas sim no que entra, portanto, as frações de gusa são sempre iguais a zero para evitar que ferro-gusa líquido adentre ao domínio pelo *farfield*. Todavia, um valor mínimo de fração deve ser prescrito no domínio para se evitar singularidades, este valor deve ser o mais próximo de zero quanto possível. Por *default*, usa-se 1.10^{-5} , contudo este valor em dupla precisão é grande e frente à área do *farfield* (cerca de 24m^2), caso haja influxo, uma quantidade apreciável de massa vai entrar pelo mesmo. O valor de 1.10^{-15} foi fixado como valor mínimo de fração. Este valor se sobrepõe às condições de contorno iguais a zero para fração. Então, há uma parcela muito pequena de massa ferro gusa que atravessa o *farfield* nos dois sentidos.

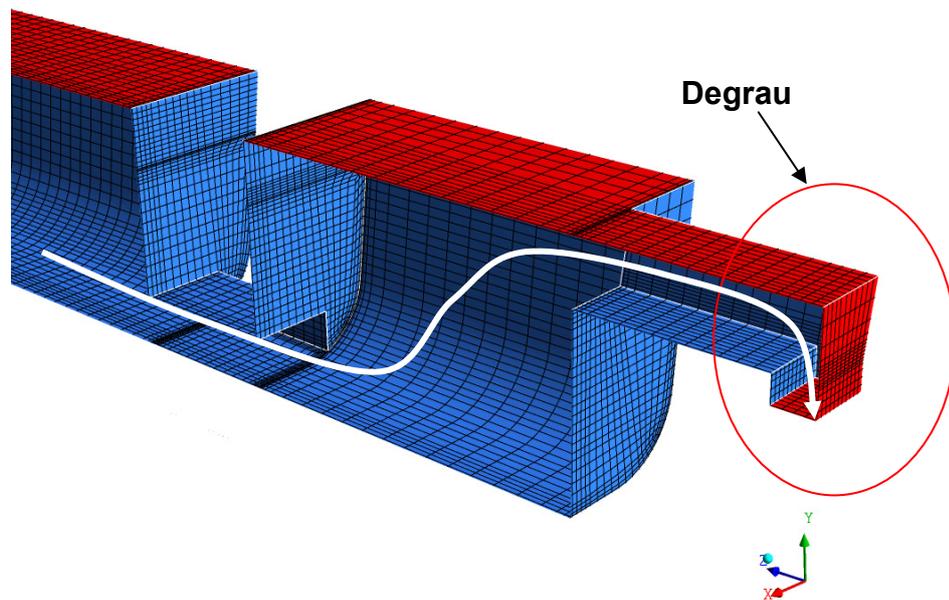


Figura 5.1. Detalhe do degrau na saída de gusa.

5.3.7 Condições Iniciais

As condições iniciais são exatamente as descritas no Capítulo 4, sendo a fração volumétrica descrita pela função suavizadora, Equação (4.71), e o perfil de pressão pela Equação (4.72). A altura inicial h^o é igual a 1,07m em relação ao sistema de referência local.

A espessura da transição, δ_i , foi fixada em 0,01m. Não são necessárias condições iniciais para o modelo de turbulência visto este não ser ativado no início da simulação.

Para o cálculo da pressão absoluta, a pressão de referência foi fixada em 1atm.

5.3.8 Propriedades Físicas

A Tabela 5.3 apresenta as propriedades físicas empregadas para os fluidos analisados. A fase líquida é composta por ferro-gusa líquido e ar atmosférico a 25°C. A concentração mássica e viscosidade do gusa são tomadas em relação ao metal líquido a 1600°C, enquanto o ar está a 25°C. Esta disparidade tem dois motivos: o primeiro é que a razão entre as propriedades, que já é grande, aumentaria muito, pelo menos em dez vezes, de 10^3 para 10^4 , e isto numericamente é um problema. Mas o modelo matemático proposto é indiferente a estas questões. Outra é que dos poucos artigos disponíveis para comparação, os fluidos de trabalho são sempre a água e o ar em condições ambientes, que mantém aproximadamente a mesma razão de concentrações mássicas: 10^3 . Entretanto, uma vez provada a eficiência do modelo, pode-se facilmente alterar estes valores e talvez até mesmo considerar o escoamento compressível em análises futuras.

Tabela 5.3. Propriedades físicas dos fluidos

ρ_{gusa}	ρ_{ar}	μ_{gusa}	μ_{ar}	$\sigma_{\alpha\beta}$
7000 kg/m ³	1,185 kg/m ³	$5,0 \cdot 10^{-3}$ Pa.s	$1,83 \cdot 10^{-5}$ Pa.s	1,35 N/m

5.4 Resultados e Discussão

5.4.1 Comparações com a Literatura

Embora em termos práticos 35s representem uma pequena fração do tempo total da operação que leva pelo menos 1,5h, ela demanda um esforço computacional considerável: cerca de 3 meses em três partições no cluster, viz. Tabela 4.2. Já a pseudo-transiente demandou cerca de 1,5 meses em cinco partições. Ambas são computacionalmente custosas.

O passo seguinte a qualquer simulação é a validação dos resultados obtidos. E, como argumentado no início deste trabalho, a revisão da literatura demonstrou a escassez de resultados e os que estão disponíveis não são muito claros quanto aos procedimentos e alguns parâmetros, o que impede a sua reprodução fidedigna. Assim, o que se pode fazer por falta total de opção é comparar qualitativamente os resultados com problemas semelhantes, verificando se as mesmas tendências e comportamentos são observados. Isto já indica se os

resultados são ou não fisicamente coerentes. Outra abordagem conjunta é a comparação do escoamento simulado com os efeitos observados na própria planta industrial, ou seja, o perfil de desgaste da parede do canal.

Na Figura 5.2 apresentam-se alguns dos resultados de Gondolf, Randal e Lange (2001). Este problema no entanto é monofásico (uma mistura de gusa e escória) e em regime permanente sem a superfície livre. A região onde seria a interface é uma parede que delimita o escoamento.

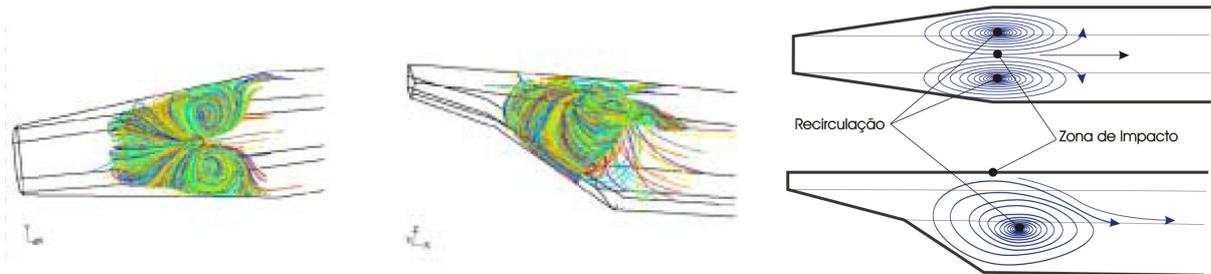


Figura 5.2. Linhas de corrente observadas na zona de impacto no trabalho de Gondolf, Randal e Lange (2001). À extrema direita, representação esquemática dos resultados.

Já na Figura 5.3 mostram-se as linhas de corrente obtidas neste trabalho com a solução do modelo proposto. As linhas vermelhas centrais são as linhas de corrente do jato. Em vermelho $u \sim 7.5\text{m/s}$ e em azul marinho $u \sim 0,1\text{m/s}$. Em cinza claro tem-se a representação da interface com uma iso-superfície de fração volumétrica de gusa igual a 0,99.

Prontamente nota-se uma diferença entre os resultados. Os de Gondolf, Randal e Lange se apresentam de forma simétrica ao plano central, apesar de não usarem simetria, enquanto o deste trabalho apresenta oscilações transversais das regiões de recirculação na zona de impacto. Este comportamento segue por toda a simulação com um período de aproximadamente 5s.

Os resultados de Gondolf, Randal e Lange por se tratarem de uma simulação em regime permanente, não podem apresentar a mesma oscilação, representando, pois, o comportamento médio temporal do escoamento nesta região, tal qual o escoamento turbulento em torno de um cilindro. Este é um bom exemplo: em regime permanente duas grandes zonas de recirculação simétricas atrás do cilindro são obtidas, enquanto em regime transiente, observam-se esteiras de von Kármán.

Diante deste comportamento, espera-se que, na média, duas grandes zonas de recirculação não ser observadas nas laterais do ponto de impacto, como aparece na Figura 5.3 **b**, mas não necessariamente simétricas.

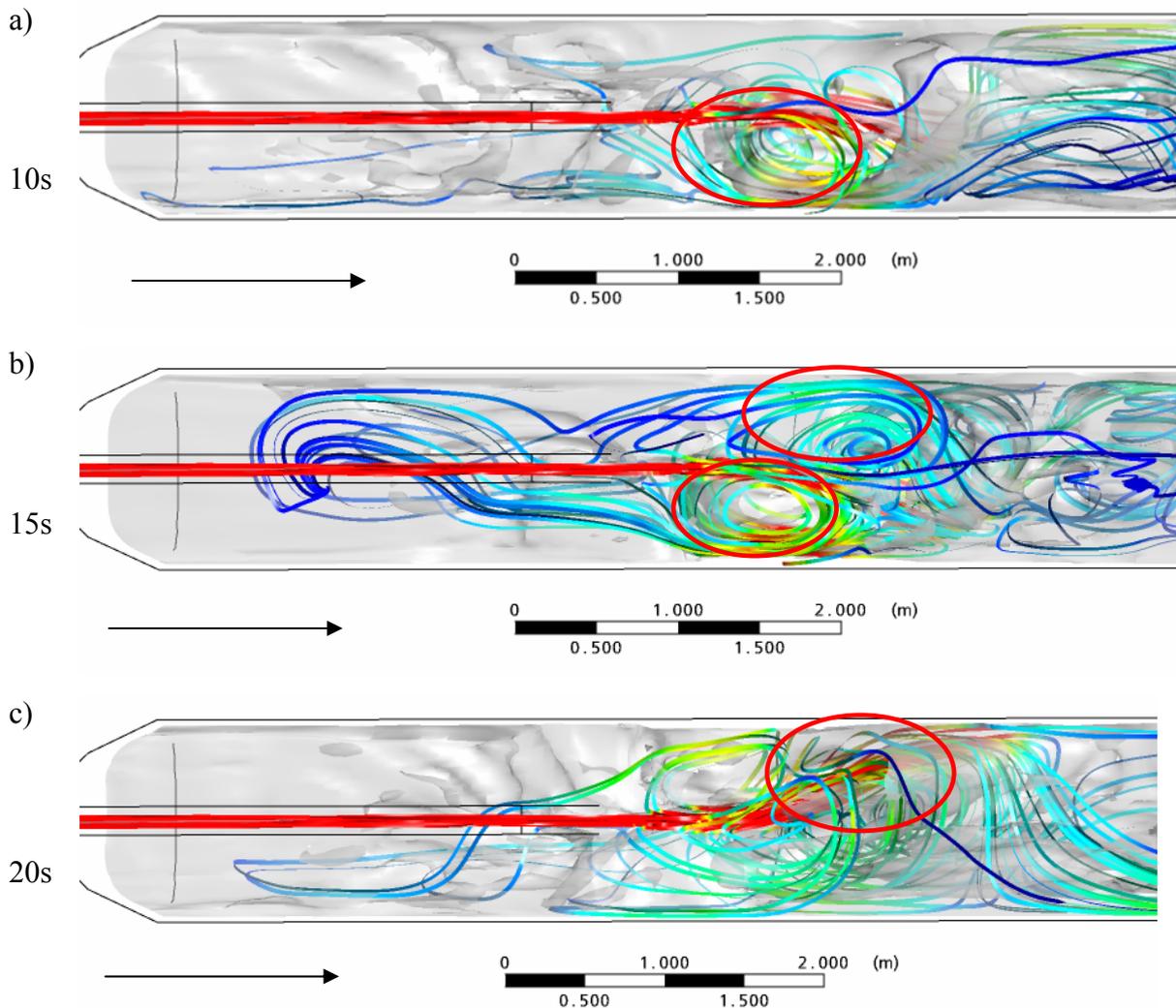


Figura 5.3. Vista superior da zona de impacto. Comportamento vorticoso e oscilatório das linhas de corrente na direção transversal à direção principal do escoamento, indicado pela seta.

Para ir além da especulação e testar esta hipótese, a mesma abordagem do trabalho de Gondolf Randal e Lange foi aplicada, ou seja: modelo monofásico sem superfície livre com área de impacto definida e com velocidade e ângulo prescritos em regime permanente. As equações usadas são a de conservação de quantidade de movimento, e as do modelo $k-\varepsilon$ locais, definidas pelas Equações (3.30), (3.105) e (3.106), respectivamente. Os resultados constam na Figura 5.4. A região vermelha indica a zona de mergulho do jato com velocidade e ângulo prescritos. As geometrias são diferentes, mas os resultados são qualitativamente os mesmos e apresentam o mesmo comportamento simétrico.

O motivo principal das oscilações é a colisão de ondas dentro do canal. Assim que o jato colide com a superfície livre quiescente de ferro-gusa, uma onda se propaga na direção principal do escoamento até colidir com a parede do escumador à frente, que então a reflete de volta. A colisão do jato induz a formação de ondas na superfície livre, e o que se segue é a sobreposição de ondas geradas pela região de impacto e as refletidas pelas paredes do canal,

induzindo um comportamento oscilatório do jato na zona de impacto que varre as paredes do canal de forma transversal à direção principal do escoamento e modifica as zonas de recirculação laterais. E como o atuador da oscilação, o jato, é contínuo em sua perturbação da superfície e o domínio tem uma dimensão finita com paredes que refletem toda e qualquer perturbação, este processo acaba por encontrar uma espécie de frequência natural de oscilação: os 5s.

Como no trabalho de Gondolf, Randal e Lange a superfície é uma parede, este efeito nunca será obtido por sua abordagem, mas mesmo assim, na média se tem, nos dois casos, duas grandes zonas de recirculação laterais no ponto de impacto.

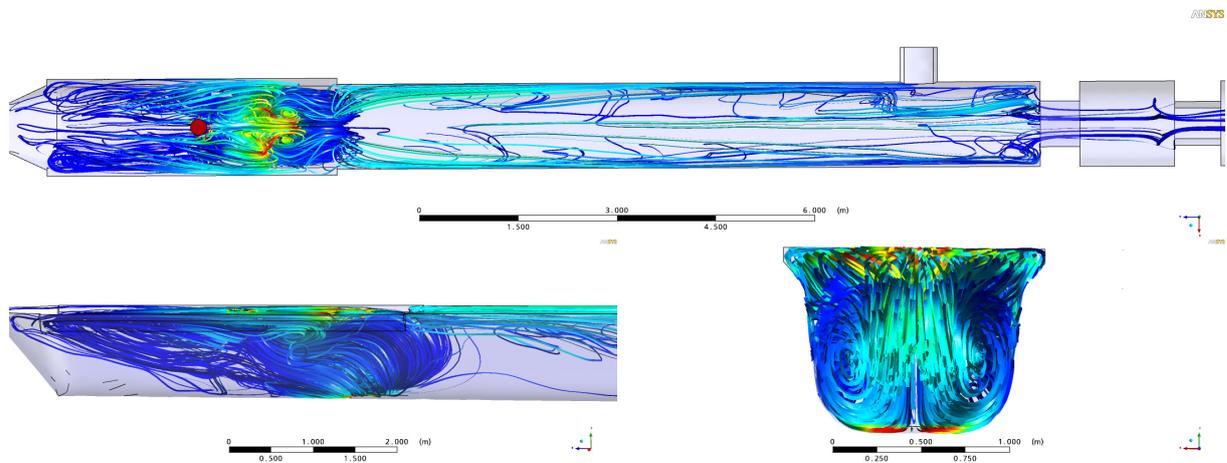


Figura 5.4. Linhas de corrente obtidas com modelo monofásico e sem considerar o jato e a superfície livre.

Estas mesmas zonas de recirculação estão também presentes em um trabalho proposto por Luomala *et al.* (2001) que utilizaram a mesma abordagem. Na Figura 5.5 são mostradas estas recirculações para algumas geometrias distintas usadas pelos autores e, abaixo na mesma figura, uma ilustração qualitativa de como as zonas de recirculação se comportam. Novamente, estas são essencialmente simétricas, como no trabalho de Gondolf, Randal e Lange.

Já na Figura 5.6 tem-se mais uma vez o caso monofásico simulado para demonstrar como esta abordagem gera qualitativamente os mesmos resultados simétricos, independentemente das condições de operação, pois elas são distintas nos três trabalhos. Os campos vetoriais nos três planos são simétricos em relação à linha de simetria de cada um.

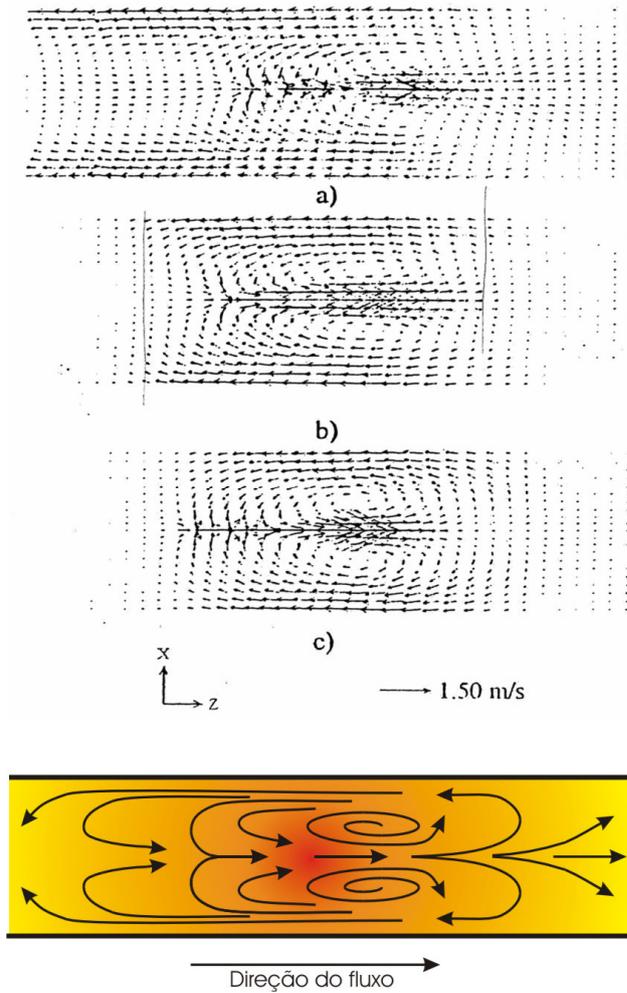


Figura 5.5. Campo de velocidade em três distintas situações e representação esquemática do comportamento do escoamento na zona crítica: **a)** Canal Normal, **b)** Canal mais profundo, **c)** Com modificadores de fluxo. Reproduzido de Luomala *et al.* (2001).

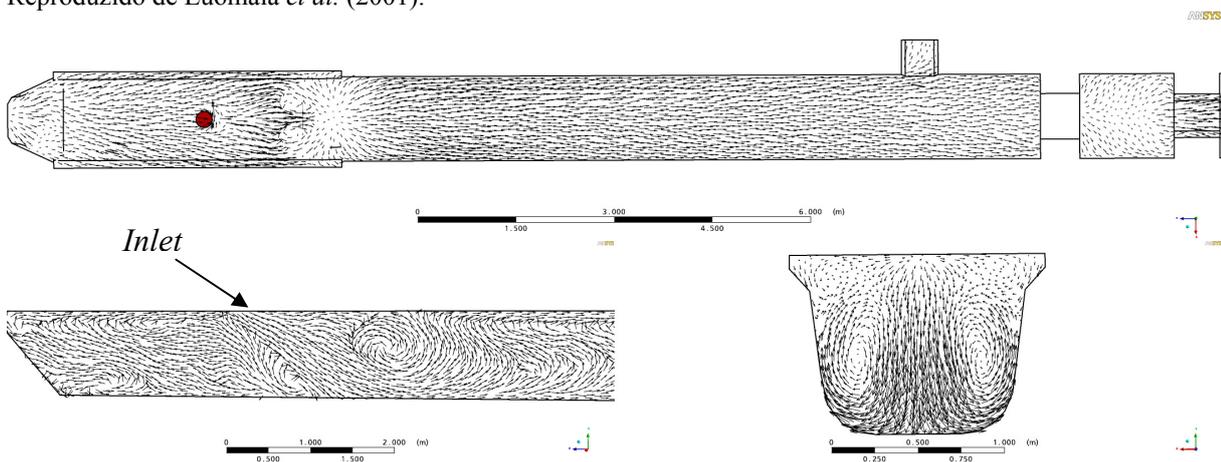


Figura 5.6. Campo vetorial do caso monofásico amostrados na superfície, no plano central e transversal.

Com o modelo proposto neste trabalho observa-se um comportamento bem distinto da abordagem monofásica. Na Figura 5.7 o campo vetorial de velocidade superficial de ferro-gusa obtido é mostrado no plano $Y=1,00\text{m}$, cerca de 7cm abaixo da interface inicial

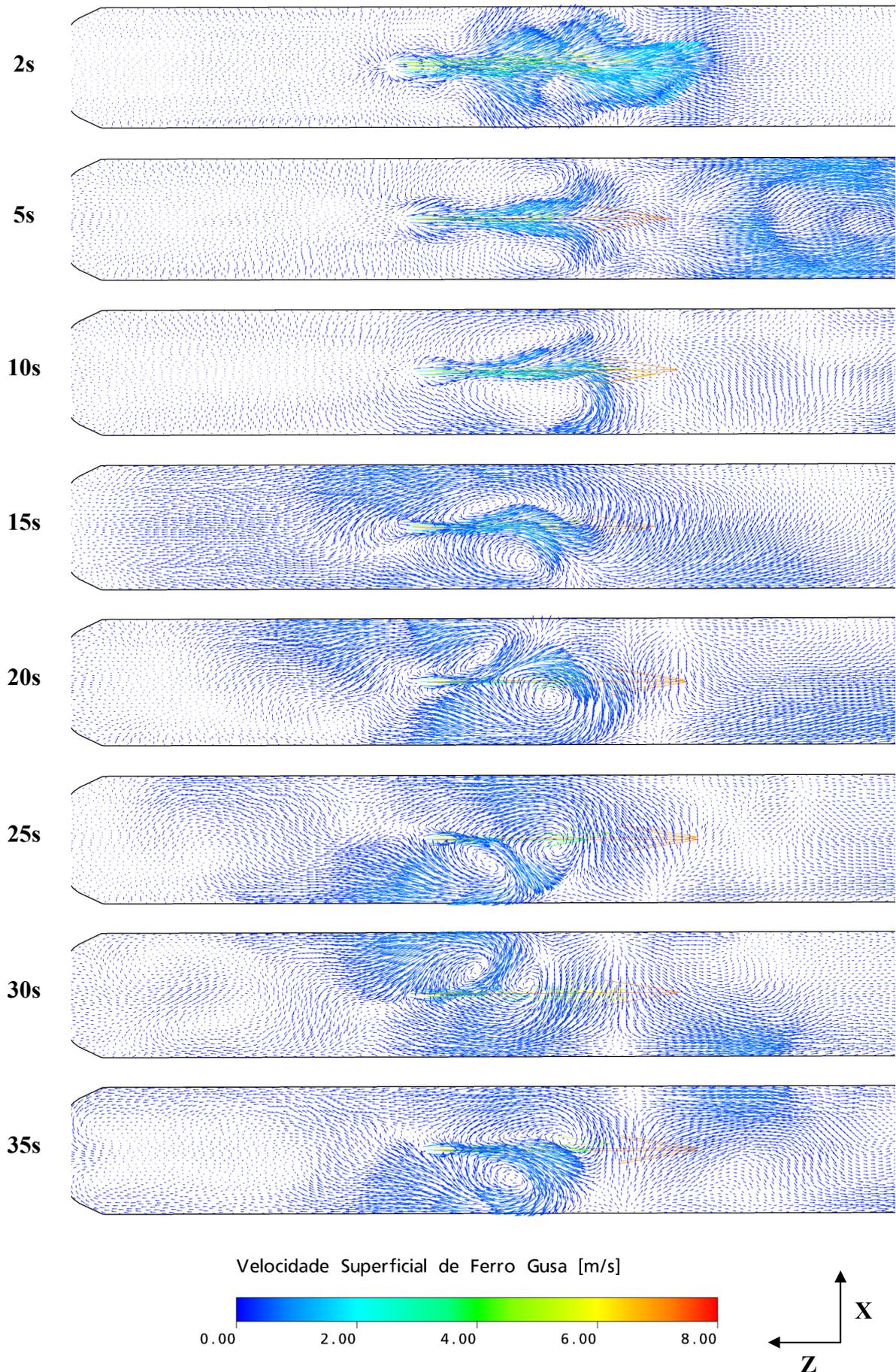


Figura 5.7. Campo vetorial de velocidade superficial de gusa no plano $Y=1,00\text{m}$ em vários instantes de tempo.

Observa-se que nos primeiros instantes, entre 5 e 10 segundos, há uma propagação de uma onda e o escoamento apresenta simetria e certa similaridade com os resultados de Luomala e até mesmo aos de Gondolf, Randal e Lange. Mas após a reflexão das oscilações da interface, a oscilação transversal das recirculações começa a ser notada. Percebe-se também que a cada 5s aproximadamente o vórtice principal muda de lado bem como as magnitudes da velocidade junto às paredes laterais, onde, tal como nos resultados de Luomala *et al.*, o escoamento é acelerado e reverso em relação à direção principal do escoamento com velocidades de magnitude relativa consideráveis.

Esta diferença nos resultados obtidos pelas duas abordagens afeta todos os campos das propriedades do escoamento como pressão, tensão de cisalhamento, etc., e as que são advectadas por ele como espécies químicas, por exemplo. A abordagem monofásica embora rápida e útil em certa medida, não pode descrever acuradamente o comportamento fluido dinâmico do sistema, pois mascara fenômenos importantes, enquanto a multifásica, considerando a dinâmica da superfície livre, não apresenta simetria sendo de caráter oscilatório e, portanto, transiente em sua essência.

Este caráter transiente torna difícil a obtenção de uma solução de regime permanente, e a abordagem numérica proposta no Capítulo 4 se mostrou adequada para se analisar tempos muito longos sem ter que se simular todo o período de operação. Além de tudo, este comportamento oscilatório ainda não foi descrito na literatura, mesmo nos trabalhos experimentais, sendo que isto era de se esperar pois basta se encher um copo d'água para se observar que a interface não é estática, pelo contrário sua dinâmica é bem complexa.

A colisão do jato com a superfície líquida se dá em aproximadamente 0,6s a cerca de 3,5m do furo de gusa. A Figura 5.8a apresenta a magnitude da velocidade superficial de gusa sob o ponto de impacto no ponto P1(0,0; 14,5; 1,0)[m]. Neste ponto, a velocidade sobe rapidamente até 7,62 m/s e aí se mantém oscilando entorno deste patamar. O instante exato do impacto pode ser visto no detalhe.

A mesma amostragem realizada a 1m à frente da anterior, ponto P2(0,0; 13,5; 1,0)[m], Figura 5.8b, apresenta um comportamento bem distinto. Há um aumento súbito na intensidade do sinal seguido por uma rápida atenuação. Após cerca de 3,3s, a velocidade cai para aproximadamente 0,5m/s apresentando um comportamento oscilatório em torno deste valor. Estas magnitudes são da mesma ordem de grandeza dos resultados de Luomala *et al.* (2001), Gondolf, Randal e Lange (2001) e He *et al.* (2002a).

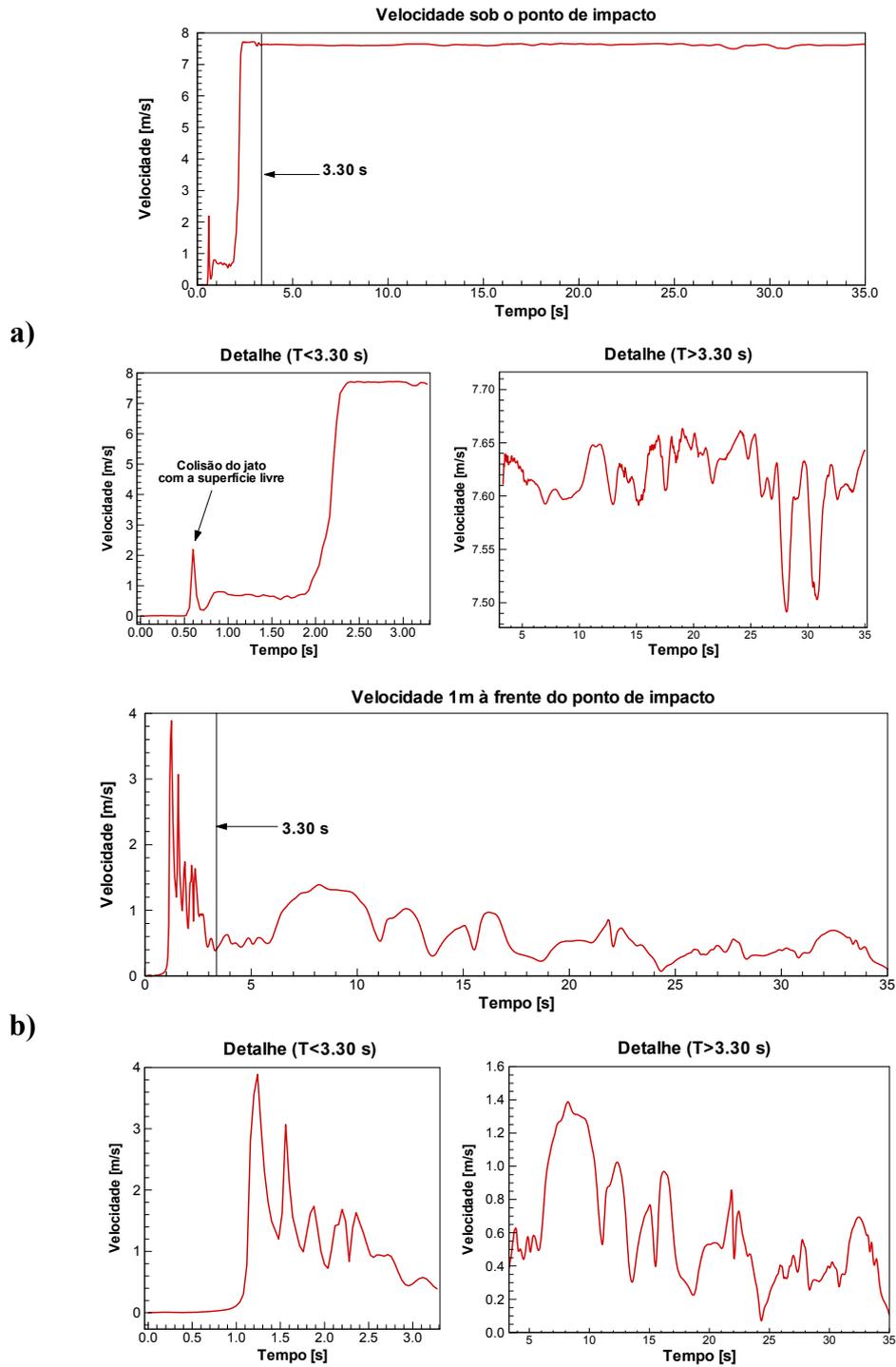


Figura 5.8. Magnitude da velocidade superficial de gusa. Em **a** sob o ponto de impacto do jato (3,0m do furo de gusa), e **b** 1m à frente do ponto de impacto (4,5m do furo de gusa), ambos em Y=1,00m sobre o plano de simetria.

A distância do ponto de impacto, 3,5m, e a trajetória obtida estão em concordância com o que prevê a trajetória analítica do jato dada pela Equação (5.15) (STEVENSON et al., 2005).

$$y = y^o + z \cdot \tan \theta - \frac{g \cdot z^2}{2 \cdot (V \cos \theta)^2} \quad (5.15)$$

Na Figura 5.9 compara-se a trajetória prevista pela Equação (5.15) e a obtida com a simulação. Percebe-se que há uma boa concordância entre as trajetórias. *Isto só foi conseguido após o refino de malha adequado da região do jato.*

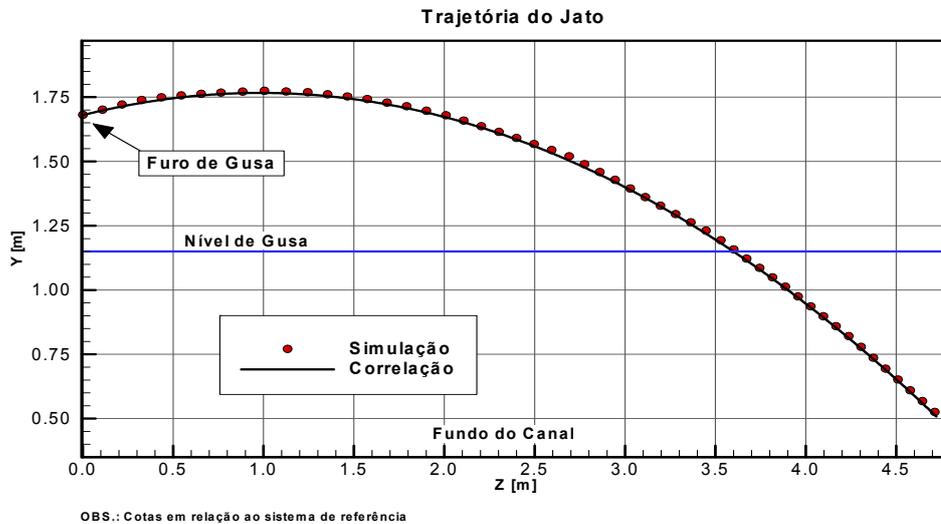


Figura 5.9. Comparação da trajetória do jato analítica (linha contínua) e a obtida neste trabalho (círculos cheios).

A Figura 5.10 compara os resultados experimentais de Begnis, Brandaleze e Topolevszy (2005) com os obtidos aqui numericamente. O mesmo fenômeno ocorre nos dois casos, apesar de serem canais com características geométricas e operacionais bem distintas. A região de eclosão de ar é similar nos dois resultados. Nos resultados obtidos neste trabalho, grande parte do ar eclode pouco mais de 1m à frente do ponto de impacto onde há uma grande oscilação da interface junto á parede, até uns 2m à frente do ponto de impacto, ou seja, na zona de mistura. Comparativamente, poucas bolhas estão presentes além desta zona, pois toda e qualquer bolha capturada, além de ser carregada pelo líquido, sofre os efeitos da força de empuxo e o balanço entre estes dois efeitos é que vai determinar o tempo de residência da bolha dentro do metal. As bolhas que são carregadas além desta distância ficam concentradas mais ao centro e eclodem mais à frente. No trabalho de Begnis, Brandaleze e Topolevszy (2005) o fluxo reverso também é observado. As estruturas sob a superfície são bolsões de ar capturados pelo jato. Estes bolsões se degeneram em bolhas de menor tamanho emergindo pouco mais de 1m à frente do ponto de impacto.

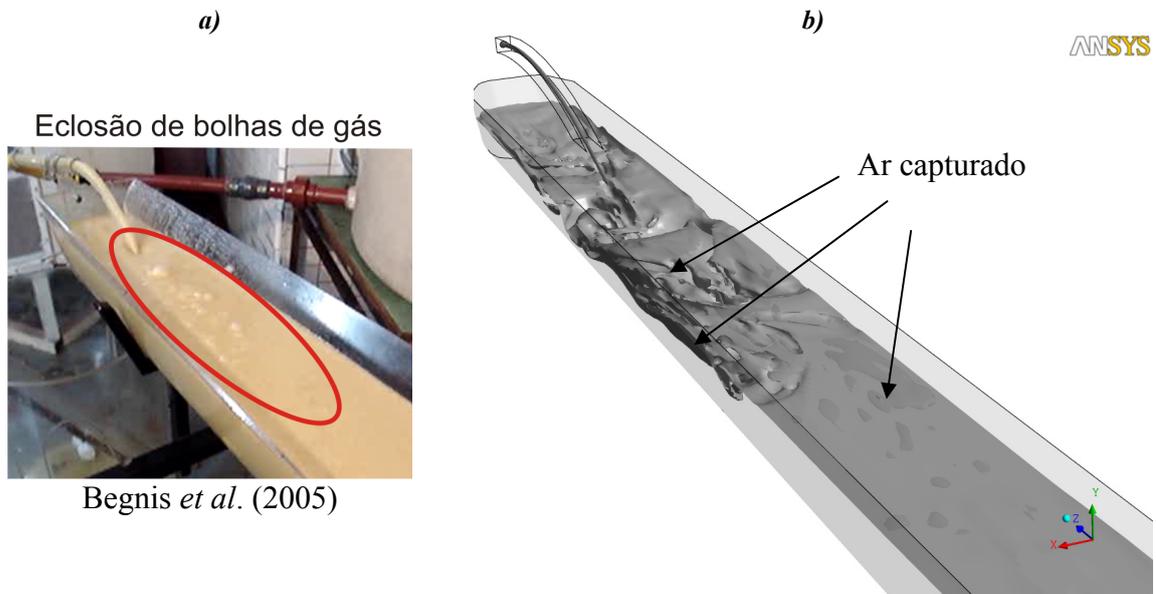


Figura 5.10. Comparação entre os resultados experimentais de Begnis, Brandaleze e Topolevsky (2005) em *a*, e os obtidos neste trabalho, em *b*.

A captura de ar pode ser melhor percebida na Figura 5.11, onde são apresentados os campos de fração volumétrica de ferro-gusa em vários instantes de tempo amostrados no plano central do canal ($X=0m$).

Toda a região em vermelho é composta por ferro-gusa e em azul apenas por ar. Pode-se acompanhar o desenvolvimento do jato até seu ponto de impacto, bem como a perturbação da superfície livre em 5s. A amplitude da perturbação chega a tocar o *farfield*. Já a região de mistura se propaga por quase 2m do ponto de impacto mas não chega a tocar o fundo do canal. Vez ou outra, quando isto ocorre no transiente, as frações observadas são desprezíveis. Isto é mostrado mais adiante.

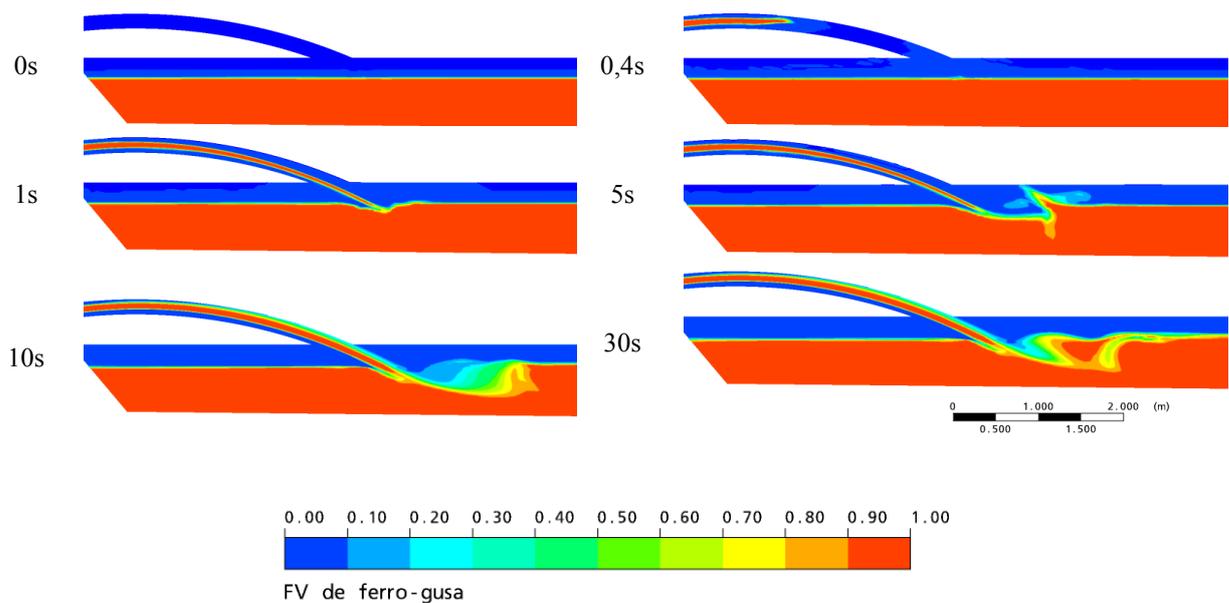


Figura 5.11. Campos de fração volumétrica de ferro-gusa no plano de simetria do canal em seis diferentes instantes de tempo no plano $X=0m$.

5.4.2 Desgaste

Como comentado no Capítulo 2, Seção 2.3, um dos principais problemas relatados na literatura diz respeito ao processo de desgaste na parede lateral do revestimento refratário. As causas deste fenômeno são várias, desde carregamento térmico-mecânico até hidratação dos cristais do refratário por vapor de água (HUBBLE *et al.*, 1998). O sistema é quimicamente reativo e o refratário tende a se dissolver no líquido, principalmente pela influência do efeito Marangoni (MUKAI *et al.*, 1989; HUBBLE *et al.*, 1998; MUKAI, 1998; LI, MUKAI e TAO, 2000).

A cinética exata deste processo não é bem conhecida e nem posta em questão neste trabalho, mas sabe-se que a movimentação da interface ar-metal-refratário e a dissolução de O₂ no metal são catalisadores deste fenômeno. Em que grau e de que maneira, contudo, não se pode ainda afirmar, pois cada sistema é único (MUKAI, 1998). Todavia, como a fenomenologia envolve pelo menos uma etapa de transferência de massa, os níveis de turbulência, gradientes de velocidade e temperatura terão forte influência sobre a taxa de transferência de massa e eventuais reações químicas. Há também concomitante a isto o efeito do cisalhamento do escoamento sobre as paredes. Assim, quatro variáveis tidas como relacionadas ao processo de desgaste foram amostradas a partir da simulação pseudo-transiente e seus perfis confrontados ao perfil da taxa de desgaste do canal real após 28 dias de operação.

Da Figura 5.12 a Figura 5.17 exibem-se os resultados dos perfis de energia cinética turbulenta, velocidade superficial de gusa, tensão de cisalhamento e fração volumétrica de ar, respectivamente, junto às paredes laterais em várias alturas, e no fundo junto à linha de centro.

O que se pode perceber é que, para as paredes laterais, os perfis de cada uma destas grandezas, independentemente da altura em que são avaliadas, têm o mesmo comportamento qualitativo exibindo apenas magnitudes diferentes. As regiões mais críticas são a região de impacto, onde há magnitudes mais acentuadas, e junto à interface com magnitudes aproximadamente contínuas e mais suaves ao longo de uma altura.

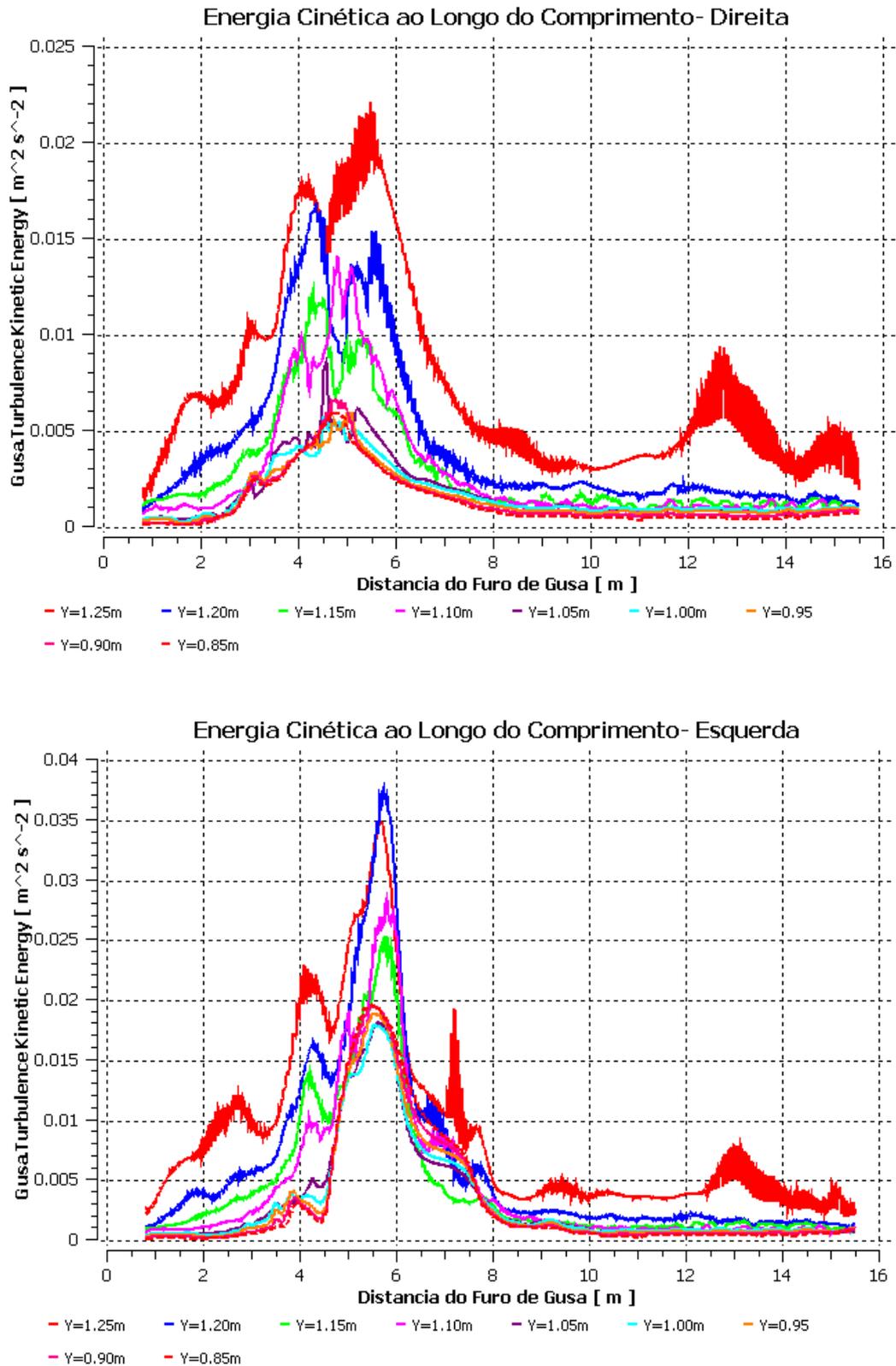


Figura 5.12. Perfis de energia cinética em regime permanente medidos nos volumes de controle adjacentes às duas paredes laterais do canal em diversas alturas.

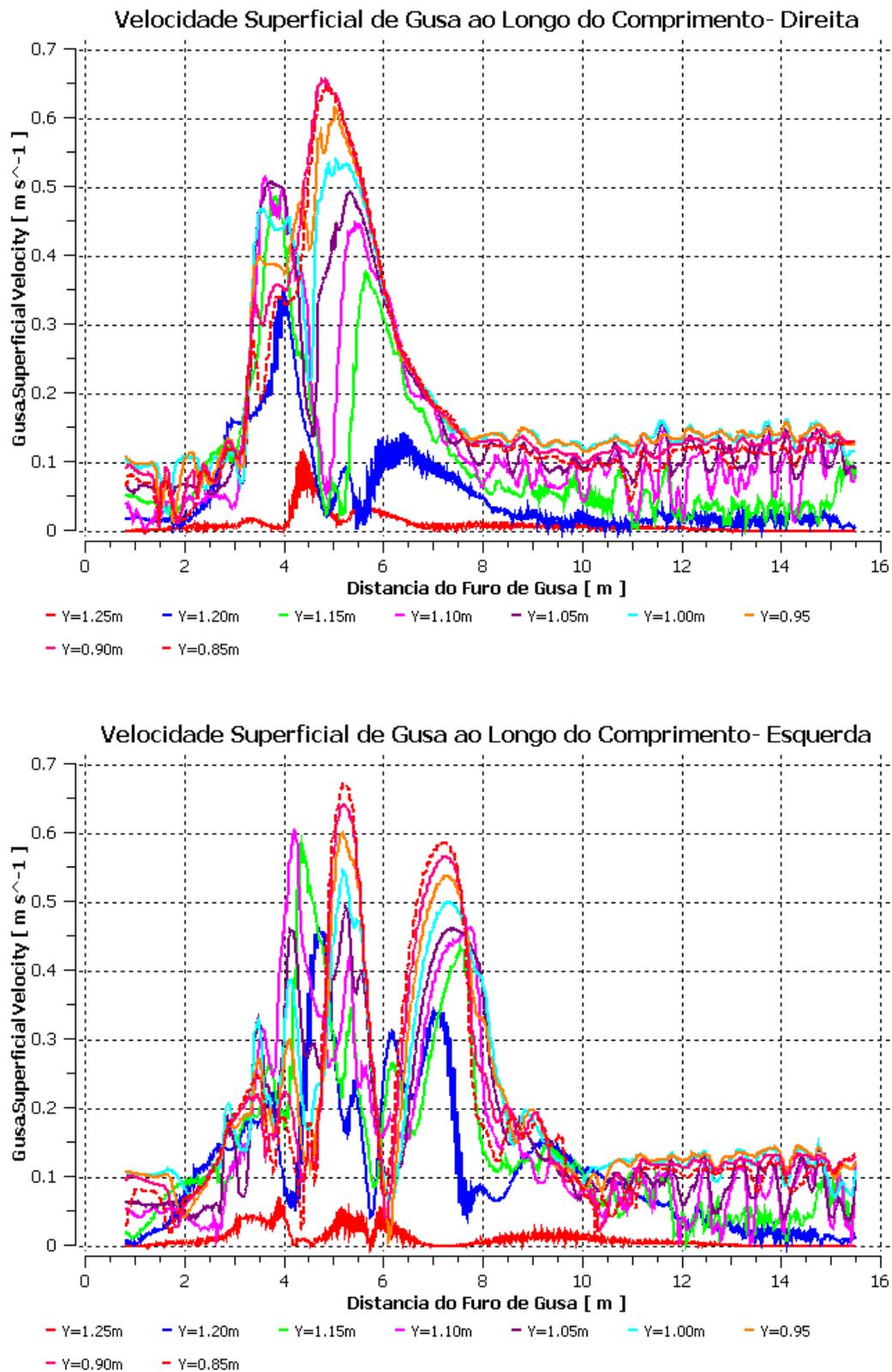


Figura 5.13. Perfis de velocidade superficial de ferro-gusa em regime permanente medidos nos volumes de controle adjacentes às duas paredes laterais do canal em diversas alturas.

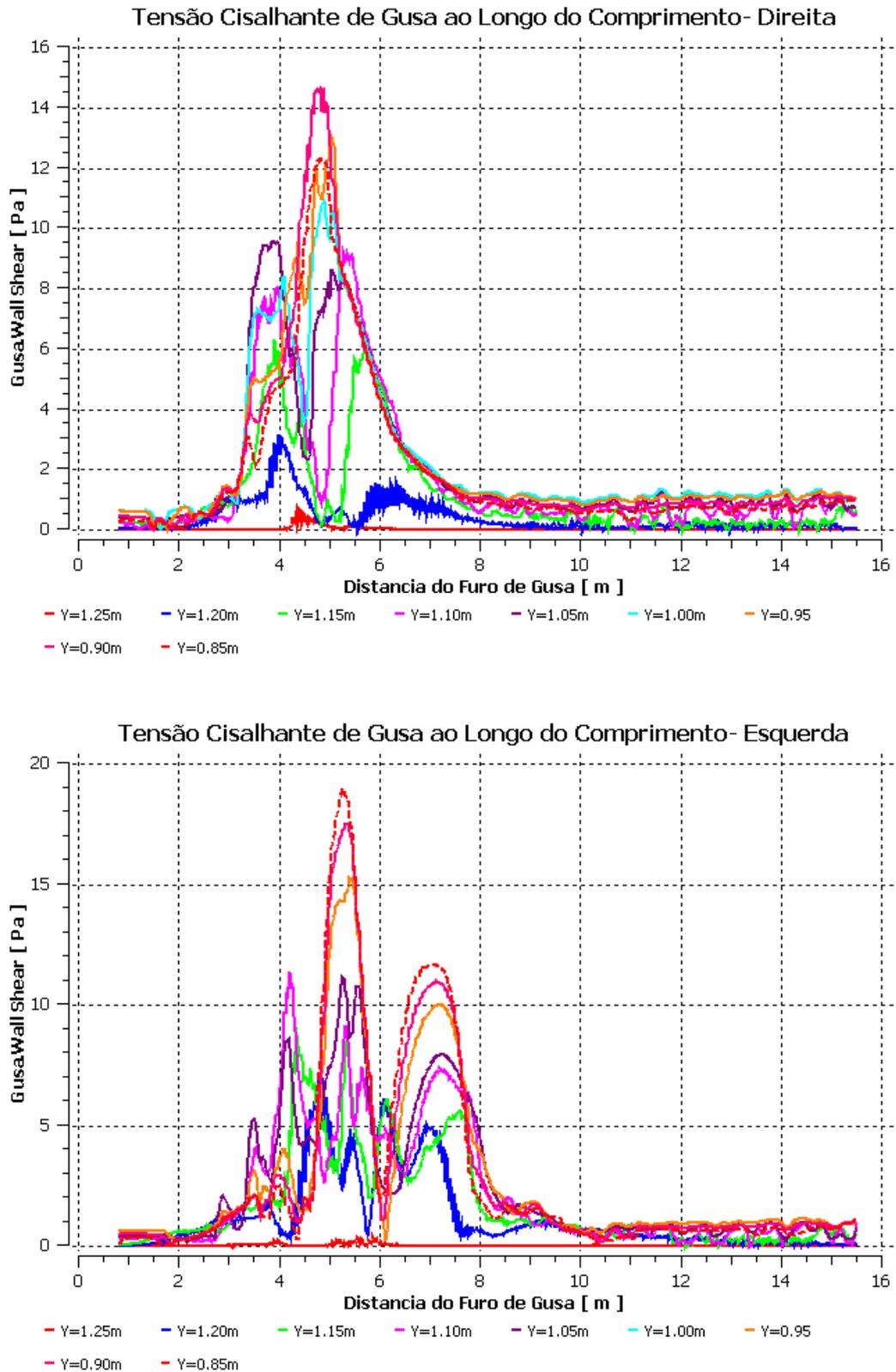


Figura 5.14. Perfis de tensão cisalhante em regime permanente medidos nos volumes de controle adjacentes às duas paredes laterais do canal em diversas alturas.

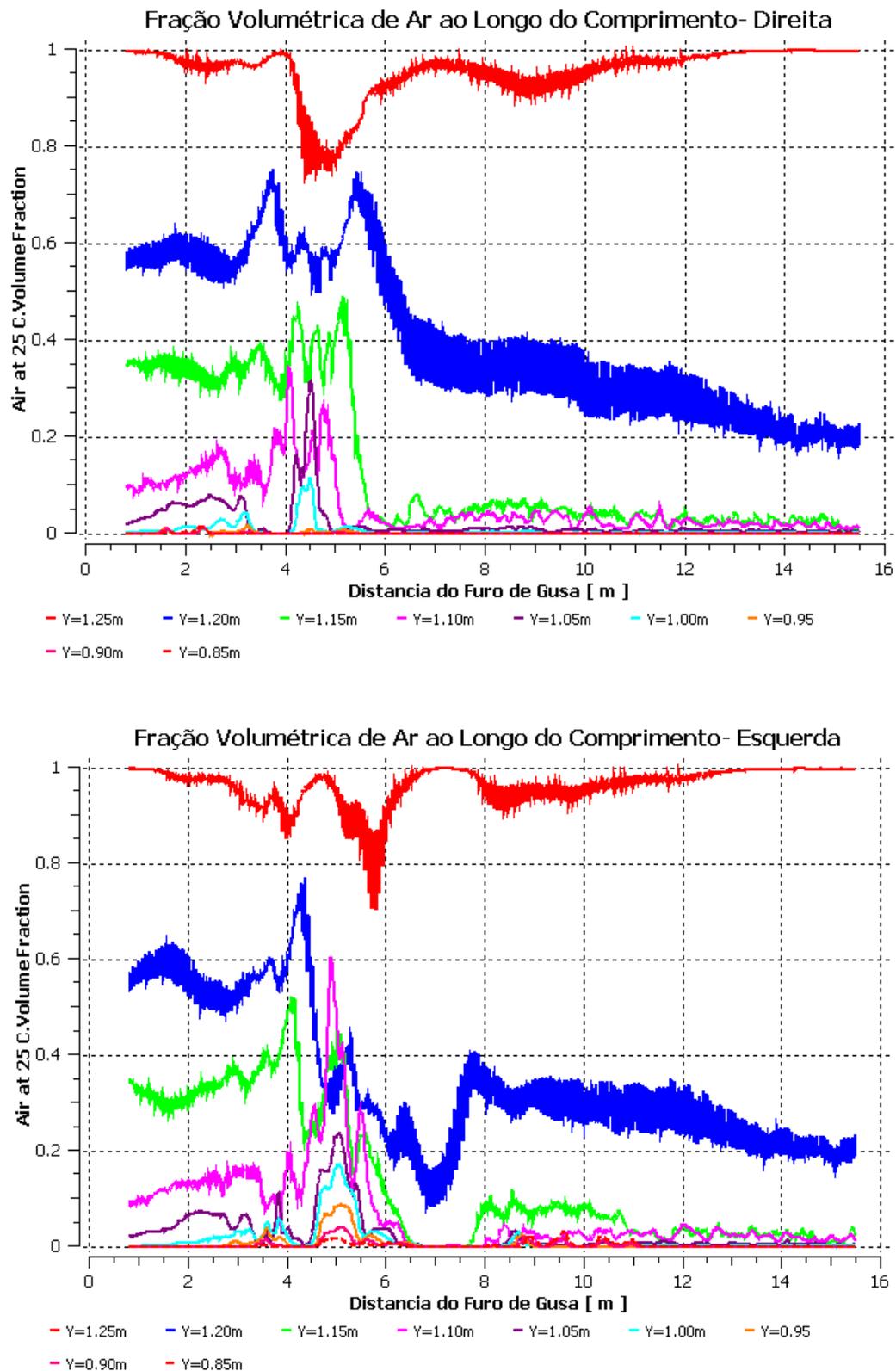


Figura 5.15. Perfis de fração volumétrica de ar em regime permanente medidos nos volumes de controle adjacentes às duas paredes laterais do canal em diversas alturas.

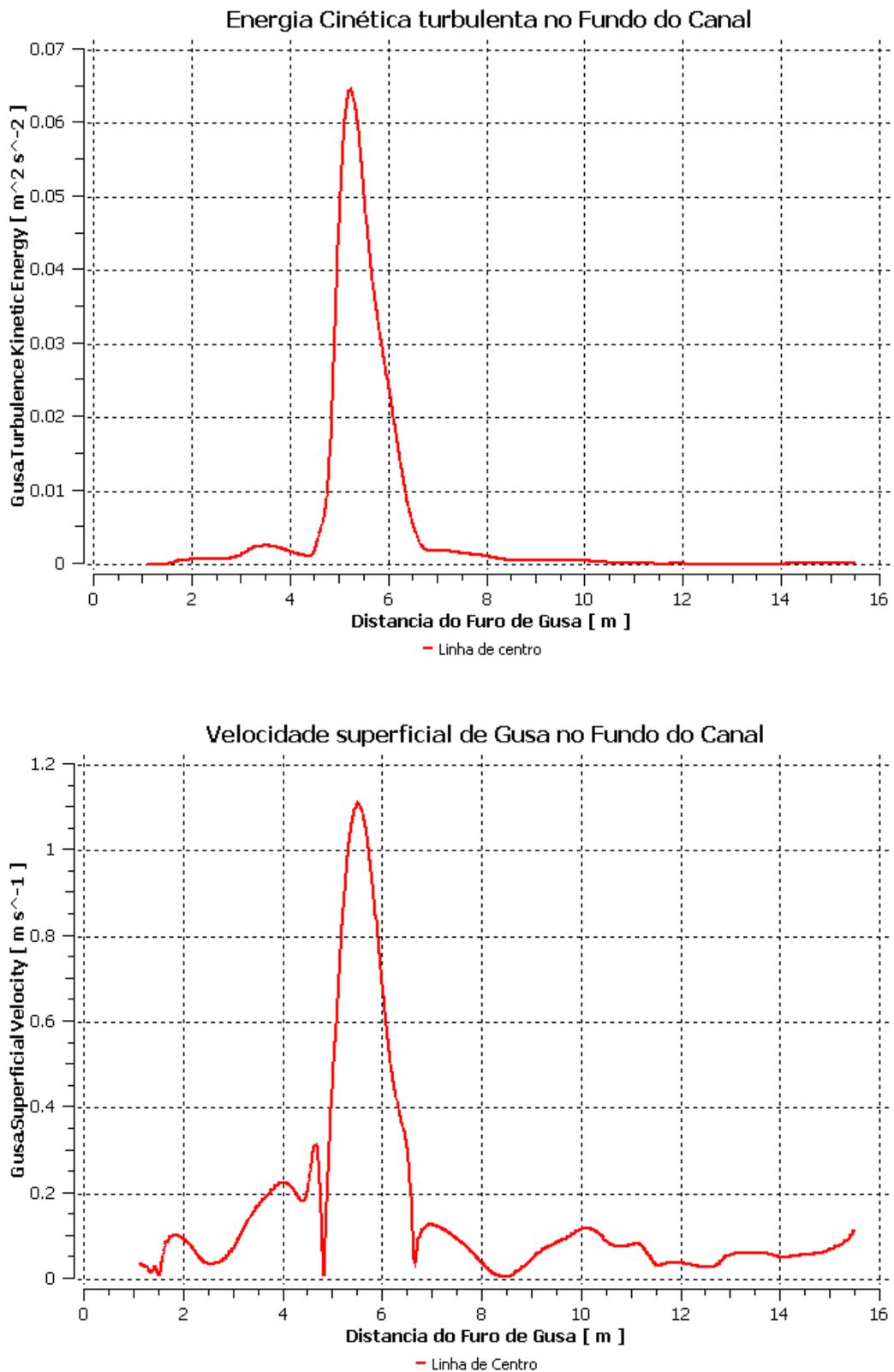


Figura 5.16. Perfis de energia cinética turbulenta e velocidade superficial de ferro-gusa em regime permanente medidos nos volumes de controle adjacentes ao fundo do canal na linha de centro.

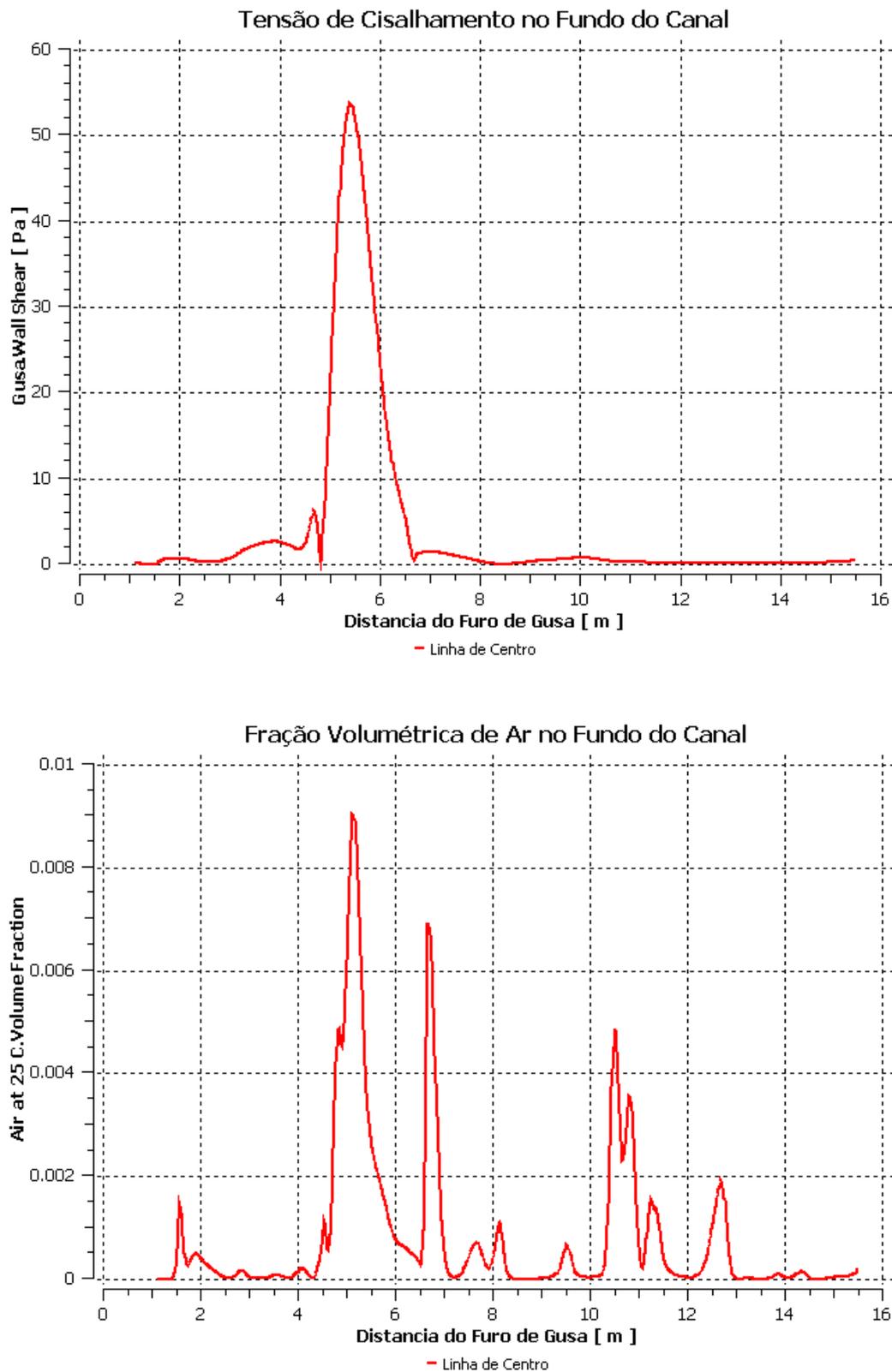


Figura 5.17. Perfis de tensão de cisalhamento e fração volumétrica de ar em regime permanente medidos nos volumes de controle adjacentes ao fundo do canal na linha de centro.

Estes resultados corroboram o que se vê na prática: uma região muito erodida e abaulada nas laterais na região de impacto, e um desgaste contínuo e quase com decréscimo linear ao longo do canal junto da interface.

Mas um detalhe é importante, o fundo do canal é pouco afetado pelo desgaste apesar da tensão cisalhante ser 3,5 vezes maior que as das laterais. E quando o comportamento transiente desta grandeza é levado em conta, isto ainda é mais singular, pois o caráter oscilatório do escoamento repercute no histórico da tensão cisalhante sobre a parede do fundo mudando-a periodicamente de direção: ora a favor da direção principal do escoamento, ora contra, o que poderia promover a erosão mecânica desta região. *Entretanto, isto não se verifica na prática.*

Em torno de 20s, um comportamento periódico começa se esboçar. As magnitudes também são comparativamente consideráveis. A Figura 5.18 ilustra este comportamento. O ponto de prova foi colocado na parede do fundo a 5m do furo de gusa, pois apesar do jato atingir a interface a 3,5 metros ele faz isso em uma trajetória diagonal e a corrente de metal atinge a fundo cerca de 1,5m à frente do ponto de impacto.

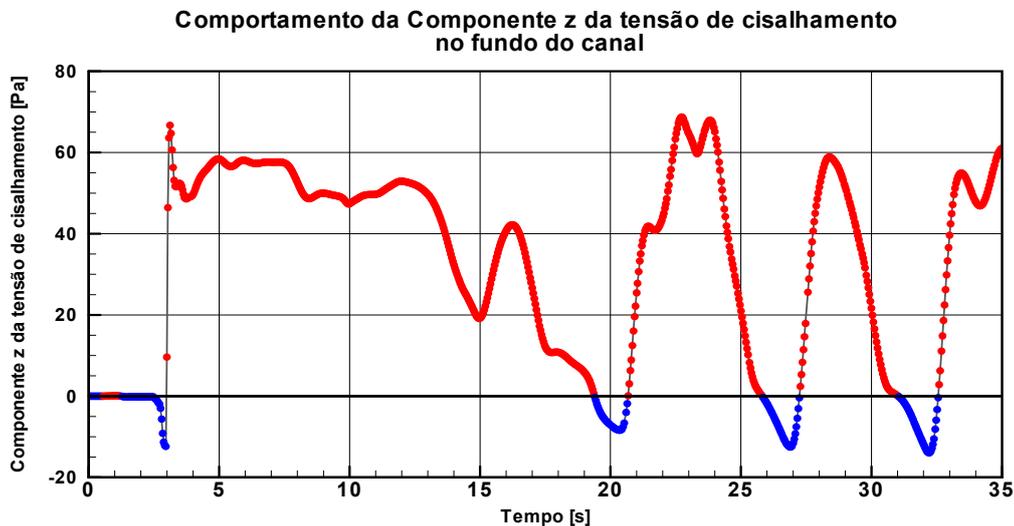


Figura 5.18. Oscilação do campo de tensão na parede inferior a 5m do furo de gusa ao longo do tempo.

O comportamento oscilatório também repercute em outras variáveis além da tensão. Na Figura 5.19 é mostrado o comportamento transiente da energia cinética turbulenta. O modelo de turbulência foi acionado em 2,5s, por isso o sinal não começa no tempo igual a zero e apresenta um súbito aumento neste instante.

Em torno de 10s os perfis das laterais começam a oscilar de forma alternada, cruzando-se a cada 5s aproximadamente. Junto ao fundo também apresenta-se uma oscilação que se torna evidente a partir de 15s e que apresenta o mesmo período de ~5s e uma amplitude aproximadamente constante. Quando os perfis laterais se cruzam o sinal do fundo do canal atinge o seu mínimo. Isto se dá devido à oscilação transversal das zonas de recirculação.

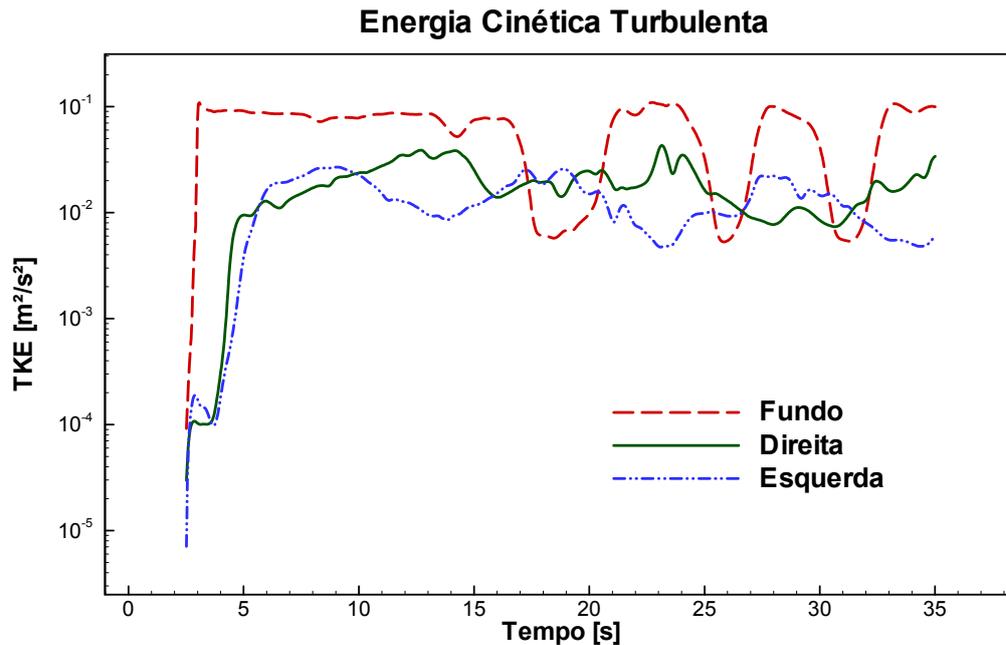


Figura 5.19. Energia cinética turbulenta amostrada ao longo do tempo na região de impacto a 4,5 m do furo de gusa no fundo do canal e nas paredes laterais em $Y=1,00\text{m}$.

Este efeito alternado dos perfis laterais também se observa no campo de tensão e de fração volumétrica de ar, como pode ser constatado na Figura 5.20 onde dois pontos de amostragem foram situados sobre as paredes a cerca de 5m do furo de gusa 7cm abaixo da interface ($Y=1,00$). A magnitude da tensão chega a alcançar até 35 Pa, ou cerca da metade do que é observado no fundo do canal (ver Figura 5.18). Já a oscilação da interface é considerável, pois a presença de ar é acentuada chegando a patamares superiores a 30%.

O comportamento do campo de pressão também é interessante, pois as ondulações da superfície livre acabam por colidir hora ou outra com a parede do escumador. O instante do primeiro impacto destas ondas pode ser visto na Figura 5.21. A pressão medida no centro da parede do escumador na altura $Y=1,00\text{m}$ em torno do tempo igual a 5s tem um sinal comportado e quase constante, ou seja, o único efeito é o hidrostático¹⁴. Neste instante há um aumento súbito da pressão devido à colisão da 1ª onda gerada pelo impacto do jato com a superfície livre, e isto segue ao longo do tempo de maneira aparentemente caótica, pois não se percebe neste caso nenhuma periodicidade ou padrão. O que se percebe é que mesmo oscilando, há um crescimento do valor médio deste sinal que se dá devido ao enchimento do canal. A pressão hidrostática está se elevando pois o nível do metal também está. Uma observação: a pressão de referência não está sendo considerada.

¹⁴ Em siderurgia é muito comum se referir a pressão ferrostática ao invés de hidrostática por razões óbvias: o líquido é o ferro fundido ao invés de água. Mas apenas por comodidade e familiaridade com o termo, hidrostático é usado aqui. O conceito de ambos é o mesmo, evidenciando apenas o tipo de fluido.

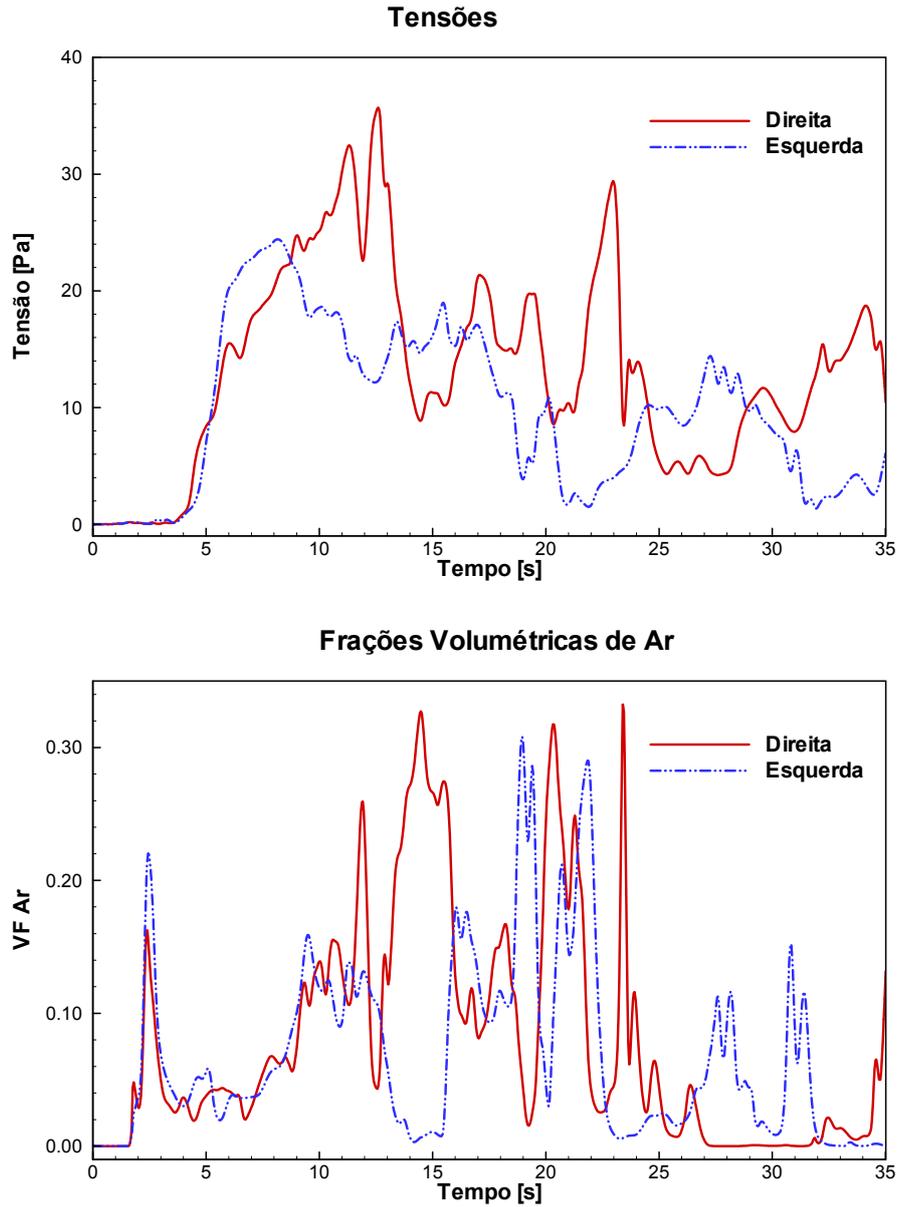


Figura 5.20. Perfis de tensão cisalhante de fração volumétrica de ar ao longo do tempo amostrados a 4,5m do furo de gusa nas paredes laterais em $Y=1.00m$.

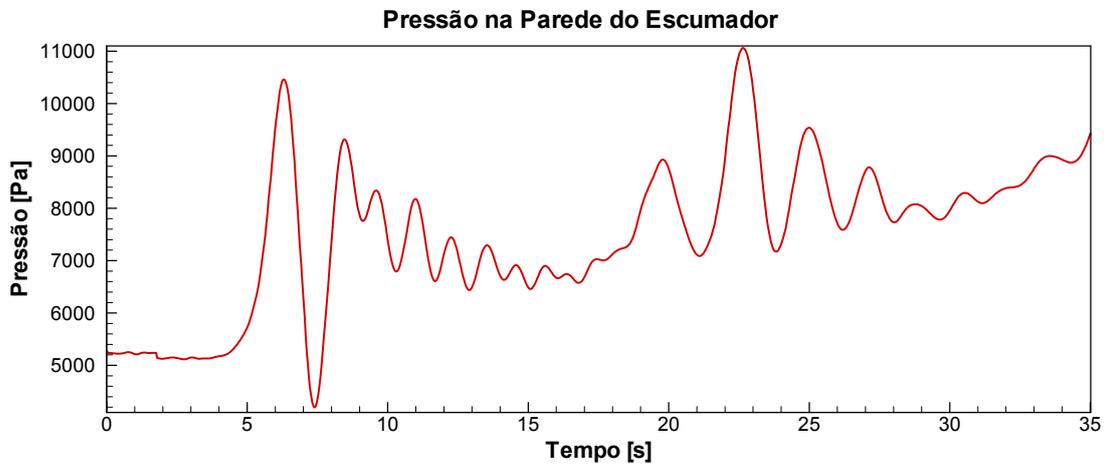


Figura 5.21. Perfil de pressão amostrado ao longo do tempo no centro da parede do escumador em $Y=1,00m$.

Na Figura 5.22 apresentam-se em 3D o campo de tensão cisalhante de ferro-gusa juntamente com a superfície livre: as estruturas cinzas translúcidas representando as iso-superfícies de fração volumétrica de ferro-gusa igual a 99% ao longo do tempo. Nesta figura pode-se notar a oscilação transversal do campo de tensão e como a dinâmica da superfície livre interfere no campo. Há a formação de estruturas sob a superfície que são bolhas de ar capturadas na região de mergulho do jato e concomitantemente arrastadas pela corrente de metal líquido, e que periodicamente colidem com as laterais próximas à interface. Estas estruturas podem ser melhor visualizadas na Figura 5.23 até a Figura 5.25. Acima e à esquerda tem-se a vista lateral esquerda; acima e à direita tem-se a vista superior da zona de mistura; e abaixo uma vista em perspectiva de todo o canal.

Na Figura 5.23, no tempo igual a 2 segundos, o jato já colidiu com a superfície mas ainda não conseguiu penetrar o seio líquido que repousava dentro do canal como mostram as linhas de corrente. Elas se espalham para a frente e próximo à superfície e não vão muito além do ponto de impacto. Em 5 segundos a penetração da perturbação é maior e um comportamento levemente vorticoso começa a se esboçar e se torna evidente próximo a 10 segundos, onde a perturbação chega quase a tocar o fundo do canal. As recirculações ainda apresentam certa simetria e as linhas de corrente à frente da região de mistura se estendem bem mais. Algumas estruturas – bolhas de ar – começam a ser arrastadas com a corrente próximo à superfície.

Na Figura 5.24, a zona de mistura aparentemente se estabelece e a oscilação transversal dos vórtices começa a ficar evidente. Estes vórtices colidem com as paredes laterais e perturbam a interface junto às paredes, promovendo a captura de ar nestas regiões, o que explica os picos de fração volumétrica de ar já apresentados na Figura 5.20, bem como os de tensão e energia cinética.

À medida que o tempo passa, pequenas estruturas vão se desprendendo da zona de mistura e seguem arrastadas com a corrente. Como estas estruturas são bolhas de ar, a força de empuxo trata de empurrá-las para junto da interface. As que não eclodem são arrastadas pelo centro do canal até cerca de 8 metros à frente do ponto de impacto, o que é muito próximo à saída de escória. Algumas bolhas são arrastadas para trás pelo fluxo reverso que ocorre junto às paredes laterais como pode ser visto na Figura 5.24 no tempo igual a 25 segundos, e dependendo da trajetória, elas podem ser recaptadas próximo ao ponto de impacto sendo novamente agregadas à zona de mistura até que eventualmente sejam arrastadas para fora da mesma e eclodam na superfície. Na Figura 5.25 é mais fácil notar-se a presença de bolhas antes e depois da zona de mistura. A Figura 5.26 apresenta o comportamento das bolhas de ar observado por He *et al.* (2002a) que é muito similar ao descrito neste trabalho. E

o canal estudado por He *et al.* guarda muitas similaridades operacionais e geométricas com o deste trabalho.

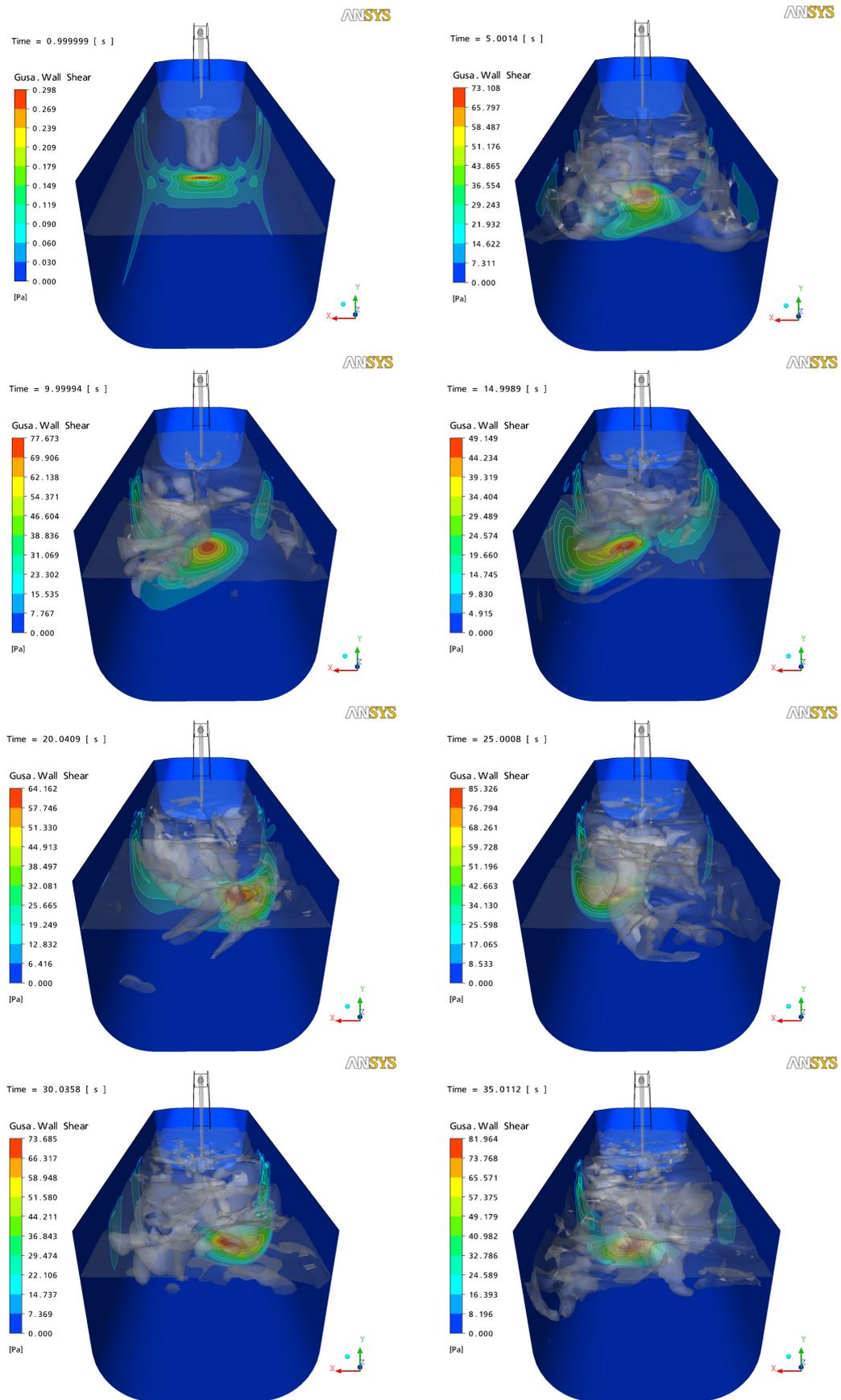


Figura 5.22. Campo de tensão cisalhante junto à parede.

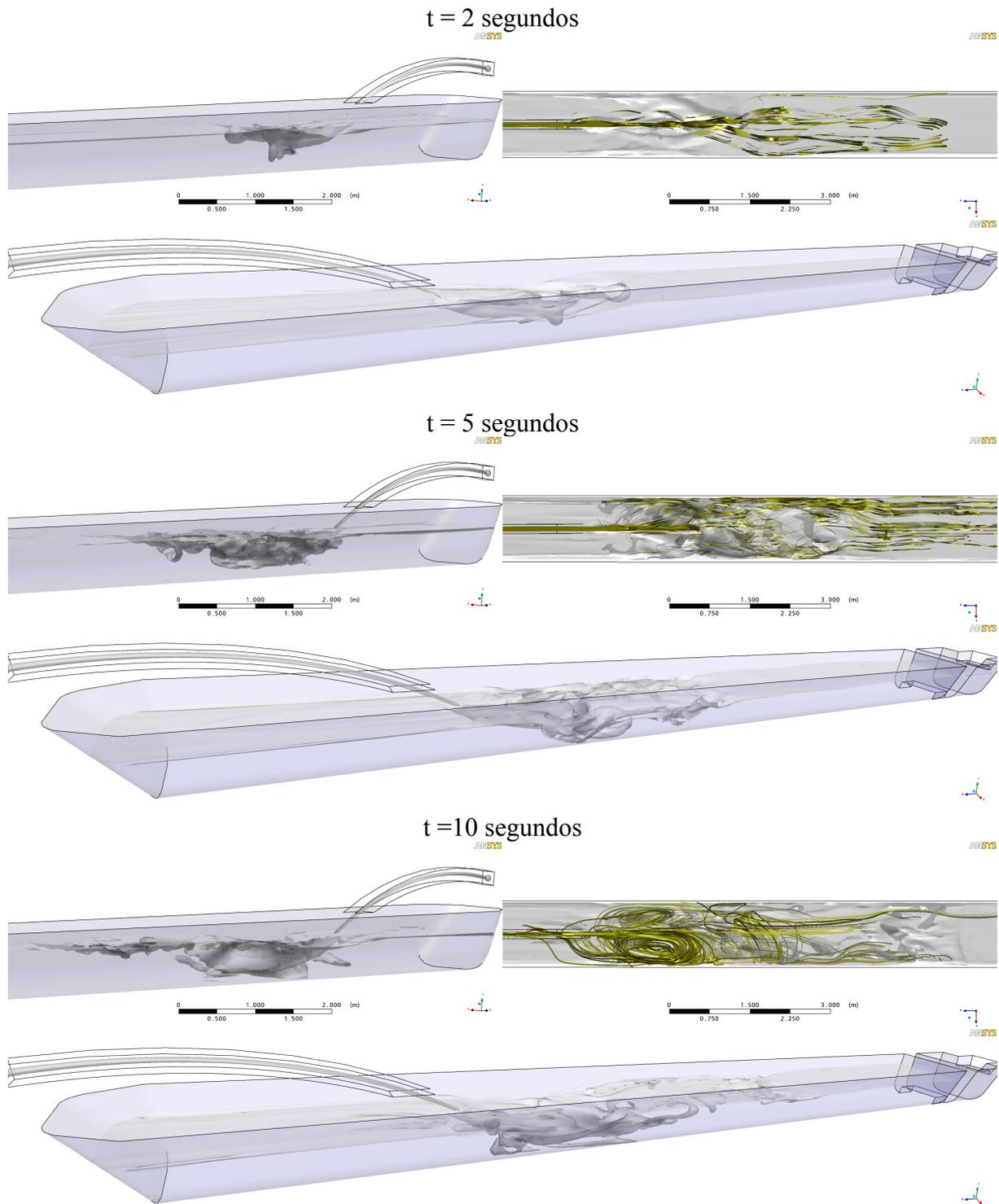


Figura 5.23. Vista 3D do comportamento da superfície livre e linhas de corrente entre 2 e 10 segundos.

Ainda na Figura 5.25, a solução de regime permanente apresenta uma camada adjacente à interface aparentemente emulsionada, pois ao longo de praticamente toda a extensão do canal há a presença de pequenas bolhas de ar que vão eclodindo e ficando menores à medida que se aproximam do escumador. A linha escura em torno do domínio indica a interface exatamente com 50% de fração volumétrica.

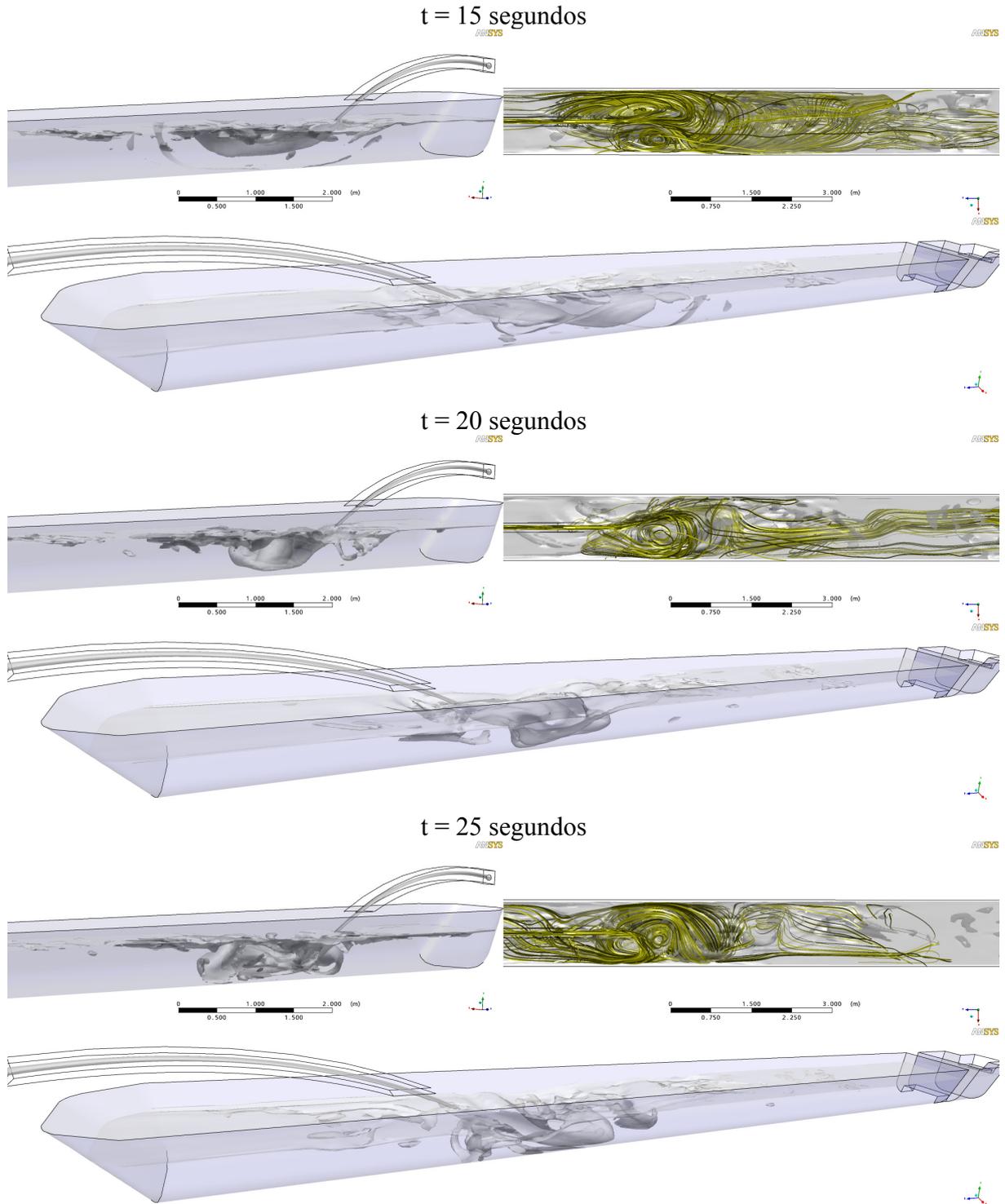


Figura 5.24. Vista 3D do comportamento da superfície livre e linhas de corrente entre 15 e 25 segundos.

A solução pseudo-transiente não é simétrica. Isto se dá devido à metodologia de solução. O método de obtenção da solução pseudo-transiente é idêntico ao transiente com a diferença de que a cada iteração não há a preocupação de se resolver o sistema linear com o mesmo rigor. O resíduo é minimizado a cada iteração até que esteja abaixo do critério estabelecido, onde então se considera o sistema linear resolvido.

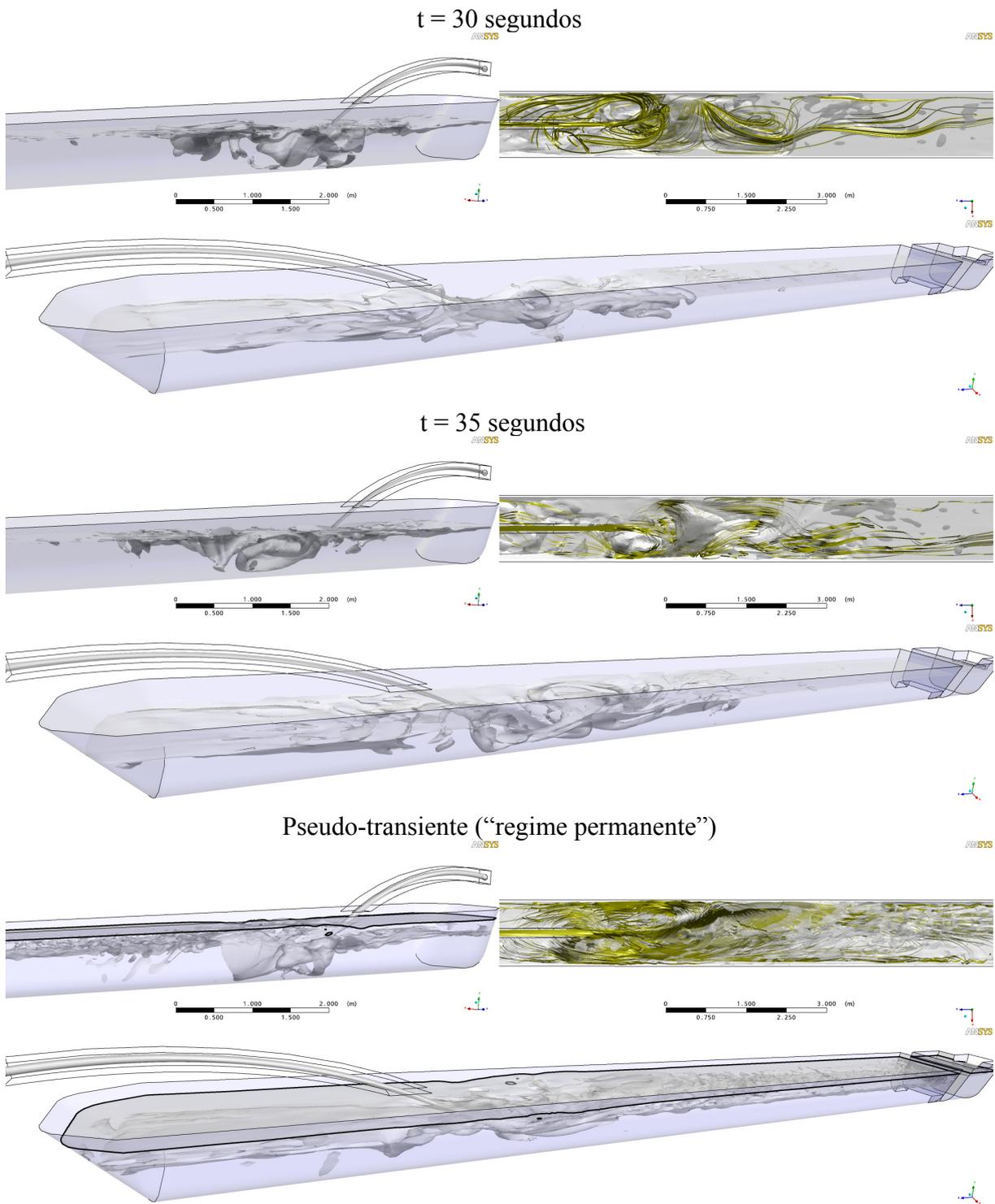


Figura 5.25. Vista 3D do comportamento da superfície livre e linhas de corrente entre 30 e 35 segundos, e em “regime permanente”.

Assim, o escoamento apresenta as mesmas oscilações transversais e longitudinais que o transiente ao longo do processo iterativo. E esta solução não apresenta, portanto, uma solução “estática” de regime permanente; a sua característica é oscilatória.

Vale comentar que o efeito de emulsão junto à interface visto na Figura 5.25 em regime permanente pode ser de fato física, pois isso é observado na prática industrial sendo um dos problemas do processo industrial e experimental (ver BEGNIS,

BRANDALEZE e TOPOLEVSKY, 2005). Mas também pode ser induzida pelo processo de refinamento adaptativo da malha que é sempre seguido de uma interpolação da solução anterior podendo resultar em difusão numérica, quebra e coalescência não-físicas. O que seria uma coincidência lamentável, pois induz ao erro visto este efeito de emulsionamento de fato fisicamente existir. Somente um refino de malha mais intenso nesta região poderia confirmar uma das hipóteses. Contudo, isso não foi possível devido ao esforço computacional necessário. Todavia, coincidências boas não ocorrem com muita frequência neste tipo de trabalho, o que leva a crer que o resultado está correto, mas a outra hipótese não é impossível e deve ser levada em conta numa análise de projeto.

Os valores médios entre as duas paredes (direita e esquerda) das variáveis foram tomados da solução de regime permanente de duas linhas passando pelos volumes de controle adjacentes às mesmas e a 5cm abaixo do plano que define a iso-superfície de 99% de ferro-gusa. Os valores, portanto, *não são nodais*. A amostragem, portanto, fez-se no tempo equivalente a 2h de operação (*pseudo elapsed-time*) (ANSYS, 2007).

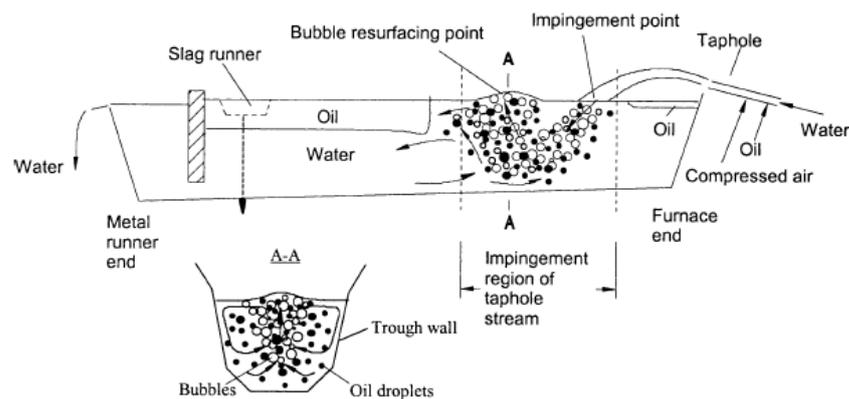
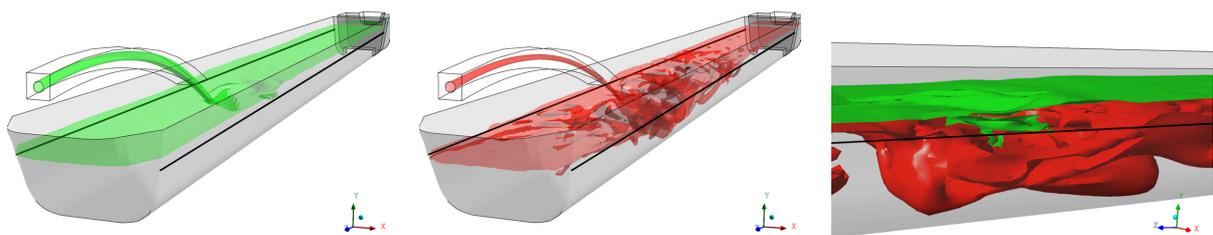


Figura 5.26. Captura e trajetória das bolhas descrito no trabalho de He *et al.* (2002a).

A escolha da fração de 99% e a medida 5 cm abaixo desta interface teve a intenção de garantir que esta seja uma região onde, mesmo com *suaves* oscilações do nível, deveria ser encontrado apenas ferro-gusa. Assim, qualquer presença de ar nesta região é um indicativo de grande oscilação da interface, viz. Figura 5.27.



Fração de 50% de gusa

Fração de 99% de gusa

Ambas as Frações

Figura 5.27. Localização das linhas de amostragem em relação à interface.

Esta oscilação facilita a dissolução do material e a dissolução de oxigênio no líquido, o que pode resultar em reoxidação do ferro e posterior ataque ao carbono do refratário (GONDOLF, RANDAL e LANGE, 2001). A Figura 5.28 até a Figura 5.31 apresentam comparações entre o perfil da taxa de desgaste e as grandezas de interesse. A taxa de desgaste é calculada medindo-se a profundidade da erosão final e dividindo-a pela quantidade de aço produzida durante todo o tempo de campanha do canal.

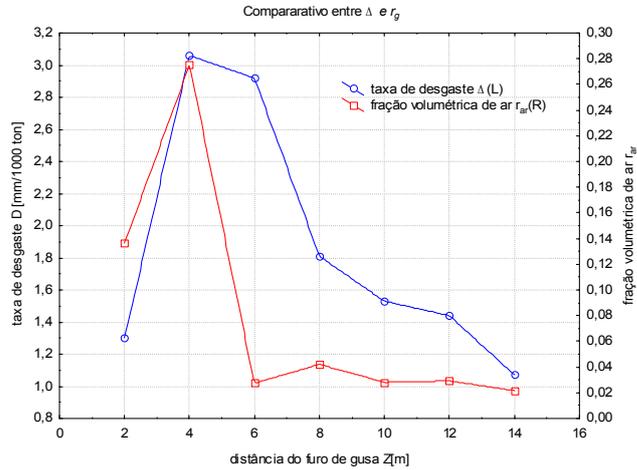


Figura 5.28. Comparação entre a taxa de desgaste e a fração volumétrica de ar junto à parede.

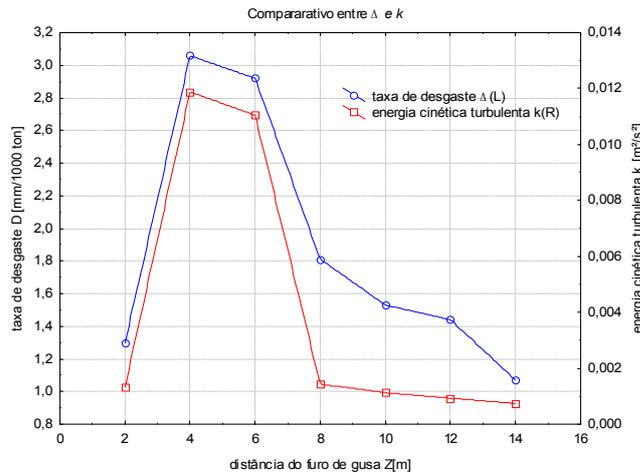


Figura 5.29. Comparação entre a taxa de desgaste e a energia cinética turbulenta.

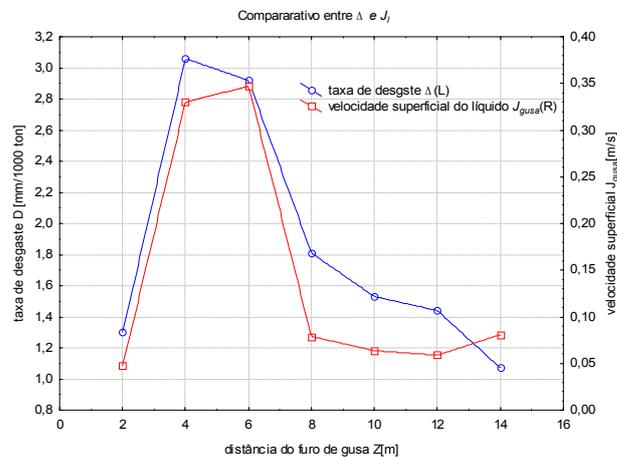


Figura 5.30. Comparação entre a taxa de desgaste e a velocidade superficial de ferro-gusa.

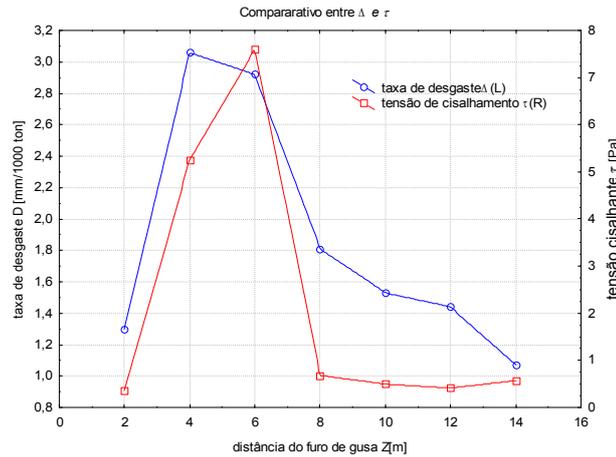


Figura 5.31. Comparação entre a taxa de desgaste e a tensão de cisalhamento.

Todas as variáveis apresentaram quantitativamente um certo grau de correlação, todavia, elas devem ser independentes entre si. A Tabela 5.4 apresenta o valor do coeficiente de correlação entre as variáveis e a taxa de desgaste o que é uma forma simples de se avaliar quantitativamente o grau de interdependência. Esta análise simples foi efetuada no software Statistica® Release 7.

Tabela 5.4. Matriz de correlação linear.

	Δ	k	τ	r_{gusa}	J_{gusa}
Δ	1,00	0,97	0,92	0,52	0,95
k	0,97	1,00	0,96	0,56	0,99
τ	0,92	0,96	1,00	0,32	0,98
r_{gusa}	0,52	0,56	0,32	1,00	0,46
J_{gusa}	0,95	0,99	0,98	0,46	1,00

A variável que apresentou o maior grau de correlação com a taxa de desgaste foi a energia cinética turbulenta seguida pela velocidade superficial de gusa. Há também uma forte correlação entre elas e a tensão cisalhante. Isto indica que estas variáveis não são linearmente independentes. Isto é facilmente explicável, pois a energia cinética turbulenta é função da flutuação do campo de velocidade, além de possuir um acoplamento no termo advectivo. Já a tensão é função explícita do gradiente do campo de velocidade junto à parede. A baixa correlação da fração volumétrica é explicada pelo ponto em $Z = 6m$ na Figura 5.28. Há apenas um pico coincidente. Isto se dá devido ao efeito da força de empuxo que evita que as bolhas capturadas sejam arrastadas indefinidamente pelo metal. Elas eclodem não muito à frente da zona de impacto como já explicado.

Tanto a velocidade quanto a energia cinética têm boa concordância em suas magnitudes com a ordem de grandeza apresentada por He *et al.* (2002a), ou seja, 0,1m/s para a velocidade e 0,01m²/s² para a energia cinética turbulenta.

Os perfis obtidos também tem consistência física, pois as regiões de maiores magnitudes das variáveis são as mais erodidas, com exceção do fundo do canal que apresenta um cisalhamento maior que as laterais. Portanto, as regiões de maior desgaste não

correspondem às que apresentam as maiores tensões. Isto só ocorre quando atuando conjuntamente há velocidades elevadas, grande agitação da interface junto à parede com captura de ar e níveis elevados de turbulência o que concorda com o que se defende na literatura.

Com base na Tabela 5.4, pode-se propor uma relação simples (*power-law*) entre a energia cinética e o perfil de desgaste

$$\Delta = (1.074,107k_{gusa}^{0,27161}) \cdot \exp \left[-\frac{(r_{gusa} - r_{gusa}^i)^2}{a^2} \right] \rightarrow 0 < a < 0,2, \quad (5.16)$$

com a fração volumétrica de interface, r_{gusa}^i , igual a 0,5. O coeficiente de correlação, R^2 , foi igual a 0,972.

O termo exponencial garante que este efeito será máximo junto a interface, e pode se estender além dela por uma certa distância. Postula-se, neste caso, uma distribuição gaussiana deste comportamento em torno da interface, e o parâmetro a define o quão extensa será esta distribuição. Os limites impostos, $]0; 0,2[$, garantem que a distribuição gaussiana não se estenda além dos valores permitidos para fração volumétrica, ou seja, que esteja compreendida entre zero e hum.

Quando $a \rightarrow 0$, o comportamento do termo exponencial é similar a uma função Delta de Dirac normalizada, valendo hum em toda região onde $r_{gusa} = r_{gusa}^i$, e zero para qualquer outra. O aumento do módulo do parâmetro a aumenta o raio de ação do desgaste em torno da interface. A Figura 5.32 apresenta a distribuição da correlação de desgaste em torno da interface. Quanto menor o valor de a , mais concentrado na interface será o desgaste predito, ou seja, na região da parede onde o valor de fração é igual a r_{gusa}^i . Quando $a \rightarrow 0,2$, a distribuição do desgaste se dá por toda a região de transição da interface, tendo o seu valor máximo em $r_{gusa} = r_{gusa}^i$.

Na Figura 5.33 compara-se os perfis de desgaste experimentais e os preditos pela Equação (5.16). Em **A** tem-se a geometria predita, e em **B** a geometria medida. As linhas verticais correspondem aos pontos de amostragem, que tem seus valores comparados no gráfico aos perfis de desgaste preditos nas duas paredes laterais do canal junto à interface.

A geometria **A** é obtida gerando-se uma superfície normal à parede cuja a projeção normal é determinada pelo resultado da Equação (5.16). A geometria **B** é gerada com base nos pontos experimentais de apenas um lado e interpolados por uma *spline* utilizando o SolidWorks[®], o que justifica o perfil simétrico e suave.

Magnitude e extensão do termo exponencial em torno da interface ($r=0,5$)

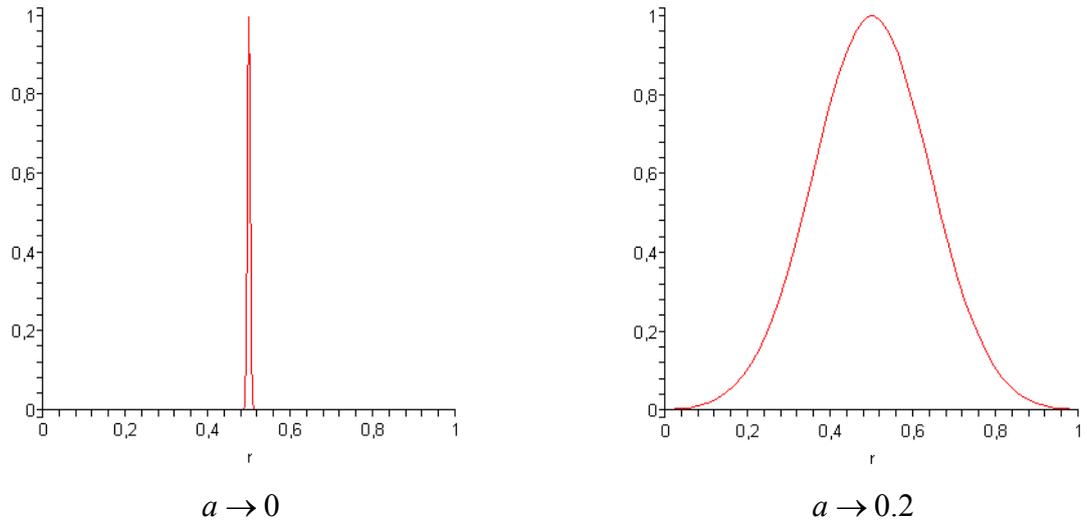


Figura 5.32. Distribuição da Equação (5.16) em torno na interface em função do valor do parâmetro a .

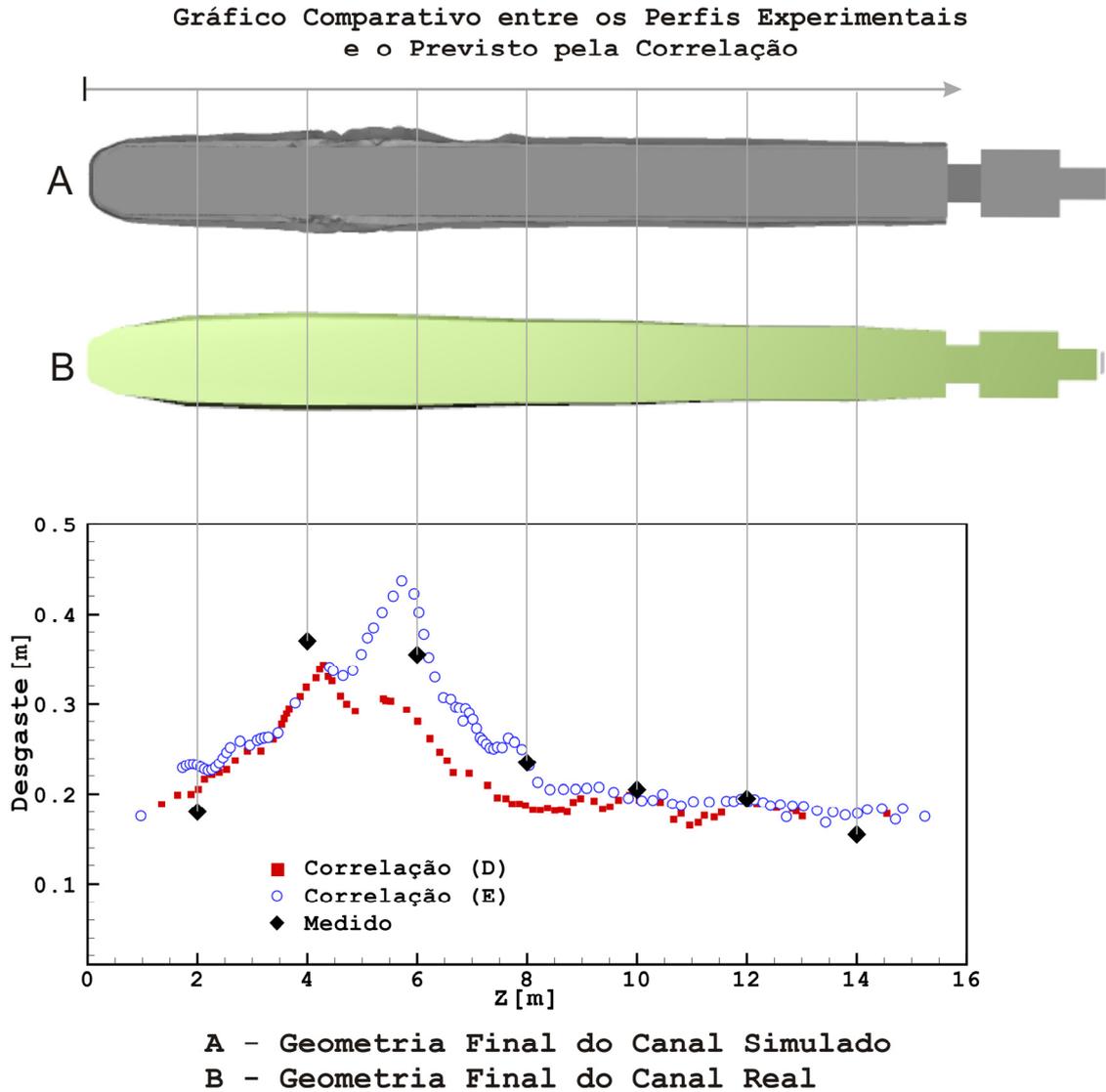


Figura 5.33. Acima: Comparação das geometrias finais do canal simulado (A) predita pela equação, e do canal real (B). Abaixo: Comparação entre os perfis de desgastes preditos e o real obtido *in loco*.

A concordância entre os perfis é muito boa, tanto quali quanto quantitativamente. As geometrias finais são muito similares entre si.

Melhores resultados poderiam ser talvez obtidos com mais pontos experimentais, efetuando-se medidas a cada 0,10m, ao invés de a cada 2m, por exemplo.

Há de se salientar que a correlação proposta *não* descreve o desgaste ao longo de um período de tempo. O que ela descreve é o *provável desgaste no fim da capanha dada uma certa condição de operação*. Não há como se prever o tempo de vida do equipamento com base apenas no que foi apresentado aqui. Tem-se, portanto, uma estimativa da intensidade do desgaste para um determinado cenário operacional, pois, para um desgaste menor, por exemplo, é de se esperar que o tempo de vida do equipamento seja maior. Contudo, não se pode dizer o quanto.

Diante de todos os resultados apresentados pode-se considerar que o modelo é válido na análise do comportamento fluido dinâmico deste fenômeno.

CAPÍTULO

6

CONCLUSÕES

A fluido dinâmica do escoamento em canal de alto-forno foi matematicamente modelada e numericamente resolvida. Para tanto, um modelo Euleriano homogêneo com tensão superficial foi proposto.

A metodologia computacional necessária à resolução e análise deste modelo foi então desenvolvida de forma a ser robusta, rápida e aplicável a uma estrutura computacional de pequeno porte, pois o principal cuidado foi ter um equilíbrio entre a descrição física do fenômeno e a facilidade em se resolver o modelo. Teve-se o cuidado para não propor um modelo demasiado complexo e “físicamente perfeito”, mas que não pudesse ser resolvido por falta de infra-estrutura adequada inviabilizando sua utilização, ou seja, o objetivo, além do científico, foi o de permitir que esta metodologia seja acessível às empresas que por ventura tenham a necessidade de analisar um processo deste tipo.

Com base nos resultados apresentados, pode-se concluir que o modelo proposto é válido e se aplica adequadamente ao problema, pois várias características importantes como a trajetória balística do jato, o comportamento vorticoso e oscilatório da interação jato-superfície foram captados, e concordam com o que é descrito na literatura.

As magnitudes da energia cinética e da velocidade superficial também estão dentro dos limites relatados em trabalhos experimentais e numéricos, no entanto, a tensão não. Ela é muito superior ao que se relata, e isto deve-se talvez às diferenças entre os modelos. O modelo empregado neste trabalho é o único transiente e que contempla a dinâmica da superfície livre e do jato. Todavia, além disso, pode ser também devido ao modelo de turbulência empregado, no caso o modelo $k-\varepsilon$.

Não se pôde analisar o efeito de outros modelos de turbulência a duas equações sobre os resultados devido ao custo computacional, como por exemplo o SST e o $k-\omega$. Então, este é um ponto que deve ser levado em conta em estudos futuros.

Os perfis apresentados nas paredes das variáveis monitoradas têm consistência física, pois as regiões onde as grandezas monitoradas têm maiores magnitudes são as mais erodidas.

Os níveis de energia cinética turbulenta aparentam ser o principal fator facilitador do desgaste seguido pela velocidade superficial. Estes dados corroboram o que se têm escrito

sobre o problema reforçando a idéia de que há uma provável sobreposição de efeitos dos mais diversos, sendo um deles a geração de turbulência junto à zona de impacto e as tensões (pequenas, mas contínuas) infligidas pelo escoamento às paredes do canal, promovendo a erosão físico-química da parede. Não obstante, é delicado se afirmar que a presença de ar corra e facilite a dissolução do refratário apenas com base no modelo fluido dinâmico. Então, pode realmente haver uma acentuação de reações químicas corrosivas devido à presença de oxigênio junto às paredes laterais, mas também há uma grande movimentação da interface, ocasionado não por gradientes de tensão superficial, mas sim pela interação jato/superfície livre. Alguns trabalhos experimentais que visaram suavizar a dinâmica do jato reportam o aumento da vida útil do equipamento em cerca de cinco vezes (HE *et al.*, 2002b), o que reforça esta hipótese.

Uma correlação matemática entre o desgaste e os níveis de energia cinética turbulenta foi proposta e a geometria desgastada resultante apresentou boa concordância com a experimental, o que permite estimar o desgaste final do canal de acordo com as condições de operação.

Todavia, estes resultados ainda carecem de uma validação experimental mais robusta para o estabelecimento de conclusões definitivas. Este, contudo, é um dos principais problemas na área siderúrgica, pois os modelos físicos raramente conseguem reproduzir toda a gama de parâmetros adimensionais necessários para se manter a similitude em um experimento multifásico. Medidas *in loco* são de difícil obtenção em função das altas temperaturas e níveis de radiação térmica envolvidos. Assim, a simulação numérica é uma importante ferramenta neste ramo da indústria, e este trabalho vem para abrir caminho e incitar mais trabalhos nesta área com as ferramentas aqui apresentadas.

Como contribuições secundárias deste trabalho vale assinalar a revisão bibliográfica, que trata sobre um tema muito específico da indústria siderúrgica destacando que o tratamento deste problema requer uma abordagem multidisciplinar dada a sua complexidade, e não vai ser esgotado com uma única dissertação ou tese. Muitas questões ainda estão abertas.

6.1 Recomendações para Pesquisas Futuras

A principal sugestão é a solução deste escoamento usando-se um modelo físico (experimental), para que então possa-se aumentar o grau de confiança e ajustar o modelo matemático.

Se de posse de uma infra-estrutura computacional adequada, o estudo de refino de malha também é recomendado

Dada a complexidade do fenômeno, a inclusão dos demais fenômenos físicos é indicada, como o balanço de energia, reações químicas, transferência de calor conjugada e interação fluido/estrutura, mas de forma paulatina. Já quanto aos modelos de turbulência, recomenda-se que em trabalhos futuros a simulação de grandes escalas seja preferida aos modelos de duas equações. Modelos a duas equações são limitados na descrição de um sistema tão complexo, a não ser, quem sabe, no caso de se ter uma formulação confiável da turbulência para os termos de interface.

Já o uso do modelo Euleriano homogêneo deve ser comparado ao de dois fluidos com o uso de equações de fechamento adequadas à morfologia deste fenômeno a fim de verificar se os resultados são muito distintos, pois este segundo é muito mais custoso computacionalmente.

Aos trabalhos que se seguirem a este, deve-se ter em mente que as condições de contorno e iniciais para os modelos de turbulência a duas equações ainda são um problema. Pode-se dizer que as escolhas feitas neste trabalho se aplicam tão somente a estas condições de operação deste caso particular. O sistema é muito sensível à inicialização e às condições do *farfield*. E, em princípio, como o *farfield* está muito próximo da superfície livre, as condições de contorno que se prescrevem no início da simulação não vão necessariamente ser as mesmas até o fim, podendo ser necessário modificá-las dinamicamente, pois nesta região ela é ainda fisicamente afetada pelo o que acontece no canal.

O ideal é o que *farfield* fosse realmente bem afastado, como se faz em aerodinâmica, de modo a não sofrer influências apreciáveis do escoamento, o que aumentaria o tamanho do domínio computacional. Outra opção seria implementar uma condição realmente dinâmica que modifique a intensidade turbulenta de acordo com as condições do escoamento próximas ao *farfield* e que sejam ainda assim estáveis e assintoticamente limitadas; ou como feito aqui, encontrar as condições ótimas que permitam a estabilidade. Esta última pode ser trabalhosa, pois devem se testar valores diferentes e esperar para ver o que ocorre, o que nem sempre pode ser possível. Foram necessárias cerca de 25 tentativas até se estabelecer estes valores ótimos.

Caso mudem as condições de operação, todos os passos devem ser revistos e verificar se ainda são aplicáveis e suficientes para permitir uma nova análise numérica.

6.2 Considerações Finais

A descrição, detalhamento e discussão crítica sobre o modelamento matemático de escoamentos multifásicos e da turbulência descritas neste trabalho foi um desafio intelectual,

e teve o intuito de permitir ao leitor o acesso a esse conhecimento “hermético” de uma maneira estruturada e didática

Esta discussão também traz em si uma grande compilação de artigos sobre problemas multifásicos das mais diferentes áreas e a princípio totalmente desvinculados, mas que ressaltam um aspecto ou outro do assunto e no todo se complementam, dando uma visão geral do assunto. Isto se deu principalmente à total ausência de trabalhos relacionados ao tema sendo, portanto, necessário desmembrar o problema em pequenas partes buscando fontes nas mais diversas áreas que as tratassem e em então concatená-las formando um todo harmônico.

Outro ponto importante é a suavização da interface na condição inicial. Este artifício se mostrou um dos mais poderosos no que diz respeito à estabilidade. A simples mudança da espessura de transição para valores menores, mesmo em regime laminar, ocasionava divergência do sistema linear, e com o modelo de turbulência isso era ainda mais crítico independentemente das condições de contorno do *farfield*. A espessura da transição escolhida intercepta pelo menos cinco espaçamentos de malha ao longo da interface numa região de 1cm de espessura.

Um tópico importante e detalhado no trabalho diz respeito ao método numérico, às vezes deixado à parte ou rapidamente tratado em outros trabalhos. Muitas dúvidas tiveram de ser sanadas durante a execução deste trabalho a respeito de como e o quê o ANSYS CFX[®] faz. Ao se responder a estas questões o modelo pôde ser resolvido corretamente. De nada adianta o uso de códigos comerciais como “caixas pretas” se a matemática (e a física descrita por ela) e a metodologia numérica empregadas não são conhecidas.

Este trabalho também demonstrou que é possível utilizar o modelo homogêneo para este tipo de problema, o que até o início deste trabalho era uma dúvida. Isto pode ser feito desde que a sua aplicação seja sempre criteriosa e as recomendações da metodologia desenvolvida sejam seguidas.

Este problema também serviu para enfatizar a importância de se avaliar a interação dinâmica entre o jato e a superfície livre e como ela afeta a operação. Esta abordagem até hoje foi feita somente em modelos físicos. Como demonstrado, as outras abordagens numéricas geram sempre resultados simétricos e bem comportados. Além disto, não se tem conhecimento de trabalhos similares que tenham aplicado um modelamento multifásico a este problema ou similar, sendo, portanto, inovador neste sentido.

Apesar da questão fundamental da erosão do refratário ainda continuar aberta e não ser abordada diretamente pelo modelo, os resultados do comportamento hidrodinâmico evidenciaram uma relação entre o escoamento e o desgaste. E espera-se que estes resultados possam encaminhar e direcionar novas pesquisas e novas simulações no assunto.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABRUNHOSA, J. D. M. **Simulação de Escoamento Turbulento Complexo com Modelagem Clássica e de Grandes Escalas**. 2003. 409 p. Doutorado (Engenharia Mecânica). Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2003. 409 p.
- AEA, L. **CFX-TASCflow Computational Fluid Dynamics Software: Theory Documentation** 2002.
- ANSYS. **ANSYS CFX Release 10.0 Manual**. 2004.
- _____. **ANSYS CFX Release 11.0 Manual**. 2007.
- BARBOSA JR, J. R. Turbulência em sistemas bifásicos gás-líquido. In: III Escola de Primavera de Transição e Turbulência, Florianópolis. **Proceedings of III Escola de Primavera de Transição e Turbulência**. Florianópolis: UFSC, 2002. p.451.
- BARKHUDAROV, M. R. **Lagrangian VOF Advection Method for FLOW-3D**. In: Flow Science. July. 2004.
- BARTH, T. J. e D. C. JESPERSEN. The Design and Application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes. **AIAA**, v.89, n.0366. 1989.
- BEGNIS, J. S. S., E. BRANDALEZE e R. TOPOLEVSKY. Simulación del canal del alto forno nº2 por medio de modelos físicos. In: 5ª Conferencia de Reducción del IAS, Argentina. **Proceedings of 5ª Conferencia de Reducción del IAS**. Argentina. Noviembre, 2005. p.177-186.
- BEJAN, A. **Convection heat transfer**. 3rd ed. Hoboken, N.J.: Wiley 2004. xxxi, 694 p.
- BLAZEK, J. **Computational fluid dynamics: principles and applications**. 1st ed. Amsterdam ; New York: Elsevier. 2001. XX, 440 p.
- BOUSSINESQ, J. Essai sur la théorie des aux courantes. **Mem. Présentés Acad. Sci.**, v.23, n.46. 1877.
- BRACKBILL, J. U., D. B. KOTHE e C. ZEMACH. A continuum method for modeling surface tension. **Journal of Computational Physics**, v.100, n.2, p.335-354. 1992.
- BRASIL JR, A. C. P. Elementos Finitos Aplicados à Turbulência. In: ABCM. **Turbulência**. Rio de Janeiro: A. P. S. Freire, P. P. M. Menut, *et al*, 1998. p. 292.
- BURNS, A. D. **Computational fluid dynamics modeling of multi-phase flows**. In: Multiphase Flow Course. Alpha-Beta Numerics, Lecture Notes. 2002.
- CELIK, I. B. **Introductory Turbulence Modeling**. In: West Virginia University Mechanical & Aerospace Engineering Dept., Lecture Note, p.100. 1999.
-

- CHAHED, J., V. ROIG e L. MASBERNAT. Eulerian-Eulerian two-fluid model for turbulent gas-liquid bubbly flows. **International Journal of Multiphase Flow**, v.29, n.1, p.23-49. 2003.
- CHANSON, H. Air bubble entrainment in open channels: Flow structure and bubble size distributions. **International Journal of Multiphase Flow**, v.23, n.1, p.193-203. 1997.
- CHUNG, Y. e A. W. CRAMB. Direct observation of spontaneous emulsification and associated interfacial phenomena at the slag-steel interface. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v.356, n.1739, p.981-993. 1998.
- CORDAZZO, J. **Simulação de Reservatórios de Petróleo Utilizando o método EbFVM e Multigrid Algébrico**. 2006. 272 p. Tese (Doutorado). Eng. Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2006. 272 p.
- COURANT, R., K. FRIEDRICHS e H. LEWY. On the Partial Difference Equations of Mathematics Physics. **IBM Journal**, p.215-234. 1967.
- CROWE, C. T., T. R. TROUTT e J. N. CHUNG. Numerical Models for Two-Phase Turbulent Flows. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v.28, n.1, p.11-43. 1996.
- DAOUD, I. L. A., *et al.* Nova Metodologia Numérica para Obtenção de Tempos e Volumes Característicos em Distribuidores de Lingotamento Contínuo In: XXXVII Seminário de Aciaria - Internacional, Porto alegre. **Proceedings of XXXVII Seminário de Aciaria - Internacional**. Porto alegre: ABM - Associação Brasileira de Metalurgia, 2006. p.406 - 415.
- DARWISH, M. S. e F. MOUKALLED. TVD schemes for unstructured grids. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.46, n.4, p.599-611. 2003.
- DESCHAMPS, C. J. Modelos Algébricos e Diferenciais. In: ABCM. **Turbulência**. Rio de Janeiro: A. P. S. Freire, P. P. M. Menut, *et al.*, 1998. v.Único. p. 99 -156.
- DICK, A. F., *et al.* Attack of Submerged entry Nozzles by Mould Flux and Dissolution of Refractory Oxides in the Flux. **ISIJ International**, v.37, n.2, p.101-108. 1997.
- DREW, D. A. Mathematical flow modeling of two-phase flow. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v.15, p.261-291. 1983.
- _____. Effect of particle velocity fluctuations on the inertia coupling in two-phase flow. In: Constitutive Relationships and Models in Continuum Theories of Multiphase Flows, Huntsville, Alabama. **Proceedings of Constitutive Relationships and Models in Continuum Theories of Multiphase Flows**. Huntsville, Alabama: NASA George C. Marshall Space Flight Center, 1989. p.172.
- _____. Analytical modeling of multiphase flows. In: Elsevier Science Publishers. **Boiling Heat Transfer : Modern Developments and Advances**. Amsterdam; New York: R. T. Lahey, 1992. p. 31 - 83.
- EUSTATHOPOULOS, N., J. P. GARANDET e B. DREVET. Influence of reactive solute transport on spreading kinetics of alloy droplets on ceramic surfaces. **Philosophical**
-

- Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v.356, n.1739, p.871-884. 1998.
- GALPIN, P. F. e G. D. RAITHBY. Numerical Solution of Problems in Incompressible Fluid Flow: Treatment of the Temperature-Velocity Coupling. **Numerical Heat Transfer**, v.10, p.105-129. 1986.
- GEORG, I. C., R. V. P. REZENDE e C. R. MALISKA. Estudo Numérico do Escoamento Ascendente de uma Bolha de Gás em um Meio Líquido. In: EBECEM - 1º Encontro Brasileiro sobre Ebulição, Condensação e Escoamento Líquido-Gás, Florianópolis. **Proceedings of EBECEM - 1º Encontro Brasileiro sobre Ebulição, Condensação e Escoamento Líquido-Gás**. Florianópolis: ABCM, 2008.
- GERMANO, M., *et al.* A dynamic sub-grid eddy viscosity model. **Physics of Fluids A**, v.3, n.7. 1991.
- GIDASPOW, D. **Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions**. Boston: Academic Press. 1994. XX, 467 p.
- GONDOLF, M., J. P. RANDAL e M. S. LANGE. Numerical modeling of the wear in blast furnace main troughs. In: The Unified International Technical Conference on Refractories, Mexico. **Proceedings of The Unified International Technical Conference on Refractories**. Mexico, 2001. p.841-845.
- HE, Q., *et al.* Flow characteristics in a blast furnace trough. **ISIJ International**, v.42, n.8, p.844-851. 2002a.
- _____. Flow characteristics of a blast furnace taphole stream and its effects on trough refractory wear. **ISIJ International**, v.42, n.3, p.235-242. 2002b.
- HIRATA, T., *et al.* Improvement of the corrosion resistance of alumina-chromia ceramic materials in molten slag. **Journal of the European Ceramic Society**, v.23, n.12, p.2089-2096. 2003.
- HIRT, C. W. **The Modeling of Shallow Flows**. In: Flow Science, Inc. Technical Note: TN48. 1999.
- HIRT, C. W. e B. D. NICHOLS. Volume of Fluid (VOF) method for dynamics of free surface boundaries. **Journal of Computational Physics**, v.39, p.201-225. 1981.
- HOLST, M. J. **Notes on the KIVA-II Software and Chemically Reactive Fluid Mechanics**. In: University of Illinois, Technical Report, p.45. 1992.
- HONG, L. e V. SAHAJWALLA. Investigation of *in-situ* Chemical Reactions of Al₂O₃-SiC-SiO₂-C Refractory and Its Interactions with Slag. **ISIJ International**, v.44, n.5, p.785-789. 2004.
- HUBBLE, D. H., *et al.* Steelmaking Refractories. In: AISE Steel Foundation. **The making, shaping, and treating of steel**. Pittsburgh, PA: R. J. Fruehan, 1998. p. 64.
- HUNT, J. C. R. e J. C. VASSILICOS. Kolmogorov's Contributions to the Physical and Geometrical Understanding of Small-Scale Turbulence and Recent Developments.
-

Proceedings of the Royal Society: Mathematical and Physical Sciences (1990-1995), v.434, n.1890, p.183-210. 1991.

HUTTON, D. V. **Fundamentals of finite element analysis**. International. Boston: McGraw-Hill. 2004. xiv, 494 p. (McGraw-Hill series in mechanical engineering).

IBS. **Siderurgia Brasileira: Princípios e Políticas**. Disponível em: <<http://www.ibs.org.br/mercado.asp>>. Acesso em: 03 Fevereiro 2007a

_____. **Siderurgia: Investimentos e expansão da Produção**. Disponível em: <<http://www.ibs.org.br/mercado.asp>>. Acesso em: 03 Fevereiro 2007b

ISHII, M. e K. MISHIMA. Two-fluid model and hydrodynamic constitutive relations. **Nuclear Engineering and Design**, v.82, p.107-126. 1984.

JACKSON, D. e B. LAUNDER. Osborne Reynolds and the Publication of His Papers on Turbulent Flow. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v.39, n.1, p.19-35. 2007.

JACKSON, R. **The Dynamics of Fluidized Particles**. Cambridge University Press. 2000. 368 p.

JAKOBSSON, A., *et al.* Interfacial tension effects on slag-metal reactions. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v.356, n.1739, p.995-1001. 1998.

JONES, W. P. e B. E. LAUNDER. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.15, n.2, p.301-314. 1972.

_____. The calculation of low-Reynolds-number phenomena with a two-equation model of turbulence. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.16, n.6, p.1119-1130. 1973.

KASHIWA, B. A. e W. B. VANDERHEYDEN. **Toward a general Theory for Multiphase Turbulence**. In: Los Alamos National Laboratory, p.95. 2000.

KELLER, S. C. **O método multigrid de correções aditivas para a solução numérica acoplada das equações de Navier-Stokes com malhas não-estruturadas**. 2007. 140 p. Tese (Doutorado). Engenharia Mecânica, UNiversidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2007. 140 p.

KIM, H., B. OZTURK e R. J. FRUEHAN. Slag-metal separation in the blast furnace trough. **ISIJ International**, v.38, n.5, p.430-439. 1998.

KOLMOGOROV, A. N. Equations of Turbulent Motion of an Incompressible Fluid **Akad. Nauk. SSSR, Seria Fizicheskaya (Tradução: Imperial Colleg, Mech. Eng. Dept. Rept. ON/6,1968)**, v.6, n.1-2, p.56-58. 1942.

KUMAR, S. Heat Transfer Analysis and Estimation of Refractory Wear in an Iron Blast Furnace Hearth Using Finite Element Method. **ISIJ International**, v.45, n.8, p.1122-1128. 2005.

- LAHEY JR, R. T. The simulation of multidimensional multiphase flows. **Nuclear Engineering and Design**, v.235, n.10-12, p.1043-1060. 2005.
- LAHEY, R. T. e D. A. DREW. The analysis of two-phase flow and heat transfer using a multidimensional, four field, two-fluid model. **Nuclear Engineering and Design**, v.204, n.1-3, p.29-44. 2001.
- LAUNDER, B. E. e D. B. SPALDING. The Numerical Computation of Turbulent Flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.3, p.269-289. 1974.
- LESIEUR, M. e O. METAIS. New Trends in Large-Eddy Simulations of Turbulence. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v.28, n.1, p.45-82. 1996.
- LEVICH, E. **Certain Problems in the theory of developed hydrodynamical turbulence**. In: Physics Reports. The Benjamin Levich Institute for Physico-Chemical Hydrodynamics, p.129-238. 1987.
- LI, B. Q. **Discontinuous finite elements in fluid dynamics and heat transfer**. London: Springer. 2006. XVII, 578 p.
- LI, Z., K. MUKAI e Z. TAO. Reactions between MgO-C refractory, molten slag and metal. **ISIJ International**, v.40, n.Suplement, p.S101-S105. 2000.
- LOGUNOV, A. V., S. N. SANNIKOVA e E. S. LUKIN. Oxidation Resistance in Structural Ceramics Based on Refractory Materials. **Refractories and Industrial Ceramics**, v.47, n.1, p.58-62. 2006.
- LOPEZ DE BERTODANO, M., R. T. LAHEY JR e O. C. JONES. Development of k- ϵ model for bubbly two-phase flow. **Journal of Fluid Engineering**, v.116, p.128-134. 1994.
- LUOMALA, M. J., *et al.* Modelling of fluid in the blast furnace trough. **Stell Research**, v.72, n.4, p.130-135. 2001.
- MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. 2ª edição. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos. 2004. xv, 453 p.
- MALISKA, C. R. e J. F. V. DE VASCONCELLOS. An unstructured finite volume procedure for simulating flows with moving fronts. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v.182, n.3-4, p.401-420. 2000.
- MALISKA, C. R., *et al.* Interface Forces Calculation for Multiphase Flow Simulation. In: EBECEM - 1º Encontro Brasileiro sobre Ebulição, Condensação e Escoamento Líquido-Gás, Florianópolis. **Proceedings of EBECEM - 1º Encontro Brasileiro sobre Ebulição, Condensação e Escoamento Líquido-Gás**. Florianópolis: ABCM, 2008.
- MARONNIER, V., M. PICASSO e J. RAPPAZ. Numerical Simulation of Free Surface Flows. **Journal of Computational Physics**, v.155, n.2, p.439-455. 1999.
- MENDES, R. **Análise do acoplamento pressão-velocidade nas equações de Navier-Stokes utilizando o método dos volumes finitos baseado em elementos e solução acoplada**.
-

2007. 114 p. Dissertação (Mestrado). Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2007. 114 p.

MENTER, F. R. **Improved two-equation k-omega turbulence models for aerodynamics flows**. In: NASA, Technical Report: A-92183; NAS 1.15103975; NASA-TM-103975, p.38. 1992.

_____. Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. **AIAA Journal Paper 81-0045R**, v.32, n.8, p.1598-1605. 1994.

_____. Near wall treatment and heat transfer. In: 2006 ESSS South American ANSYS Users Conference, Florianópolis. **Proceedings of 2006 ESSS South American ANSYS Users Conference**. Florianópolis, 2006.

MENTER, F. R. e H. GROTHJANS. **Application of Advanced Turbulence Models to Complex Industrial Flows**. In: AEA Tchnology GmbH, Technical Report. 2004.

MENTER, F. R., M. KUNTZ e R. LANGTRY. Ten Years of Industrial Experience with the SST Turbulence Model. In: Begell House, Inc. **Turbulence, Heat and Mass Transfer 4**. K. Hanjalic, Y. Nagano, *et al*, 2003. p. 1208.

MUKAI, K. Marangoni flows and corrosion of refractory walls. **Philosophical Transactions of The Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v.366, n.1739, p.1015-1026. 1998.

MUKAI, K., *et al*. A Mechanism for the local corrosion of Immersion Nozzles. **ISIJ International**, v.29, n.6. 1989.

NGUYEN, A. V. e G. M. EVANS. Computational fluid dynamics modelling of gas jets impinging onto liquid pools. **Applied Mathematical Modelling**, v.30, n.11, p.1472-1484. 2006.

NIKITOPULOS, D. E. e E. E. MICHAELIDES. Phenomenological Model for Dispersed Bubbly Flow Pipes. **Applied International Chemical Engineering**, v.41, n.1, p.12-22. 1995.

NIKRITYUK, P. e F. R. MENTER. **Implementation of the KE1E turbulence model in CFX-5**. In: AEA Tchnology GmbH. 2002.

OKHOTSKII, V. B. Models for Local Wear of the Lining of a Converter. **Refractories and Industrial Ceramics**, v.42, n.11-12, p.411-416. 2001.

PALADINO, E. E. **Estudo do escoamento multifásico em medidores de vazão do tipo pressão diferencial** 2005. 263 p. Tese (Doutorado). Depto. Eng. Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2005. 263 p.

PASSMAN, S. L. Stress in Dilute Suspensions. In: Constitutive Relationships and Models in Continuum Theories of Multiphase Flows, Huntsville, Alabama. **Proceedings of Constitutive Relationships and Models in Continuum Theories of Multiphase Flows**. Huntsville, Alabama: NASA George C. Marshall Space Flight Center, 1989. p.172.

- PATANKAR, N. A. e D. D. JOSEPH. Lagrangian numerical simulation of particulate flows. **International Journal of Multiphase Flow**, v.27, n.10, p.1685-1706. 2001.
- PFLEGER, D. e S. BECKER. Modelling and simulation of the dynamic flow behaviour in a bubble column. **Chemical Engineering Science**, v.56, n.4, p.1737-1747. 2001.
- PFLEGER, D., *et al.* Hydrodynamic simulations of laboratory scale bubble columns fundamental studies of the Eulerian-Eulerian modelling approach. **Chemical Engineering Science**, v.54, n.21, p.5091-5099. 1999.
- PILIPCHATIN, L. D. Dissolution of alumina-Silicate Refractories in Slag Melts. **Refractories and Industrial Ceramics**, v.44, n.4. 2003.
- REYNOLDS, O. An Experimental Investigation of the Circumstances Which Determine Whether the Motion of Water Shall Be Direct or Sinuous, and of the Law of Resistance in Parallel Channels. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London (1776-1886)**, v.174, n.-1, p.935-982. 1883a.
- _____. An Experimental Investigation of the Circumstances Which Determine Whether the Motion of Water Shall Be Direct or Sinuous, and of the Law of Resistance in Parallel Channels. **Proceedings of the Royal Society of London (1854-1905)**, v.35, n.-1, p.84-99. 1883b.
- _____. On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London. A (1887-1895)**, v.186, n.-1, p.123-164. 1895.
- RICCI, E., L. NANNI e A. PASSERONE. Oxygen transport and dynamic surface tension of liquid metals. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v.356, n.1739, p.857-870. 1998.
- RODI, W. Examples of Turbulence Models for Incompressible Flows. **AIAA Journal, Paper 81-0045R**, v.20, n.7, p.872-879. 1981.
- RODI, W. e G. SCHEURER. Scrutinizing the k- ϵ Turbulence Model Under Adverse Pressure Gradient Conditions. **Journal of Fluid Engineering**, v.108, p.174-179. 1986.
- ROVNUSHKIN, V. A., *et al.* Composition of Ladle Slag and Refractory Materials and Its Effect on the Wear Resistance of the Lining of an RH Vacuum Degasser. **Refractories and Industrial Ceramics**, v.46, n.3, p.193-196. 2005.
- SCARDOVELLI, R. e S. ZALESKI. Direct Numerical Simulation of Free-Surface and Interfacial Flow. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v.31, n.1, p.567-603. 1999.
- SHEN, H. H. e G. J. HWANG. Interpretation and Modeling of the Average Equations for a Fluid-Solid Flow. In: Constitutive Relationships and Models in Continuum Theories of Multiphase Flows, Huntsville, Alabama. **Proceedings of Constitutive Relationships and Models in Continuum Theories of Multiphase Flows**. Huntsville, Alabama: NASA George C. Marshall Space Flight Center, 1989. p.172.
- SHESTOPALOV, I. I., *et al.* Improving separation of melting products in the main trough of a blast furnace. **Metallurgy**, v.6, p.32-33. 1988.
-

- SILVA, A. P. e D. O. A. CRUZ. Equações do Movimento e Resultados Assintóticos Aplicados à Teoria de Camada Limite. In: ABCM. **Turbulência**. Rio de Janeiro: A. P. S. Freire, P. P. M. Menut, *et al*, 1998. p. 292.
- SILVA, R. F. A. F., *et al*. Aplicação de Ferramentas de Otimização e Dinâmica dos Fluidos Computacional em um Distribuidor de Lingotamento Contínuo. In: XXXVII Seminário de Aciaria - Internacional, Porto Alegre. **Proceedings of XXXVII Seminário de Aciaria - Internacional**. Porto Alegre: ABM -Associação Brasileira de Metalurgia, 2006. p.564 - 573.
- SILVEIRA NETO, A. Fundamentos da Turbulência nos Fluidos. In: ABCM. **Turbulência**. Rio de Janeiro: A. P. S. Freire, P. P. M. Menut, *et al*, 1998a. p. 292.
- _____. Simulação de Grandes Escalas de Escoamentos Turbulentos. In: ABCM. **Turbulência**. Rio de Janeiro: A. P. S. Freire, P. P. M. Menut, *et al*, 1998b. p. 292.
- _____. **Turbulência nos Fluidos Aplicada**. 2005.
- SMAGORINSKY, J. General Circulation Experiments With the Primitive Equations. **Monthly Weather Review**, v.91, n.3, p.99 -164. 1963.
- STEVENSON, P. e Q. HE. Slug flow in a blast furnace taphole. **Chemical Engineering and Processing**, v.44, n.10, p.1094-1097. 2005.
- SUVOROV, S. A. e P. V. PLYUKHIN. Attack of Molten Slag on Refractory. **Refractories and Industrial Ceramics**, v.46, n.4, p.253-255. 2005.
- TAKATANI, K., T. INADA e K. TAKATA. Mathematical Model for Transient Erosion Process of Blast Furnace Hearth. **ISIJ International**, v.41, n.10, p.1139-1145. 2001.
- THOMAS, B. G. e L. ZHANG. Mathematical Modeling of Fluid in Continuous Casting Mold. **ISIJ International**, v.41, n.10, p.1181-1193. 2001.
- TRIANAFYLLIDIS, D., F. H. STOTT e L. LI. The Slag Corrosion Behavior of Laser Surface Treated Refractory Ceramics. **The Journal of Corrosion Science and Engineering**, v.6, p.H051. 2003.
- TROSHKO, A. A. e Y. A. HASSAN. Law of the wall for two-phase turbulent boundary layers. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.44, n.4, p.871-875. 2001a.
- _____. A two-equation turbulence model of turbulent bubbly flows. **International Journal of Multiphase Flow**, v.27, n.11, p.1965-2000. 2001b.
- TSAI, W. e D. K. P. YUE. Computation of Nonlinear Free-Surface Flows. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v.28, n.1, p.249-278. 1996.
- WHITAKER, S. **The Method of Volume Averaging**. Norwell: Springer. 1999. 240 p. (Theory and Applications of Transport in Porous Media).
- WILCOX, D. C. **Turbulence modeling for CFD**. 2nd ed. La Cañada, California: DCW Industries, Inc. 1994. xix, 460 p.
-

-
- YUAN, Z. F., W. L. HUANG e K. MUKAI. Local Corrosion of Magnesia-Chrome Refractories Driven by Marangoni Convection at the Slag-Metal Interface. **Journal of Colloid and Interface Science**, v.253, n.1, p.211-216. 2002.
- ZHANG, D., N. G. DEEN e J. A. M. KUIPERS. Numerical simulation of the dynamic flow behavior in a bubble column: A study of closures for turbulence and interface forces. **Chemical Engineering Science**, v.61, n.23, p.7593-7608. 2006.
-

APÊNDICES

APÊNDICE

1

DETALHAMENTOS DA MODELAGEM MATEMÁTICA: NOTAÇÃO INDICIAL E OPERADORES

Visto a notação indicial ser usada ao longo do trabalho e é sabido que nem todos tem familiaridade com a mesma, uma breve descrição da notação e de algumas das regras é dada de forma a permitir ao leitor uma base teórica elementar.

A1.1 Definições

1. Dois índices repetidos indicam uma soma para os índices. Assumindo o espaço \mathbb{R}^3 , os índices variam de um a três, ou seja,

$$a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3. \quad (\text{A1.1})$$

2. Índices repetidos podem ser trocados por qualquer outro índice, assim,

$$a_i b_i = a_j b_j = a_k b_k = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3. \quad (\text{A1.2})$$

3. Não é permitido mais de dois índices repetidos em uma dada representação, pois ela é ambígua,

$$\cancel{a_i b_i c_i}. \quad (\text{A1.3})$$

4. Índices repetidos são chamados de *índices mudos*; e índices não repetidos, de *índices livres*,

$$a_i b_j c_j = \sum_{i=1}^3 a_i (b_1 c_1 + b_2 c_2 + b_3 c_3), \quad (\text{A1.4})$$

5. O número de termos associados a uma certa representação indicial é 3^n , sendo n o número de *índices livres*,

$$\begin{array}{llll}
 \phi & \rightarrow & 1 \text{ termo} & \rightarrow \text{ ordem } 0 \\
 A_i & \rightarrow & 3 \text{ termos} & \rightarrow \text{ ordem } 1 \\
 a_{ij} & \rightarrow & 9 \text{ termos} & \rightarrow \text{ ordem } 2 \\
 \vdots & & \vdots & \vdots \\
 b_{ijkl} & \rightarrow & 81 \text{ termos} & \rightarrow \text{ ordem } 4
 \end{array} \quad (\text{A1.5})$$

6. Os índices livres de uma equação devem ser os mesmos para que a mesma faça sentido,

$$a_i b_j c_j + d_k e_i = \sum_{i=1}^3 [a_i (b_1 c_1 + b_2 c_2 + b_3 c_3) + (d_1 + d_2 + d_3) e_i]. \quad (\text{A1.6})$$

Já a representação $a_p b_j c_j + d_k e_i = ?$

7. Delta de Krönecker:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 \rightarrow i \neq j \\ 1 \rightarrow i = j \end{cases}. \quad (\text{A1.7})$$

Com a seguinte propriedade: $\delta_{ij} = \delta_{11} + \delta_{22} + \delta_{33} = 3$.

8. Operação de contração de índices:

$$\begin{aligned} \delta_{ij} a_j &= \delta_{11} a_1 + \delta_{22} a_2 + \delta_{33} a_3 = a_1 + a_2 + a_3 \\ \therefore \delta_{ij} a_j &= a_i \end{aligned} \quad (\text{A1.8})$$

Pois os índices cruzados são nulos de acordo com a Eq.(A1.7). Então

$$\delta_{\overline{ij}k} a_i b_{\overline{j}} = a_i b_k. \quad (\text{A1.9})$$

9. Vetores de base unitários:

$$\hat{\mathbf{e}} = \sum_{i=1}^n \hat{\mathbf{e}}_i. \quad (\text{A1.10})$$

10. Representação de vetores no espaço \mathbb{R}^3 :

$$\mathbf{u} = u_i \hat{\mathbf{e}}_i = u_1 \hat{\mathbf{e}}_1 + u_2 \hat{\mathbf{e}}_2 + u_3 \hat{\mathbf{e}}_3. \quad (\text{A1.11})$$

Que no sistema cartesiano ortogonal é geralmente escrito como

$$\mathbf{u} = u_i \hat{\mathbf{e}}_i = u \hat{\mathbf{i}} + v \hat{\mathbf{j}} + w \hat{\mathbf{k}}. \quad (\text{A1.12})$$

11. Produto escalar ou produto interno entre dois vetores

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u_i \hat{\mathbf{e}}_i \cdot v_j \hat{\mathbf{e}}_j. \quad (\text{A1.13})$$

Os escalares u_i e v_j não são operados, apenas os vetores de base, com a seguinte propriedade:

$$\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j = \delta_{ij} \quad (\text{A1.14})$$

Assim, usando (A1.14) e a contração de índice dada em (A1.9), tem-se

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u_i v_j (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j) = u_{\overline{ij}} v_j \delta_{\overline{ij}} = u_j v_j. \quad (\text{A1.15})$$

Que resulta num escalar $u_i v_j$.

12. Representação de tensores de segunda ordem:

$$\overline{\mathbf{T}} = T_{ij} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j. \quad (\text{A1.16})$$

13. Produto escalar entre um vetor e um tensor:

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{u} &= T_{ij} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j \cdot u_k \hat{\mathbf{e}}_k = T_{ij} u_k \hat{\mathbf{e}}_i (\hat{\mathbf{e}}_j \cdot \hat{\mathbf{e}}_k) \\ \bar{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{u} &= T_{ij} u_{[k]} \hat{\mathbf{e}}_i \delta_{j[k]} = T_{ij} u_j \hat{\mathbf{e}}_i\end{aligned}\quad (\text{A1.17})$$

Que resulta em um vetor $T_{ij} u_j \hat{\mathbf{e}}_i$. Note que $\bar{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{u} \neq \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{T}}$, pois

$$\begin{aligned}\mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{T}} &= u_k \hat{\mathbf{e}}_k \cdot T_{ij} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j = u_k T_{ij} (\hat{\mathbf{e}}_k \cdot \hat{\mathbf{e}}_i) \hat{\mathbf{e}}_j \\ \mathbf{u} \cdot \bar{\mathbf{T}} &= u_k T_{[ij]} \delta_{k[i]} \hat{\mathbf{e}}_j = u_k T_{kj} \hat{\mathbf{e}}_j\end{aligned}\quad (\text{A1.18})$$

14. Produto escalar ou interno tensorial entre tensores de 2ª ordem:

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{P}} : \bar{\mathbf{T}} &= P_{ij} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j : T_{nk} \hat{\mathbf{e}}_n \hat{\mathbf{e}}_k = P_{ij} T_{nk} (\hat{\mathbf{e}}_j \cdot \hat{\mathbf{e}}_n) (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_k) \\ \bar{\mathbf{P}} : \bar{\mathbf{T}} &= P_{ij} T_{nk} \delta_{jn} \delta_{ik} = P_{in} T_{ni}\end{aligned}\quad (\text{A1.19})$$

Que resulta em um escalar.

15. Produto diádico entre dois vetores ou tensores de 1ª ordem:

$$\begin{aligned}\mathbf{u} \otimes \mathbf{v} &= u_i \hat{\mathbf{e}}_i \otimes v_j \hat{\mathbf{e}}_j = u_i v_j (\hat{\mathbf{e}}_i \otimes \hat{\mathbf{e}}_j) \\ \mathbf{u} \otimes \mathbf{v} &= u_i v_j \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j\end{aligned}\quad (\text{A1.20})$$

Ou simplesmente,

$$\mathbf{u} \otimes \mathbf{v} = \mathbf{uv} . \quad (\text{A1.21})$$

Que não deve ser confundido com uma multiplicação ordinária, pois esta operação resulta em uma grandeza tensorial de 2ª ordem.

16. Operador Vetorial Nabla:

$$\nabla() \equiv \hat{\mathbf{e}}_i \frac{\partial}{\partial x_i} () = \frac{\partial}{\partial x_1} () \hat{\mathbf{e}}_1 + \frac{\partial}{\partial x_2} () \hat{\mathbf{e}}_2 + \frac{\partial}{\partial x_3} () \hat{\mathbf{e}}_3 . \quad (\text{A1.22})$$

Que em coordenadas cartesianas ortogonais é geralmente escrito como:

$$\nabla() \equiv \hat{\mathbf{e}}_i \frac{\partial}{\partial x_i} () = \frac{\partial}{\partial x} () \hat{\mathbf{i}} + \frac{\partial}{\partial y} () \hat{\mathbf{j}} + \frac{\partial}{\partial z} () \hat{\mathbf{k}} . \quad (\text{A1.23})$$

Uma outra forma ainda mais compacta de representar e também utilizada neste trabalho é a seguinte:

$$\nabla() \equiv \hat{\mathbf{e}}_i \partial_i () = \hat{\mathbf{e}}_1 \partial_1 () + \hat{\mathbf{e}}_2 \partial_2 () + \hat{\mathbf{e}}_3 \partial_3 () . \quad (\text{A1.24})$$

Onde $\partial_i()$ representa a derivada parcial do operando em relação às coordenadas espaciais x_i .

Esta notação também é usada para derivadas em relação à coordenada temporal,

$$\frac{\partial}{\partial t} () = \partial_t () . \quad (\text{A1.25})$$

17. Operador Laplaciano:

$$\begin{aligned}\nabla(\cdot) \cdot \nabla(\cdot) &= \hat{\mathbf{e}}_i \partial_i (\cdot) \cdot \hat{\mathbf{e}}_j \partial_j (\cdot) = \partial_i \partial_j (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j) (\cdot) \\ \nabla(\cdot) \cdot \nabla(\cdot) &= \partial_i \partial_j \delta_{ij} (\cdot) = \partial_i \partial_i (\cdot) = \partial_i^2 (\cdot) \\ \nabla(\cdot) \cdot \nabla(\cdot) &= \nabla^2 (\cdot)\end{aligned}\quad (\text{A1.26})$$

18. Gradiente de um campo escalar

$$\nabla(\phi) \equiv \hat{\mathbf{e}}_i \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi) = \frac{\partial \phi}{\partial x_1} \hat{\mathbf{e}}_1 + \frac{\partial \phi}{\partial x_2} \hat{\mathbf{e}}_2 + \frac{\partial \phi}{\partial x_3} \hat{\mathbf{e}}_3. \quad (\text{A1.27})$$

O qual resulta num campo vetorial.

19. Gradiente de um campo vetorial

$$\begin{aligned}\nabla(\mathbf{u}) &= \hat{\mathbf{e}}_i \partial_i (u_j \hat{\mathbf{e}}_j) = \hat{\mathbf{e}}_i \partial_i (u_j) \hat{\mathbf{e}}_j + \cancel{\hat{\mathbf{e}}_i u_j \partial_i (\hat{\mathbf{e}}_j)} \\ \nabla(\mathbf{u}) &= \partial_i (u_j) \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j = \begin{bmatrix} \partial_1 u_1 & \partial_1 u_2 & \partial_1 u_3 \\ \partial_2 u_1 & \partial_2 u_2 & \partial_2 u_3 \\ \partial_3 u_1 & \partial_3 u_2 & \partial_3 u_3 \end{bmatrix} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j.\end{aligned}\quad (\text{A1.28})$$

Que resulta numa grandeza tensorial. Para o sistema cartesiano ortogonal a segunda parcela é nula, pois os vetores de base não variam com a posição o que não é verdade para sistemas curvilíneos.

20. Divergente de um campo vetorial

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\mathbf{u}) &= \hat{\mathbf{e}}_i \partial_i \cdot (u_j \hat{\mathbf{e}}_j) = \partial_i (u_j) (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j) \\ \nabla \cdot (\mathbf{u}) &= \partial_i u_j \delta_{ij} = \partial_i u_i.\end{aligned}\quad (\text{A1.29})$$

Que resulta em uma grandeza escalar.

21. Divergente de um campo tensorial

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\bar{\mathbf{T}}) &= \hat{\mathbf{e}}_i \partial_i \cdot (T_{jk} \hat{\mathbf{e}}_j \hat{\mathbf{e}}_k) = \partial_i (T_{jk}) (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j) \hat{\mathbf{e}}_k \\ \nabla \cdot (\bar{\mathbf{T}}) &= \partial_i T_{jk} \delta_{ij} \hat{\mathbf{e}}_k = \partial_i T_{ik} \hat{\mathbf{e}}_k.\end{aligned}\quad (\text{A1.30})$$

Que resulta em uma grandeza vetorial.

A1.2 Bibliografia

ARIS, R. **Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics**. New York: Dover Publications, Inc. 1962. xxv, 286 p.

APÊNDICE

2

DETALHAMENTOS DA MODELAGEM MATEMÁTICA: ABORDAGEM EULERIANA

A2.1 Variável Característica ou Indicadora de Fase

Seja definida a variável característica de fase, χ_k , que indica a presença da fase α em um ponto \mathbf{x} do domínio em um tempo t .

$$\chi_\alpha(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{se em } t \quad \mathbf{x} \in a \quad \alpha \\ 0 & \text{se em } t \quad \mathbf{x} \notin a \quad \alpha \end{cases} \quad (\text{A2.1})$$

A derivada material da função característica de fase seguindo a interface é dada por

$$\frac{D_i \chi_\alpha}{Dt} = \frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_i \cdot \nabla \chi_\alpha = 0. \quad (\text{A2.2})$$

Para pontos fora da interface $\chi_\alpha = 0$, e sobre a interface $\chi_\alpha = 1$, sendo as derivadas parciais nulas em ambos os casos. Na interface, com um referencial na mesma velocidade, a função se comporta como um pulso, ou uma descontinuidade e sua derivada material deve ser, portanto, nula.

A2.2 Promediação Espacial Instantânea (*Volume Average*)

Como o movimento das interfaces pode assumir um comportamento não estacionário no espaço, torna-se difícil descrever local e instantaneamente o escoamento. Um procedimento de média espacial permite a descrição do comportamento médio deste tipo de escoamento no espaço similarmente ao comportamento médio de um escoamento turbulento.

Definindo-se o domínio de fase $D_{\alpha n}$ como o conjunto de pontos do domínio D_n ocupados pela fase α em um instante t , tem-se

$$D_{\alpha n} = \{ \mathbf{x} \in D_n : \chi_\alpha(\mathbf{x}, t) = 1 \}. \quad (\text{A2.3})$$

onde n é o número de dimensões do domínio.

Seja F_α um campo qualquer da fase α , podendo ser então definido os seguintes operadores de média espacial instantânea:

$$\llbracket F_\alpha \rrbracket \equiv \frac{1}{D_n} \int_{D_n} F_\alpha dD_n \quad \text{média espacial multifásica}, \quad (\text{A2.4})$$

$$\llbracket F_\alpha \rrbracket_\alpha \equiv \frac{1}{D_{n\alpha}} \int_{D_{n\alpha}} F_\alpha dD_n \quad \text{média espacial fásica.} \quad (\text{A2.5})$$

O operador $\llbracket \rrbracket$ representa a média no domínio ocupado por todas as fases, enquanto o operador $\llbracket \rrbracket_\alpha$ representa a média no domínio ocupado somente pela fase α .

Assim, pode-se definir a média espacial instantânea de $\chi_\alpha(\mathbf{x}, t)$ sobre o domínio D_n .

$$R_{\alpha n} \equiv \llbracket \chi_\alpha(\mathbf{x}, t) \rrbracket = \frac{D_{n\alpha}}{D_n}. \quad (\text{A2.6})$$

Assim, tem-se para um segmento L :

$$R_{\alpha 1} \equiv \frac{L_\alpha}{\sum L_\alpha} = \frac{L_\alpha}{L}. \quad (\text{A2.7})$$

Para uma superfície:

$$R_{\alpha 2} \equiv \frac{A_\alpha}{\sum A_\alpha} = \frac{A_\alpha}{A}. \quad (\text{A2.8})$$

Para um volume:

$$R_{\alpha 3} \equiv \frac{V_\alpha}{\sum V_\alpha} = \frac{V_\alpha}{V}. \quad (\text{A2.9})$$

A2.3 Promediação Temporal Local (*Time Average*)

Como um campo pode apresentar flutuações no espaço, ele também pode apresentar localmente flutuações no tempo. Para isto define-se de forma análoga a promediação volumétrica a promediação temporal local, contudo, o período de integração deve ser tal que o comportamento médio da variável no tempo não seja descaracterizado, ou seja, o intervalo de promediação deve ser muito maior que a escala de tempo de flutuação das fases e muito menor que a escala de tempo da variação média do escoamento.

Definindo-se então o tempo de promediação de fase T_α como uma fração do período de promediação T em que um ponto de interesse qualquer se encontra imerso na fase α por

$$T_\alpha = \{ \mathbf{x} \in T : \chi_\alpha(\mathbf{x}, t) = 1 \}. \quad (\text{A2.10})$$

Os seguintes operadores são então definidos:

$$\widehat{F}_\alpha \equiv \frac{1}{T} \int_T F_\alpha dt \quad \text{média temporal multifásica,} \quad (\text{A2.11})$$

$$\widetilde{F}_\alpha \equiv \frac{1}{T_\alpha} \int_{T_\alpha} F_k dt \quad \text{média temporal fásica.} \quad (\text{A2.12})$$

A partir do operador $\widehat{\quad}$ define-se a taxa de presença local, ou tempo de residência médio, γ_α como a média da variável característica de fase, $\chi_\alpha(\mathbf{x}, t)$, sobre o período de tempo T :

$$\gamma_\alpha \equiv \overline{\chi_\alpha(\mathbf{x}, t)} = \frac{T_\alpha}{T}. \quad (\text{A2.13})$$

A2.4 Promediação Conjunta (*Ensemble Average*)

Representa a média estatística e concilia a média temporal e espacial sendo, portanto um processo de promediação mais fundamental. É definida como

$$\langle F \rangle \equiv \int_E F(\mathbf{x}, t) dp, \quad (\text{A2.14})$$

onde dp é a probabilidade de ocorrência de um evento no conjunto de todos os possíveis eventos E . Assim, as médias temporais e espaciais são casos especiais de fenômenos estacionários e homogêneos, respectivamente.

Com base na hipótese de ergodicidade, todos os procedimentos de promediação são equivalentes, assim, os operadores $\llbracket \quad \rrbracket$, $\widehat{\quad}$, $\langle \quad \rangle$, representam procedimentos diferentes para se chegar a uma mesma formulação.

E, embora o operador $\langle \quad \rangle$ seja usado para representar o operador de média conjunta que é aplicada neste trabalho, na dedução e detalhamento das equações ele será substituído por uma outra notação também muito comum para médias, o operador $\overline{\quad}$, por uma razão simplesmente tipográfica, pois ele é mais compacto e permite uma economia de espaço durante a escrita das equações. Basta comparar $\langle \langle y \rangle \langle x \rangle \rangle$ com \overline{yx} . Não obstante, ambas tem o mesmo efeito algébrico.

Outra modificação diz respeito à notação tensorial que ao longo do trabalho é representado por uma letra maiúscula em negrito com uma barra superior. Esta barra será omitida para se evitar confusões com o operador de média. Assim, \mathbf{T} representa um tensor, e $\overline{\mathbf{T}}$ a sua média.

A2.5 Propriedades da Promediação

Seja F uma função qualquer, temos então

$$\overline{\frac{\partial F}{\partial t}} = \frac{\partial \overline{F}}{\partial t}, \quad (\text{A2.15})$$

$$\overline{\nabla F} = \nabla \overline{F}. \quad (\text{A2.16})$$

Dentro de cada fase

$$\overline{\chi_\alpha \frac{\partial F}{\partial t}} = \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha F} - F \frac{\partial \overline{\chi_\alpha}}{\partial t}, \quad (\text{A2.17})$$

$$\overline{\chi_\alpha \nabla F} = \nabla \overline{\chi_\alpha F} - \overline{F \nabla \chi_\alpha}. \quad (\text{A2.18})$$

A2.6 Equações de transporte

Para um escoamento monofásico ou para uma mistura envolvendo duas ou mais fases, as equações de transporte na sua forma canônica podem ser escritas da seguinte maneira

$$\frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \Phi = \nabla \cdot \mathbf{J} + \rho f, \quad (\text{A2.19})$$

onde Φ é a grandeza conservada, \mathbf{J} o seu fluxo f a sua fonte e \mathbf{u} o vetor velocidade.

Para a região de interface o fluxo da propriedade considerada deve ser conservado, então

$$[\rho \Phi (\mathbf{u} - \mathbf{u}_i) + \mathbf{J}] \cdot \hat{\mathbf{n}} = S_i^\phi, \quad (\text{A2.20})$$

onde \mathbf{u}_i é a velocidade da interface e $\hat{\mathbf{n}}$ o vetor normal unitário à superfície que define a interface. Na Tabela A2.1 são definidos os valores que cada um dos termos pode assumir:

Tabela A2.1. Variáveis das equações de conservação.

Equação de Conservação	Φ	\mathbf{J}	f	S_i^ϕ
massa	1	0	0	0
Quantidade de Movimento	\mathbf{u}	\mathbf{T}	\mathbf{g}	\mathbf{m}_i^σ

OBS.: O tensor tensor tensão \mathbf{T} está sem o traço superior somente para evitar confusão com o operador de média.

Para a obtenção das equações médias deve-se multiplicar a equação de conservação pela variável característica de fase e aplicar o operador de promediação, ou seja,

$$\overline{\chi_\alpha \frac{\partial \rho \Phi}{\partial t}} + \overline{\chi_\alpha \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \Phi} - \overline{\chi_\alpha \nabla \cdot \mathbf{J}} - \overline{\chi_\alpha \rho f} = 0. \quad (\text{A2.21})$$

As variáveis instantâneas podem ser escritas como uma superposição de um campo médio mais uma flutuação:

$$\begin{aligned} \Phi &= \bar{\phi} + \phi' \\ \rho &= \bar{\rho} + \rho' \\ \mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' \\ \mathbf{J} &= \bar{\mathbf{J}} + \mathbf{J}' \end{aligned} \quad (\text{A2.22})$$

É relevante neste ponto assinalar algumas propriedades de interesse:

$$\begin{aligned}
\bar{x} &= \overline{\bar{x} + x'} = \bar{x} + \bar{x}' = \bar{x} + \bar{x}' = \bar{x}, \text{ pois } \bar{x}' = 0 \\
\overline{\bar{x} \bar{y}} &= \bar{x} \bar{y} = \bar{x} \bar{y} \\
\overline{\bar{x} y'} &= \bar{x} \bar{y}' = \bar{x} \bar{y}' = 0, \text{ pois } \bar{y}' = 0 \\
\overline{\bar{x} y} &= \overline{(\bar{x} + x')(\bar{y} + y')} = \bar{x} \bar{y} + \overline{\bar{x} y'} + \overline{x' \bar{y}} + \overline{x' y'} = \bar{x} \bar{y} + \overline{x' y'}
\end{aligned} \tag{A2.23}$$

O próximo passo é substituir a Eq.(A2.22) na Eq.(A2.21) e desenvolvendo termo a termo, tem-se para o termo transiente:

$$\chi_\alpha \frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} = \chi_\alpha \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} + \rho') (\bar{\phi} + \phi') = \chi_\alpha \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{\phi} + \rho' \phi').$$

Usando a Eq. (A2.17), temos

$$\chi_\alpha \frac{\partial \rho \Phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \chi_\alpha (\bar{\rho} \bar{\phi} + \rho' \phi') - (\bar{\rho} \bar{\phi} + \rho' \phi') \frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t}. \tag{A2.24}$$

Para o termo convectivo:

$$\begin{aligned}
\chi_\alpha \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \Phi &= \chi_\alpha \nabla \cdot (\bar{\rho} + \rho') (\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}') (\bar{\phi} + \phi') \\
&= \chi_\alpha \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{\mathbf{u}} \bar{\phi} + \bar{\rho} \bar{\mathbf{u}} \phi' + \bar{\rho} \mathbf{u}' \bar{\phi} + \bar{\rho} \mathbf{u}' \phi' + \rho' \bar{\mathbf{u}} \bar{\phi} + \rho' \bar{\mathbf{u}} \phi' + \rho' \mathbf{u}' \bar{\phi} + \rho' \mathbf{u}' \phi') \\
&= \chi_\alpha \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{\mathbf{u}} \bar{\phi} + \bar{\rho} \mathbf{u}' \phi' + \rho' \bar{\mathbf{u}} \bar{\phi} + \rho' \mathbf{u}' \phi')
\end{aligned}$$

Utilizando a Eq. (A2.18)

$$\begin{aligned}
\chi_\alpha \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \Phi &= \nabla \cdot \chi_\alpha (\bar{\rho} \bar{\mathbf{u}} \bar{\phi} + \bar{\rho} \mathbf{u}' \phi' + \rho' \bar{\mathbf{u}} \bar{\phi} + \rho' \mathbf{u}' \phi') + \dots \\
&\dots - (\bar{\rho} \bar{\mathbf{u}} \bar{\phi} + \bar{\rho} \mathbf{u}' \phi' + \rho' \bar{\mathbf{u}} \bar{\phi} + \rho' \mathbf{u}' \phi') \nabla \chi_\alpha
\end{aligned} \tag{A2.25}$$

Termo difusivo:

$$\begin{aligned}
\chi_\alpha \nabla \cdot \mathbf{J} &= \chi_\alpha \nabla \cdot (\bar{\mathbf{J}} + \mathbf{J}') = \chi_\alpha \nabla \cdot \bar{\mathbf{J}} + \chi_\alpha \nabla \cdot \mathbf{J}' \\
&= \nabla \cdot \chi_\alpha \bar{\mathbf{J}} - \bar{\mathbf{J}} \cdot \nabla \chi_\alpha + \nabla \cdot \chi_\alpha \mathbf{J}' - \mathbf{J}' \cdot \nabla \chi_\alpha
\end{aligned}$$

Assim,

$$\chi_\alpha \nabla \cdot \mathbf{J} = \nabla \cdot \chi_\alpha \bar{\mathbf{J}} - \bar{\mathbf{J}} \cdot \nabla \chi_\alpha - \mathbf{J}' \cdot \nabla \chi_\alpha. \tag{A2.26}$$

Substituindo as Eqs. (A2.24), (A2.25) e (A2.26) na Eq. (A2.21) temos

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t} \chi_\alpha (\bar{\rho} \bar{\phi} + \rho' \phi') - (\bar{\rho} \bar{\phi} + \rho' \phi') \frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t} + \dots \\
&\dots + \nabla \cdot \chi_\alpha (\bar{\rho} \bar{\mathbf{u}} \bar{\phi} + \bar{\rho} \mathbf{u}' \phi' + \rho' \bar{\mathbf{u}} \bar{\phi} + \rho' \mathbf{u}' \phi') + \dots \\
&\dots - (\bar{\rho} \bar{\mathbf{u}} \bar{\phi} + \bar{\rho} \mathbf{u}' \phi' + \rho' \bar{\mathbf{u}} \bar{\phi} + \rho' \mathbf{u}' \phi') \nabla \chi_\alpha - \nabla \cdot \chi_\alpha \bar{\mathbf{J}} + \bar{\mathbf{J}} \cdot \nabla \chi_\alpha + \dots \\
&\dots + \mathbf{J}' \cdot \nabla \chi_\alpha - \chi_\alpha (\bar{\rho} - \rho') f = 0
\end{aligned} \tag{A2.27}$$

Rearranjando os termos,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \bar{\phi})} + \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \mathbf{u} \bar{\phi})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha \bar{\mathbf{J}}} - \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} - \rho')} f = \\ & - \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\rho' \phi')} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \mathbf{u}' \phi' + \rho' \bar{\mathbf{u}} \phi' + \rho' \mathbf{u}' \bar{\phi} + \rho' \mathbf{u}' \phi')} \\ & + \overline{(\bar{\rho} \bar{\phi} + \rho' \phi') \frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t}} + \overline{(\bar{\rho} \bar{\phi} + \rho' \phi') (\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}') \cdot \nabla \chi_\alpha} - \overline{(\bar{\mathbf{J}} + \mathbf{J}') \cdot \nabla \chi_\alpha} \end{aligned} \quad (\text{A2.28})$$

Agrupando o 3º e 4º termos do lado direito do sinal de igualdade

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \bar{\phi})} + \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \mathbf{u} \bar{\phi})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha \bar{\mathbf{J}}} - \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} - \rho')} f = \\ & - \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\rho' \phi')} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \mathbf{u}' \phi' + \rho' \bar{\mathbf{u}} \phi' + \rho' \mathbf{u}' \bar{\phi} + \rho' \mathbf{u}' \phi')} + \dots \\ & \dots + \overline{(\bar{\rho} \bar{\phi} + \rho' \phi') \left[\frac{\partial \chi_\alpha}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}') \cdot \nabla \chi_\alpha \right]} - \overline{(\bar{\mathbf{J}} + \mathbf{J}') \cdot \nabla \chi_\alpha} \end{aligned} \quad (\text{A2.29})$$

Substituindo a Eq. (A2.2), a equação topológica, na Eq. (A2.29)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \bar{\phi})} + \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \mathbf{u} \bar{\phi})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha \bar{\mathbf{J}}} - \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} - \rho')} f = \\ & - \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\rho' \phi')} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \mathbf{u}' \phi' + \rho' \bar{\mathbf{u}} \phi' + \rho' \mathbf{u}' \bar{\phi} + \rho' \mathbf{u}' \phi')} + \dots \\ & \dots + \overline{(\bar{\rho} \bar{\phi} + \rho' \phi') \left[-\mathbf{u}_i \cdot \nabla \chi_\alpha + (\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}') \cdot \nabla \chi_\alpha \right]} - \overline{(\bar{\mathbf{J}} + \mathbf{J}') \cdot \nabla \chi_\alpha} \end{aligned} \quad (\text{A2.30})$$

De onde se obtém

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \bar{\phi})} + \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \mathbf{u} \bar{\phi})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha \bar{\mathbf{J}}} - \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} - \rho')} f = \\ & - \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\rho' \phi')} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \mathbf{u}' \phi' + \rho' \bar{\mathbf{u}} \phi' + \rho' \mathbf{u}' \bar{\phi} + \rho' \mathbf{u}' \phi')} + \dots \\ & \dots + \overline{\left\{ (\bar{\rho} \bar{\phi} + \rho' \phi') \left[(\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i \right] - (\bar{\mathbf{J}} + \mathbf{J}') \right\} \cdot \nabla \chi_\alpha} \end{aligned} \quad (\text{A2.31})$$

Para um fluido incompressível ou escoamento isocórico $\rho = \bar{\rho}$ e $\rho' = 0$, assim, da Eq. (A2.31) obtém-se a seguinte equação de conservação:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \bar{\phi})} + \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \mathbf{u} \bar{\phi})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha \bar{\mathbf{J}}} - \overline{\chi_\alpha \bar{\rho} f} = \\ & - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \mathbf{u}' \phi')} + \overline{\left\{ \bar{\rho} \bar{\phi} \left[(\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i \right] - (\bar{\mathbf{J}} + \mathbf{J}') \right\} \cdot \nabla \chi_\alpha} \end{aligned} \quad (\text{A2.32})$$

Para a obtenção da conservação da massa basta substituir as variáveis dadas pela Tabela A2.1. Assim,

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha \bar{\rho}} + \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha \bar{\rho} \mathbf{u}} = \overline{\left\{ \bar{\rho} \left[(\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i \right] \cdot \nabla \chi_\alpha \right\}} \quad (\text{A2.33})$$

Para se explicitar as variáveis de interesse deve-se definir dois outros tipos de médias: a média física ponderada por χ_α ,

$$\bar{\phi} \equiv \frac{\overline{\chi_\alpha \phi}}{\chi_\alpha} = \frac{\overline{\chi_\alpha \bar{\rho}}}{r_\alpha}, \quad (\text{A2.34})$$

e a média mássica ponderada pela massa específica

$$\bar{\phi} \equiv \frac{\overline{\chi_\alpha \bar{\rho} \phi}}{\chi_\alpha \bar{\rho}} = \frac{\overline{\chi_\alpha \bar{\rho} \bar{\phi}}}{r_\alpha \bar{\rho}}, \quad (\text{A2.35})$$

onde a fração volumétrica da fase α é dada por

$$\bar{\chi}_\alpha \equiv r_\alpha. \quad (\text{A2.36})$$

A qual pode-se denominar de fração volumétrica da fase α . Pode-se então definir a média física concentração da fase α :

$$\bar{\rho}_\alpha \equiv \frac{\overline{\chi_\alpha \bar{\rho}}}{\chi_\alpha} = \frac{\overline{\chi_\alpha \bar{\rho}}}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \bar{\rho}_\alpha = \overline{\chi_\alpha \bar{\rho}}. \quad (\text{A2.37})$$

A velocidade média a fase α ponderada pela massa:

$$\bar{\mathbf{u}}_\alpha \equiv \frac{\overline{\chi_\alpha \bar{\rho} \mathbf{u}}}{\chi_\alpha \bar{\rho}} = \frac{\overline{\chi_\alpha \bar{\rho} \mathbf{u}}}{r_\alpha \bar{\rho}_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \bar{\rho}_\alpha \bar{\mathbf{u}}_\alpha = \overline{\chi_\alpha \bar{\rho} \mathbf{u}}. \quad (\text{A2.38})$$

E o fluxo de massa interfacial:

$$\Gamma_\alpha \equiv \overline{\rho \left[(\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i \right] \cdot \nabla \chi_\alpha}. \quad (\text{A2.39})$$

A Eq.(A2.33) pode então ser escrita explicitando-se as variáveis de interesse. Para a conservação da massa:

$$\frac{\partial r_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \bar{\mathbf{u}}_\alpha) = \frac{\Gamma_\alpha}{\bar{\rho}_\alpha}. \quad (\text{A2.40})$$

Para a equação de conservação de quantidade de movimento tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \mathbf{u})} + \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \mathbf{u} \mathbf{u})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha \bar{\mathbf{T}}} - \chi_\alpha \bar{\rho} \mathbf{g} = \\ - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\bar{\rho} \mathbf{u}' \mathbf{u}')} + \overline{\left\{ \bar{\rho} \mathbf{u} \left[(\bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}') - \mathbf{u}_i \right] - (\bar{\mathbf{T}} + \mathbf{T}') \right\} \cdot \nabla \chi_\alpha} \end{aligned} \quad (\text{A2.41})$$

onde \mathbf{T} representa o tensor tensão dado por

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \mathbf{D}, \quad (\text{A2.42})$$

sendo p a pressão e \mathbf{D} é o tensor taxa de deformação e \mathbf{I} o tensor identidade. Para um fluido Newtoniano incompressível ou escoamento isocórico,

$$\bar{\mathbf{T}} = -\bar{p}\mathbf{I} + \mu(\nabla \bar{\mathbf{u}} + \nabla \bar{\mathbf{u}}^T). \quad (\text{A2.43})$$

Assim, a Eq. (A2.41) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{\chi_\alpha (\overline{\rho \mathbf{u}})} + \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\overline{\rho \mathbf{u} \mathbf{u}})} - \nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (-\overline{\rho \mathbf{I}} + \overline{\mathbf{D}})} - \overline{\chi_\alpha \rho \mathbf{g}} = \\ -\nabla \cdot \overline{\chi_\alpha (\overline{\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}'})} + \overline{\left\{ \overline{\rho \mathbf{u}} \left[(\overline{\mathbf{u}} + \overline{\mathbf{u}'}) - \mathbf{u}_i \right] - (\overline{\mathbf{T}} + \overline{\mathbf{T}'}) \right\}} \cdot \nabla \chi_\alpha \end{aligned} \quad (\text{A2.44})$$

Reagrupando os termos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{(\chi_\alpha \overline{\rho \mathbf{u}})} + \nabla \cdot \overline{(\chi_\alpha \overline{\rho \mathbf{u} \mathbf{u}})} = -\nabla \cdot \overline{(\chi_\alpha \overline{\rho})} + \nabla \cdot \overline{[\chi_\alpha \overline{\mathbf{D}} - \chi_\alpha (\overline{\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}'})]} + \dots \\ \dots + \overline{\chi_\alpha \overline{\rho \mathbf{g}}} + \overline{\mathbf{u}} \cdot \overline{\left\{ \overline{\rho} \left[(\overline{\mathbf{u}} + \overline{\mathbf{u}'}) - \mathbf{u}_i \right] \cdot \nabla \chi_\alpha \right\}} - \overline{(\overline{\mathbf{T}} + \overline{\mathbf{T}'})} \cdot \nabla \chi_\alpha \end{aligned} \quad (\text{A2.45})$$

Definindo a média física da pressão da fase α como

$$\overline{p}_\alpha \equiv \frac{\overline{\chi_\alpha \overline{p}}}{\chi_\alpha} = \frac{\overline{\chi_\alpha \overline{p}}}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \overline{p}_\alpha = \overline{\chi_\alpha \overline{p}}. \quad (\text{A2.46})$$

A média física do tensor tensão

$$\overline{\mathbf{D}}_\alpha \equiv \frac{\overline{\chi_\alpha \overline{\mathbf{D}}}}{\chi_\alpha} = \frac{\overline{\chi_\alpha \overline{\mathbf{D}}}}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \overline{\mathbf{D}}_\alpha = \overline{\chi_\alpha \overline{\mathbf{D}}}. \quad (\text{A2.47})$$

E a média física do produto das flutuações de velocidade - ou momentos de segunda ordem - como o tensor tensão de Reynolds da fase α :

$$\overline{\mathbf{T}}_\alpha^{Re} \equiv -\frac{\overline{\chi_\alpha \overline{\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}'}}}{\chi_\alpha} = -\frac{\overline{\chi_\alpha \overline{\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}'}}}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \overline{\mathbf{T}}_\alpha^{Re} = -\overline{\chi_\alpha \overline{\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}'}}. \quad (\text{A2.48})$$

Substituindo as Eq. (A2.46), (A2.47) e (A2.48) na Eq. (A2.45):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \overline{\rho \mathbf{u}}_\alpha) + \nabla \cdot (r_\alpha \overline{\rho \mathbf{u}}_\alpha \otimes \overline{\mathbf{u}}_\alpha) = -\nabla \cdot (r_\alpha \overline{p}) + \nabla \cdot r_\alpha (\overline{\mathbf{D}} + \overline{\mathbf{T}}_\alpha^{Re}) + r_\alpha \overline{\rho \mathbf{g}} + \dots \\ \dots + \overline{\mathbf{u}}_\alpha \Gamma_\alpha - \overline{\mathbf{T}} \cdot \nabla \chi_\alpha \end{aligned} \quad (\text{A2.49})$$

onde na Eq.(A2.49) o termo $\overline{\mathbf{u}}_\alpha \Gamma_\alpha$ representa o fluxo de quantidade de movimento através da interface devido ao fluxo de massa definido na Eq.(A2.39). O termo $-\overline{\mathbf{T}} \cdot \nabla \chi_\alpha$ representa a resultante das forças que atuam na interface:

$$\mathbf{m}_\alpha \equiv -\overline{\mathbf{T}} \cdot \nabla \chi_\alpha = -\overline{\mathbf{T}} \cdot \nabla \chi_\alpha - \overline{\mathbf{T}' \cdot \nabla \chi_\alpha}, \quad (\text{A2.50})$$

pois a média da flutuação é nula. Assim,

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \overline{\rho \mathbf{u}}_\alpha) + \nabla \cdot (r_\alpha \overline{\rho \mathbf{u}}_\alpha \otimes \overline{\mathbf{u}}_\alpha) = -\nabla \cdot (r_\alpha \overline{p}) + \nabla \cdot \left[r_\alpha (\overline{\mathbf{D}}_\alpha + \overline{\mathbf{T}}_\alpha^{Re}) \right] + r_\alpha \overline{\rho \mathbf{g}} + \overline{\mathbf{u}}_\alpha \Gamma_\alpha + \mathbf{m}_\alpha. \quad (\text{A2.51})$$

A2.7 Bibliografía

ISHII, M., T. HIBIKI. **Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow**. New York: Springer. 2006. xvi, 462 p.

MAMMMOLI, A. A., C. A. BREBBIA. **Computational Methods in Multiphase Flow IV**. Ed.: Mammoli, A. A., Brebbia, C.A. Southampton: WIT Press. 2007. 400 p.

APÊNDICE

3

DETALHAMENTOS DA MODELAGEM MATEMÁTICA: TURBULÊNCIA

Além do operador $\overline{\quad}$, a notação indicial apresentada no Apêndice 1 é utilizada, e mais uma vez de forma a facilitar a leitura das equações e economia de espaço, usamos uma mudança na notação: os campos médios são representados por uma letra maiúscula ao invés de serem mostrados dentro do operador de média, assim $\bar{u} = \langle u \rangle = U$. O vetor velocidade então está representado por $\mathbf{u} = u_i \hat{\mathbf{e}}_i = (U_i + u'_i) \hat{\mathbf{e}}_i$.

A3.1 Equação de Transporte do Tensor Tensão de Reynolds

Seja definido o operador Navier-Stokes para um fluido incompressível, ou escoamento isocórico, por:

$$N(u_i) = \rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_k \partial x_k} = 0. \quad (\text{A3.1})$$

Tomando-se a seguinte média temporal

$$\overline{u'_i N(u_i) + u'_j N(u_j)} = 0. \quad (\text{A3.2})$$

Desenvolvendo esta equação termo a termo tem-se:

Termo transiente

$$\begin{aligned} \overline{u'_i \partial_t (\rho u_j) + u'_j \partial_t (\rho u_i)} &= \overline{\rho u'_i \partial_t (U_j + u'_j)} + \overline{\rho u'_j \partial_t (U_i + u'_i)} \\ &= \overline{\rho u'_i \partial_t U_j} + \overline{\rho u'_i \partial_t u'_j} + \overline{\rho u'_j \partial_t U_i} + \overline{\rho u'_j \partial_t u'_i} \\ &= \overline{\rho u'_i \partial_t u'_j} + \overline{\rho u'_j \partial_t u'_i} \\ &= \overline{\partial_t (\rho u'_i u'_j)} \\ &= -\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} \end{aligned} \quad (\text{A3.3})$$

A média da variação da média no tempo é nula, bem como a média da flutuação, assim o 1° e 3° termos são iguais a zero.

Termo advectivo

$$\begin{aligned}
\overline{\rho u'_i u'_k \partial_k (u_j)} + \overline{\rho u'_j u'_k \partial_k (u_i)} &= \overline{\rho u'_i (U_k + u'_k) \partial_k (U_j + u'_j)} + \overline{\rho u'_j (U_k + u'_k) \partial_k (U_i + u'_i)} \\
&= \overline{\rho u'_i U_k \partial_k (U_j + u'_j)} + \overline{\rho u'_i u'_k \partial_k (U_j + u'_j)} + \dots \\
&\quad \dots + \overline{\rho u'_j U_k \partial_k (U_i + u'_i)} + \overline{\rho u'_j u'_k \partial_k (U_i + u'_i)} \\
&= \overline{\rho u'_i U_k \partial_k U_j} + \overline{\rho u'_i U_k \partial_k u'_j} + \overline{\rho u'_i u'_k \partial_k U_j} + \overline{\rho u'_i u'_k \partial_k u'_j} + \dots \\
&\quad \dots + \overline{\rho u'_j U_k \partial_k U_i} + \overline{\rho u'_j U_k \partial_k u'_i} + \overline{\rho u'_j u'_k \partial_k U_i} + \overline{\rho u'_j u'_k \partial_k u'_i} \\
\overline{\rho u'_i u'_k \partial_k (u_j)} + \overline{\rho u'_j u'_k \partial_k (u_i)} &= \overline{\cancel{\rho u'_i U_k \partial_k U_j}} + \overline{\rho U_k u'_i \partial_k u'_j} + \overline{\rho u'_i u'_k \partial_k U_j} + \overline{\rho u'_i u'_k \partial_k u'_j} + \dots \\
&\quad \dots + \overline{\cancel{\rho u'_j U_k \partial_k U_i}} + \overline{\rho U_k u'_j \partial_k u'_i} + \overline{\rho u'_j u'_k \partial_k U_i} + \overline{\rho u'_j u'_k \partial_k u'_i} \\
&= (\overline{\rho U_k u'_i \partial_k u'_j} + \overline{\rho U_k u'_j \partial_k u'_i}) + \overline{\rho u'_i u'_k \partial_k U_j} + \dots \\
&\quad \dots + \overline{\rho u'_j u'_k \partial_k U_i} + (\overline{\rho u'_i u'_k \partial_k u'_j} + \overline{\rho u'_j u'_k \partial_k u'_i})
\end{aligned} \tag{A3.4}$$

Os dois termos entre parênteses podem ser contraídos pela regra do produto, assim tem-se:

$$\begin{aligned}
\overline{\rho u'_i u'_k \partial_k (u_j)} + \overline{\rho u'_j u'_k \partial_k (u_i)} &= U_k \partial_k (\overline{\rho u'_i u'_j}) + \overline{\rho u'_i u'_k \partial_k U_j} + \overline{\rho u'_j u'_k \partial_k U_i} + \dots \\
&\quad \dots + \partial_k (\overline{\rho u'_i u'_j u'_k}) - \overline{\rho u'_i u'_j \partial_k u'_k} \\
&= -U_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \frac{\partial (\overline{\rho u'_i u'_j u'_k})}{\partial x_k}
\end{aligned} \tag{A3.5}$$

Gradiente de Pressão

$$\begin{aligned}
\overline{u'_i \partial_j p} + \overline{u'_j \partial_i p} &= \overline{u'_i \partial_j (P + p')} + \overline{u'_j \partial_i (P + p')} \\
&= \overline{u'_i \partial_j P} + \overline{u'_i \partial_j p'} + \overline{u'_j \partial_i P} + \overline{u'_j \partial_i p'} \\
&= \overline{\cancel{u'_i \partial_j P}} + \overline{u'_i \partial_j p'} + \overline{\cancel{u'_j \partial_i P}} + \overline{u'_j \partial_i p'} \\
&= \overline{u'_i \frac{\partial p'}{\partial x_j}} + \overline{u'_j \frac{\partial p'}{\partial x_i}}
\end{aligned} \tag{A3.6}$$

Este termo pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
\overline{u'_i \frac{\partial p'}{\partial x_j}} + \overline{u'_j \frac{\partial p'}{\partial x_i}} &= \frac{\partial (\overline{p' u'_i})}{\partial x_j} + \frac{\partial (\overline{p' u'_j})}{\partial x_i} - \overline{p' \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} + \overline{p' \frac{\partial u'_j}{\partial x_i}} \\
&= \frac{\partial (\overline{p' u'_i})}{\partial x_k} \delta_{jk} + \frac{\partial (\overline{p' u'_j})}{\partial x_k} \delta_{ik} - \overline{p' \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)}
\end{aligned} \tag{A3.7}$$

Termo Viscoso:

$$\begin{aligned}
 \overline{\mu(u'_i \partial_k^2 u_j + u'_j \partial_k^2 u_i)} &= \overline{\mu u'_i \partial_k^2 (U_j + u'_j)} + \overline{\mu u'_j \partial_k^2 (U_i + u'_i)} \\
 &= \overline{\mu u'_i \partial_k^2 U_j} + \overline{\mu u'_i \partial_k^2 u'_j} + \overline{\mu u'_j \partial_k^2 U_i} + \overline{\mu u'_j \partial_k^2 u'_i} \\
 &= \overline{\mu u'_i \partial_k^2 U_j} + \overline{\mu u'_i \partial_k^2 u'_j} + \overline{\mu u'_j \partial_k^2 U_i} + \overline{\mu u'_j \partial_k^2 u'_i} \\
 &= \overline{\mu \partial_k (u'_i \partial_k u'_j)} - \overline{\mu \partial_k u'_i \partial_k u'_j} + \overline{\mu \partial_k (u'_j \partial_k u'_i)} - \overline{\mu \partial_k u'_j \partial_k u'_i} \\
 &= \overline{\mu \partial_k [\partial_k (u'_i u'_j)]} - 2 \overline{\mu \partial_k u'_i \partial_k u'_j} \\
 &= \frac{\mu}{\rho} \overline{\partial_k [\partial_k (\rho u'_i u'_j)]} - 2 \overline{\mu \partial_k u'_i \partial_k u'_j} \\
 \overline{\mu(u'_i \partial_k^2 u_j + u'_j \partial_k^2 u_i)} &= -\nu \frac{\partial^2 \tau_{ij}}{\partial x_k \partial x_k} - 2\mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}. \tag{A3.8}
 \end{aligned}$$

Colecionando todos os termos

$$\begin{aligned}
 &-\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} - U_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \overline{\frac{\partial (\rho u'_i u'_j u'_k)}{\partial x_k}} + \dots \\
 &\dots + \frac{\partial (p' u'_i)}{\partial x_k} \delta_{jk} + \frac{\partial (p' u'_j)}{\partial x_k} \delta_{ik} - p' \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) - \left[-\nu \frac{\partial^2 \tau_{ij}}{\partial x_k \partial x_k} - 2\mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} \right] = 0 \tag{A3.9}
 \end{aligned}$$

De onde se obtém a equação de conservação para o tensor tensão de Reynolds

$$\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial t} + U_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} = -\tau_{ik} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \Pi_{ij} + \varepsilon_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\nu \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} + C_{ijk} \right], \tag{A3.10}$$

onde

$$\begin{aligned}
 \Pi_{ij} &= -p' \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) = 2 \overline{p' D'_{ij}} \\
 \varepsilon_{ij} &= 2\mu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k}} \\
 C_{ijk} &= \overline{\rho u'_i u'_j u'_k} + \overline{p' u'_i \delta_{jk}} + \overline{p' u'_j \delta_{ik}}
 \end{aligned} \tag{A3.11}$$

O termo $-\tau_{ik} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial U_i}{\partial x_k}$ é também definido como a produção de energia cinética,

assim,

$$P_{ij} \equiv -\tau_{ik} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} - \tau_{jk} \frac{\partial U_i}{\partial x_k}. \tag{A3.12}$$

O termo D'_{ij} representa a flutuação do tensor taxa de deformação. Pode-se então escrever de forma compacta

$$\frac{D_k \tau_{ij}}{Dt} = P_{ij} - \Pi_{ij} + \varepsilon_{ij} + \nabla_k \cdot (\nu \nabla_k \tau_{ij} + C_{ijk}). \quad (\text{A3.13})$$

A3.2 Equação da Energia Cinética Turbulenta – k

Prandtl em 1945 postulou que a escala característica da velocidade para turbulência, v_{mix} , deveria ser a energia cinética das flutuações turbulentas por unidade de massa como base para a escala de velocidade:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}). \quad (\text{A3.14})$$

Assim, a viscosidade turbulenta pode ser descrita em função da concentração mássica, da escala da turbulência e da energia cinética turbulenta:

$$\mu_T = cte \cdot \rho k^{1/2} \ell. \quad (\text{A3.15})$$

Precisa-se então determinar k . Do traço do tensor de Reynolds tem-se:

$$\tau_{ii} = -\overline{\rho u'_i u'_i} = -2\rho k. \quad (\text{A3.16})$$

Assim, tem-se que o traço do tensor de Reynolds é proporcional a k . A energia cinética turbulenta é uma variável específica, mas mesmo assim é referida apenas como energia cinética turbulenta.

Tomando-se então o traço da equação de transporte do tensor de Reynolds tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tau_{ii}}{\partial t} + U_k \frac{\partial \tau_{ii}}{\partial x_k} &= -\tau_{ik} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} - \tau_{ik} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \Pi_{ii} + \varepsilon_{ii} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\nu \frac{\partial \tau_{ii}}{\partial x_k} + C_{iik} \right], \\ -2\rho \frac{\partial k}{\partial t} + -2\rho U_k \frac{\partial k}{\partial x_k} &= -2\tau_{ik} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} + \Pi_{ii} + \varepsilon_{ii} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[-2\rho \nu \frac{\partial k}{\partial x_k} + C_{iik} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A3.17})$$

Para um escoamento isocórico o traço do tensor $\mathbf{\Pi}$ é nulo:

$$tr(\mathbf{\Pi}) = \Pi_{ii} = -\overline{p' \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u'_i}{\partial x_i} \right)} = -2\overline{p' \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_i} \right)} = 0. \quad (\text{A3.18})$$

Assim,

$$\begin{aligned} -2\rho \frac{\partial k}{\partial t} + -2\rho U_k \frac{\partial k}{\partial x_k} &= -2\tau_{ik} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} + 2\rho \nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[-2\rho \nu \frac{\partial k}{\partial x_k} + \overline{\rho u'_i u'_i u'_k} + 2\overline{p' u'_i \delta_{ik}} \right], \\ \rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho U_k \frac{\partial k}{\partial x_k} &= \tau_{ik} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} - \nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu \frac{\partial k}{\partial x_k} - \frac{1}{2} \overline{\rho u'_i u'_i u'_k} - \overline{p' u'_k} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A3.19})$$

A dissipação por unidade de massa é definida por

$$\varepsilon = \nu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k}}, \quad (\text{A3.20})$$

onde ν é a viscosidade cinemática.

Trocando o índice k por j , pois os índices são mudos, obtém-se a equação exata de conservação para energia cinética por unidade de massa da flutuação turbulenta

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \tau_{ik} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \frac{\partial k}{\partial x_j} - \frac{1}{2} \overline{\rho u'_i u'_i u'_j} - \overline{p' u'_j} \right]. \quad (\text{A3.21})$$

Tensor Tensão de Reynolds

Assumindo que a hipótese de Boussinesq é válida, o tensor tensão de Reynolds é dado por:

$$\begin{aligned} \tau_{ij} &= 2\mu_T D_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \\ \mathbf{T}^{\text{Re}} &= \tau_{ij} \hat{\mathbf{e}}_i \hat{\mathbf{e}}_j \end{aligned} \quad (\text{A3.22})$$

Tomando-se o traço, para um escoamento isocórico ou fluido incompressível, $D_{ii} = 0$, onde D_{ii} são as componentes da diagonal principal do tensor taxa de deformação, então:

$$\tau_{ii} = -\frac{2}{3} \rho k \delta_{ii} = -2\rho k. \quad (\text{A3.23})$$

Transporte Turbulento e Pressão de Difusão

Pode-se considerar que $-\overline{u'_j \phi'} \sim \mu_T \partial \Phi / \partial x_j$. Todavia o mesmo não pode ser feito para o termo de pressão. Mas assume-se a hipótese de que ele é pequeno comparado ao transporte turbulento, assim postula-se que:

$$\frac{1}{2} \overline{\rho u'_i u'_i u'_j} + \overline{p' u'_j} = u'_j \left(\rho \frac{u'_i u'_i}{2} + p' \right) = \frac{\mu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j}, \quad (\text{A3.24})$$

onde σ_k é uma constante de fechamento. Note que $u'_i u'_i / 2 = k$.

Assim, pode-se escrever de maneira compacta

$$\rho \frac{Dk}{Dt} = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + (\mathbf{T}^{\text{Re}} : \nabla \mathbf{U} - \rho \varepsilon). \quad (\text{A3.25})$$

A3.3 Equação da dissipação de energia cinética turbulenta ε :

Seja a equação de Navier-Stokes para um escoamento isocórico ou fluido incompressível:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right). \quad (\text{A3.26})$$

Efetuada-se a média de Reynolds

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \overline{u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right). \quad (\text{A3.27})$$

Subtraindo a Eq. (A3.26) de (A3.27)

$$\underbrace{\frac{\partial u'_i}{\partial t}}_{(I)} + \underbrace{U_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}}_{(II)} + \underbrace{u'_j \frac{\partial}{\partial x_j} (U_i + u'_i)}_{(III)} - \underbrace{u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}}_{(IV)} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right). \quad (\text{A3.28})$$

O termo IV pode ser reescrito como

$$\overline{u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} = \frac{\partial \overline{(u'_i u'_j)}}{\partial x_j} - \overline{u'_i \frac{\partial u'_j}{\partial x_j}} = \frac{\partial \overline{(u'_i u'_j)}}{\partial x_j}. \quad (\text{A3.29})$$

A segunda parcela deste termo é nula o devido à equação de conservação da massa, então,

$$\underbrace{\frac{\partial u'_i}{\partial t}}_{(I)} + \underbrace{U_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}}_{(II)} + \underbrace{u'_j \frac{\partial}{\partial x_j} (U_i + u'_i)}_{(III)} - \underbrace{\frac{\partial \overline{(u'_i u'_j)}}{\partial x_j}}_{(IV)} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right). \quad (\text{A3.30})$$

Define-se e então aplica-se o operador $\mathbf{L} = 2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} ()$ à equação acima. Tem-se

então:

Termo I:

$$\begin{aligned} \overline{2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial t} \right)} &= \overline{2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)} \\ &= 2\nu \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{2} \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)} \right] \\ &= \nu \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2 \end{aligned} \quad (\text{A3.31})$$

Termo II:

$$\begin{aligned}
 \overline{2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(U_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right)} &= \overline{2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial U_j}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} + \overline{2\nu U_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)} \\
 &= 2\nu \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial U_j}{\partial x_k}} + \overline{2\nu U_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right) \right]} \\
 &= 2\nu \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right) \frac{\partial U_j}{\partial x_k}} + \overline{\nu U_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2}
 \end{aligned} \tag{A3.32}$$

Termo III:

$$\begin{aligned}
 \overline{2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[u'_j \frac{\partial}{\partial x_j} (U_i + u'_i) \right]} &= \overline{2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(u'_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right)} + \overline{2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right)} \\
 &= 2\nu \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j}} + \overline{2\nu \left(u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right) \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_k \partial x_j}} + \dots \\
 &\quad \dots + \overline{2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} + \overline{2\nu u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right)}
 \end{aligned} \tag{A3.33}$$

O último termo do lado direito do sinal de igualdade pode ser reescrito como

$$\begin{aligned}
 \overline{2\nu u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right)} &= \overline{2\nu u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)} \\
 &= \overline{2\nu u'_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right) \right]} \\
 &= \overline{\nu u'_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2} \\
 &= \overline{\nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left[u'_j \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2 \right]} - \overline{\cancel{\nu \frac{\partial u'_j}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2}} \\
 &= \overline{\nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left[u'_j \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2 \right]}
 \end{aligned} \tag{A3.34}$$

Assim, para o termo III tem-se:

$$\begin{aligned}
 \overline{2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[u'_j \frac{\partial}{\partial x_j} (U_i + u'_i) \right]} &= \overline{2\nu \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} \right) \frac{\partial U_i}{\partial x_j}} + \overline{2\nu \left(u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right) \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_k \partial x_j}} + \dots \\
 &\quad \dots + \overline{2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} + \overline{\nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left[u'_j \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2 \right]}
 \end{aligned} \tag{A3.35}$$

Termo IV:

$$2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(u'_i u'_j)} \right) = 2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \overline{(u'_i u'_j)} \right) = 0 \quad (\text{A3.36})$$

Termo V:

$$\begin{aligned} 2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right) &= -\frac{2\nu}{\rho} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \right) \\ &= -\frac{2\nu}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial p'}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right) + \frac{2\nu}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial p'}{\partial x_k} \\ &= -\frac{2\nu}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial p'}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right) \end{aligned} \quad (\text{A3.37})$$

Termo VI:

$$\begin{aligned} 2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right) \right] &= \frac{2\nu\mu}{\rho} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right) \\ &= 2\nu^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right) \right] - 2\nu^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right) \\ &= 2\nu^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right) \right] \right\} - 2 \left(\nu \frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_j \partial x_k} \right)^2 \\ &= \nu^2 \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2 - 2 \left(\nu \frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_j \partial x_k} \right)^2 \end{aligned} \quad (\text{A3.38})$$

Agrupando todos os termos tem-se então:

$$\begin{aligned} \underbrace{\nu \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2}_{I_a} + \underbrace{U_j \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2}_{I_b} &= -\underbrace{2\nu \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} \right)}_{II_a} - \underbrace{2\nu \frac{\partial U_j}{\partial x_k} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)}_{II_b} + \dots \\ \dots - \underbrace{2\nu \left(u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right) \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_k \partial x_j}}_{III} - \underbrace{2\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}}_{IV} - \underbrace{2 \left(\nu \frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_j \partial x_k} \right)^2}_{V} + \dots \\ \dots - \underbrace{\nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left[u'_j \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2 \right]}_{VI_a} - \underbrace{\frac{2\nu}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial p'}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)}_{VI_b} - \underbrace{\nu^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2 \right]}_{VI_c} \end{aligned} \quad (\text{A3.39})$$

A equação acima possui dez termos que podem ser agrupados de forma mais conveniente. O termo II_b possui três índices mudos e o termo VI_b possui dois e por isso seus índices podem ser manipulados, assim para o termo II_b

$$2\nu \frac{\partial U_j}{\partial x_k} \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)} = 2\nu \frac{\partial U_m}{\partial x_l} \overline{\left(\frac{\partial u'_p}{\partial x_m} \frac{\partial u'_p}{\partial x_l} \right)} = 2\nu \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \overline{\left(\frac{\partial u'_k}{\partial x_i} \frac{\partial u'_k}{\partial x_j} \right)}. \quad (\text{A3.40})$$

E para o termo VI_b

$$\frac{2\nu}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{\left(\frac{\partial p'}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)} = \frac{2\nu}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)}. \quad (\text{A3.41})$$

Desta maneira pode-se escrever

$$\begin{aligned} \nu \frac{\partial}{\partial t} \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2} + U_j \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2} &= -2\nu \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)} + \dots \\ \dots - 2\nu \overline{\left(u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)} \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_k \partial x_j} - 2\nu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} - 2 \overline{\left(\nu \frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_j \partial x_k} \right)^2} &+ \dots \\ \dots - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu u'_j \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2} + \frac{2\nu}{\rho} \overline{\left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)} - \nu^2 \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2} \right] & \end{aligned} \quad (\text{A3.42})$$

Da definição de ε , dada pela Eq. (A3.20) obtemos a equação exata de transporte para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, viz.

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}}_I &= -2\mu \underbrace{\frac{\partial U_i}{\partial x_j} \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)}}_{II} - 2\mu \underbrace{\overline{\left(u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)} \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_k \partial x_j}}_{III} + \dots \\ \dots - 2\mu \underbrace{\overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}}}_{IV} - 2\mu \nu \underbrace{\overline{\left(\frac{\partial^2 u'_i}{\partial x_j \partial x_k} \right)^2}}_V &+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} - \mu u'_j \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2} - 2\mu \overline{\left(\frac{\partial p'}{\partial x_i} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)} \right]}_{VI} \end{aligned} \quad (\text{A2.43})$$

O termo I corresponde à derivada material da dissipação; os termos II e III são a geração da dissipação associados à vorticidade e ao escoamento médio; os termos IV e V representam respectivamente a dissipação da dissipação associados ao estiramento de vórtices e dissipação viscosa; o termo VI representa a difusão da dissipação. Neste último há explicitamente a difusão molecular da dissipação mais dois outros dois termos que representam o transporte turbulento da dissipação, analogamente à equação de transporte para energia cinética turbulenta. Note que:

$$\mu u'_j \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2} = \rho u'_j \nu \overline{\left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \right)^2} = \rho u'_j \varepsilon. \quad (\text{A3.44})$$

Esta equação apresenta diversas correlações e estes termos são então modelados por meio de análise dimensional. Assim, ela é escrita de uma forma mais compacta onde cada termo representa um determinado mecanismo físico: acúmulo e transporte advectivo; produção; dissipação; e difusão, respectivamente:

$$\rho \frac{D_j \varepsilon}{Dt} = P_\varepsilon + d_\varepsilon + D_\varepsilon. \quad (\text{A3.45})$$

A3.3 Bibliografia

MATHIEU, J., J. SCOTT. **An Introduction to Turbulent Flow**. Cambridge: Cambridge University Press. 2000. x, 374 p.

DAVIDSON, P. A. **Turbulence: An Introduction for Scientists and Engineers**. Oxford: Oxford University Press. 2007. xix, 657 p.

POPE, S. B. **Turbulent Flows**. Cambridge: Cambridge University Press. 2000. xxxiv, 771 p.
