

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica, Materiais e de Minas

Tese de Doutorado

“Efeitos da Incorporação de Modelos  
de Quebra e Coalescência de Bolhas  
em Simulações Multifásicas de  
Processos de Refino de Aços”

Autor: Carlos Eduardo Passagli Barral  
Orientador: Prof. Roberto Parreiras Tavares

09/2016

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica, Materiais e de Minas

Carlos Eduardo Passagli Barral

EFEITOS DA INCORPORAÇÃO DE MODELOS  
DE QUEBRA E COALESCÊNCIA DE BOLHAS  
EM SIMULAÇÕES MULTIFÁSICAS DE  
PROCESSOS DE REFINO DE AÇOS

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica,  
de Materiais e de Minas da Universidade Federal de Minas Gerais

Área de concentração: Metalurgia Extrativa  
Orientador: Prof. Roberto Parreiras Tavares

Belo Horizonte  
Escola de Engenharia da UFMG  
2016

## Dedicatória

*Dedico este trabalho aos meus professores, que vieram antes de mim e me ensinaram a ver o mundo de uma forma nova e admirável. Dedico também aos meus alunos, que vem depois de mim e a quem eu procuro ensinar esta forma de ver o mundo.*

## Agradecimento

*Agradeço à minha mãe que sempre me apoiou e me ensinou o caminho da verdade, da justiça e do humor negro.*

*Aos amigos por terem acreditado e compartilhado os meus sonhos.*

*Minha querida esposa, companheira amada e mãe de meus filhos Kael e Guilherme Theo.*

## Epígrafe

*“Eu acredito demais na sorte. E tenho constatado que,  
quanto mais duro eu trabalho, mais sorte eu tenho.”*

Thomas Jefferson

## Sumário

<b>LISTA DE FIGURAS .....</b>	<b>III</b>
<b>LISTA DE TABELAS .....</b>	<b>X</b>
<b>LISTA DE NOTAÇÕES.....</b>	<b>XI</b>
<b>RESUMO .....</b>	<b>XIII</b>
<b>ABSTRACT.....</b>	<b>XV</b>
<b>1- INTRODUÇÃO.....</b>	<b>1</b>
<b>2- OBJETIVOS .....</b>	<b>4</b>
2.1- OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	4
<b>3- REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....</b>	<b>5</b>
3.1- REFINO SECUNDÁRIO .....	5
3.1.2- <i>Classificação dos processos</i> .....	6
3.1.2.1- <i>Sistemas com injeção</i> .....	6
3.1.2.2- <i>Sistemas com tratamento sob vácuo</i> .....	8
3.2- MODELAGENS FÍSICA E MATEMÁTICA.....	11
3.2.1- <i>Fluidodinâmica computacional</i> .....	13
3.2.2- <i>Equacionamento do fluxo turbulento</i> .....	14
3.2.3- <i>Escoamento multifásico</i> .....	20
3.2.4- <i>Modelagem Física</i> .....	21
3.2.4.1- <i>Curvas de mistura</i> .....	24
3.2.4.2- <i>Análise de imagens</i> .....	28
3.2.5- <i>Verificação e validação de modelos computacionais</i> .....	30
3.3- ESTUDOS RECENTES .....	33
<b>4- METODOLOGIA .....</b>	<b>39</b>
4.1 MODELAGEM FÍSICA.....	39
4.1.1 <i>Construção de vetores de velocidade</i> .....	41
4.1.2 <i>Histograma de distribuição do tamanho de bolhas</i> .....	41
4.2 MODELAGEM MATEMÁTICA.....	42
4.2.1. <i>Panela de aciaria</i> .....	42
4.2.1.1 <i>Configuração das bolhas na panela de aciaria</i> .....	46

4.2.1.2 <i>Análise do efeito do tamanho das bolhas sobre a homogeneização do aço</i> .....	48
4.2.1.3 <i>Comparação dos modelos de quebra e coalescência das bolhas</i> .....	49
4.2.2 <i>Desgaseificador a vácuo RH</i> .....	49
4.2.2.1 <i>Configuração das bolhas no desgaseificador a vácuo RH</i> .....	52
4.2.2.2 <i>Análise da distribuição de tamanho das bolhas no RH</i> .....	54
4.2.2.3 <i>Avaliação da taxa de circulação no RH</i> .....	55
4.2.3 <i>Validação estatística</i> .....	56
4.3 <b>MODELO ESTATÍSTICO PROPOSTO</b> .....	57
4.3.1 <i>Procedimento para o método proposto</i> .....	59
4.3.1.1 <i>Passo 1: Modelo estatístico de ajuste e teste de declive</i> .....	59
4.3.1.2 <i>Passo 2: Análise de Resíduos</i> .....	61
4.3.1.3 <i>Passo 3: Testes de hipótese para os coeficientes do modelo estatístico</i> .....	62
4.3.1.4 <i>Passo 4: Determinação dos intervalos de confiança para o valor real da variável de Interesse</i> .....	63
<b>5- RESULTADOS E DISCUSSÃO</b> .....	<b>66</b>
5.1 <i>PANELA DE ACIARIA</i> .....	66
5.2 <i>DESGASEIFICADOR A VÁCUO RH</i> .....	92
5.2.1 <i>Análise estatística dos modelos matemáticos MUSIG e DDM</i> .....	112
<b>6- CONCLUSÕES</b> .....	<b>119</b>
<b>7- CONTRIBUIÇÕES ORIGINAIS AO CONHECIMENTO</b> .....	<b>121</b>
<b>8- SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS</b> .....	<b>122</b>
<b>9- REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>123</b>

## LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 - Esquemática do refino secundário (Rizzo. E.M.S. (2006)).....	7
Figura 3.2: Desenho esquemático mostrando os princípios de um processo de desgaseificação em um reator RH (adaptado de Araújo, 1997). .....	9
Figura 3.3: Relação entre o teor de carbono e o tempo de tratamento em um desgaseificador a vácuo (adaptado de Yamaguchi, 1995). .....	10
Figura 3.4: Processo de desgaseificação VD (Edwards, 2012a). .....	11
Figura 3.5: Esquema das etapas de modelagem e simulação(OBERKAMPF, 2002).....	13
Figura 3.6: Desenho esquemático mostrando condição de similaridade dinâmica. ....	22
Figura 3.7: Curvas DTR para escoamento empistonado, em mistura perfeita e não ideal (Soares, 1985). .....	26
Figura 3.8: Representação esquemática de diferentes métodos de injeção de traçador utilizados no método estímulo-resposta (Sasaki, 2005). .....	26
Figura 3.9: Funções DTR para panelas de 240t e 300t sob efeito de um desgaseificador a vácuo RH(Kato, 1993). .....	27
Figura 3.10: Representação esquemática de uma curva de distribuição de tempo de homogeneização (Neves, 2012). .....	28
Figura 3.11: Bolhas imediatamente após desprenderem do duto de injeção(Q=2,0l/min, P=0,101MPa (a) e P=0,0213MPa (b)) (Sakaguchi, 1995).....	29
Figura 3.12: Exemplo de filmagem de alta velocidade para (a) movimento de bolhas e (b) mudança de forma (Pérez, 2007). .....	30
Figura 3.13: Visualização do escoamento de bolhas e da superfície livre em um tanque agitado por coluna de bolhas com vazões de (a) 1,0 l/min, (b) 3,0 l/min, (c) 5,0 l/min (Kim, 2012).....	30

Figura 3.14: Esquema do processo de verificação de um modelo computacional (guia de verificação e validação de simulações fluidodinâmicas computacionais, 2002). .....	31
Figura 3.15: Esquema do processo de validação (guia de verificação e validação de simulações fluidodinâmicas computacionais, 2002). .....	33
Figura 3.16: Tempo de mistura de 95% em função da vazão e em diferentes posições de injeção de gás sem camada de querosene. (Pereira, 2011). .....	34
Figura 3.17: Três modos de dispersão de gás no banho. (a) finas bolhas dispersas, (b) coalescência incipiente, (c) coalescência (Anagbo; Brimacombe, 1990).....	35
Figura 3.18: Desenho esquemático mostrando o processo de arraste de gás por fases (Li at all, 2015). .....	35
Figura 3.19: Desenho esquemático mostrando os pontos de medição de concentração de traçador (Zhang e Li 2014). .....	36
Figura 3.20: Medidas de condutividade em função do tempo em diferentes pontos de monitoramento (Zhang e Li 2014). .....	37
Figura 3.21: Tempo de mistura para diferentes pontos de monitoramento (a) ponto 1-1 (b) ponto 2-1 (c) ponto 3-1 (d) ponto 4.3 (Zhang e Li 2014). .....	37
Figura 3.22: Desenho esquemático de um RH com injeção de gás pelo fundo da panela (Geng et all 2015). .....	38
Figura 4.1: Análise do tamanho das bolhas no modelo físico da panela de aciaria .....	41
Figura 4.2: Geometria da panela de aciaria modelada matematicamente .....	43
Figura 4.3: Malha computacional utilizada na modelagem da panela de aciaria.....	44
Figura 4.4: Condições de contorno adotadas na modelagem da panela de aciaria .....	45
Figura 4.5: Pontos de injeção de traçador e de monitoramento utilizados na panela de aciaria .....	48
Figura 4.6: Geometria do desgaseificador a vácuo RH modelado matematicamente .....	50

Figura 4.7: Condições de contorno adotadas na modelagem do desgaseificador a vácuo.....	51
Figura 4.8: Plano na perna de descida onde vazão em massa foi calculada.....	55
Figura 4.9: Modelo físico do desgaseificador a vácuo RH.....	56
Figura 5.1: Tempo de mistura para diferentes tamanhos de bolhas.....	67
Figura 5.2: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas da panela de aciaria, para uma vazão de 5l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM .....	71
Figura 5.3: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás na panela de aciaria, para uma vazão de 5l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM .....	72
Figura 5.4: Histograma do tamanho de bolhas na panela para vazão de 5l/min MUSIG e DDM	72
Figura 5.5: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas da panela de aciaria, para uma vazão de 10l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM .....	73
Figura 5.6: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás na panela de aciaria, para uma vazão de 10l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM .....	74
Figura 5.7: Histograma do tamanho de bolhas na panela para vazão de 10 l/min MUSIG e LJM .....	75
Figura 5.8: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas da panela de aciaria, para uma vazão de 15l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM .....	76
Figura 5.9: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás na panela de aciaria, para uma vazão de 15l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM .....	77

Figura 5.10: Histograma do tamanho de bolhas na panela para vazão de 15 l/min MUSIG e DDM .....	78
Figura 5.11: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas da panela de aciaria, para uma vazão de 20l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM .....	79
Figura 5.12: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás na panela de aciaria, para uma vazão de 20l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM .....	80
Figura 5.13: Histograma do tamanho de bolhas na panela para vazão de 20 l/min MUSIG e DDM .....	81
Figura 5.14: Histograma do tamanho de bolhas na panela para diferentes vazões MUSIG .....	82
Figura 5.15: Histograma do tamanho de bolhas na panela para diferentes vazões DDM .....	82
Figura 5.16: Fotografias do modelo físico da panela de aciaria durante ensaio com vazão de 5l/min .....	83
Figura 5.17: Histograma do tamanho de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 5l/min utilizando modelagem física .....	84
Figura 5.18: Histogramas da distribuição dos tamanhos de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 5l/min por modelagem física e matemática .....	84
Figura 5.19: Fotografias do modelo físico da panela de aciaria durante ensaio com vazão de 10l/min .....	85
Figura 5.20: Histograma do tamanho de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 10l/min utilizando modelagem física .....	86
Figura 5.21: Histogramas da distribuição dos tamanhos de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 10l/min por modelagem física e matemática .....	86
Figura 5.22: Fotografias do modelo físico da panela de aciaria durante ensaio com vazão de 15l/min .....	87

Figura 5.23: Histograma do tamanho de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 15l/min utilizando modelagem física.....	87
Figura 5.24: Histogramas da distribuição dos tamanhos de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 15l/min por modelagem física e matemática.....	88
Figura 5.25: Fotografias do modelo físico da panela de aciaria durante ensaio com vazão de 20l/min.....	88
Figura 5.26: Histograma do tamanho de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 20l/min utilizando modelagem física.....	89
Figura 5.27: Histogramas da distribuição dos tamanhos de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 20l/min por modelagem física e matemática.....	90
Figura 5.28: Vetores de velocidade das bolhas.....	91
Figura 5.29: Distribuição de bolhas (Sicorski, 2006) .....	92
Figura 5.30: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas no desgaseificador a vácuo RH, para uma vazão de 100l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM.....	93
Figura 5.31: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás no desgaseificaro a vácuo RH, para uma vazão de 100l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM.....	94
Figura 5.32: Histograma do tamanho de bolhas no desgaseificador a vácuo para vazão de 100 l/min MUSIG e DDM.....	96
Figura 5.33: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas no desgaseificador a vácuo RH, para uma vazão de 200l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM.....	97
Figura 5.34: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás no desgaseificaro a vácuo RH, para uma vazão de 200l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM.....	98

Figura 5.35: Histograma do tamanho de bolhas no desgaseificador a vácuo para vazão de 200 l/min MUSIG e DDM.....	99
Figura 5.36: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas no desgaseificador a vácuo RH, para uma vazão de 300l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM.....	100
Figura 5.37: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás no desgaseificaro a vácuo RH, para uma vazão de 300l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM.....	101
Figura 5.38: Histograma do tamanho de bolhas no desgaseificador a vácuo para vazão de 300 l/min MUSIG e DDM.....	102
Figura 5.39: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas no desgaseificador a vácuo RH, para uma vazão de 400l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM.....	104
Figura 5.40: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás no desgaseificaro a vácuo RH, para uma vazão de 400l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM.....	105
Figura 5.41: Histograma do tamanho de bolhas no desgaseificador a vácuo para vazão de 400 l/min MUSIG e DDM.....	106
Figura 5.42: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas no desgaseificador a vácuo RH, para uma vazão de 500l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM.....	107
Figura 5.43: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás no desgaseificaro a vácuo RH, para uma vazão de 500l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM.....	108
Figura 5.44: Histograma do tamanho de bolhas no desgaseificador a vácuo para vazão de 500 l/min MUSIG e DDM.....	109

Figura 5.45: Taxa de circulação do aço em um degaseificador a vácuo RH, considerando as bolhas injetadas com tamanho fixo de 10mm.....	110
Figura 5.46: Taxa de circulação do aço em um degaseificador a vácuo RH, considerando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG.....	111
Figura 5.47: Taxa de circulação do aço em um degaseificador a vácuo RH, considerando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM.....	111
Figura 5.48: Gráfico de análise de normalidade para os modelos avaliados.....	114
Figura 5.49: Gráfico de distribuição de resíduos versus ordem para os modelos avaliados. ....	115
Figura 5.50: Gráfico de distribuição de resíduos versus vazão para os modelos avaliados. ....	116
Figura 5.51: Gráfico de Y real versus Y estimado para os modelos Fixa com intervalo de confiança .....	117

## LISTA DE TABELAS

Tabela VI.1: Variáveis implementadas na modelagem matemática da panela de aciaria .....	47
Tabela VI.2: Expressões matemáticas implementadas na modelagem matemática da panela de aciaria .....	47
Tabela VI.3: Variáveis implementadas na modelagem matemática do desgaseificador a vácuo RH .....	53
Tabela VI.4: Expressões matemáticas implementadas na modelagem matemática do desgaseificador a vácuo RH .....	53
Tabela V.1: Tempo de mistura do aço para diferentes diâmetros de bolha .....	67
Tabela V.2: Grandezas estatísticas dos modelos estudados .....	90
Tabela V.3: Coeficientes lineares e angulares obtidas pela regressão dos modelos matemáticos estudados .....	112
Tabela V.4: Valores de $F_{(\alpha, 2, n-2)}$ , $\sigma^2$ e $F_0$ para as modelagens utilizando bolhas de tamanho fixo e os modelos de quebra e coalescência MUSIG e DDM .....	112
Tabela V.5: Valores de R e de $n(\hat{\beta}_0 - \beta_0)^2 + 2P(\hat{\beta}_0 - \beta_0)(\hat{\beta}_1 - \beta_1) + Q(\hat{\beta}_1 - \beta_1)^2$ obtidos para cada um dos modelos avaliados .....	118

## LISTA DE NOTAÇÕES

$B$  = vetor relacionado à força do corpo, representando sua flutuabilidade (N);

$D_b$  = Diâmetro de bolha (m);

$F_0$  = Estatística de teste para o teste F unilateral;

$Fr$  = número de Froude (adimensional);

$g$  = aceleração da gravidade ( $m/s^2$ );

$k$  = energia cinética de turbulência ( $m^2/s^2$ );

$L$  = dimensão característica (definida de acordo com a configuração do sistema) (m);

$p$  = pressão existente no sistema (Pa);

$Q$  = vazão de gás ( $m^3/s$ );

$Re$  = número de Reynolds (adimensional);

$S_\phi$  = termo fonte da variável  $\phi$  ;

$t$  = tempo (s);

$T$  = temperatura (K)

$u$  = componente vetorial da velocidade ( $u, v, w$ ) nas direções  $x, y$  ou  $z$ , respectivamente (m/s);

$V$  = velocidade média do fluido (m/s);

$Y^R(\mathbf{x})$  = valor de uma grandeza física escalar que é função de um vetor de variáveis  $\mathbf{x}$ ;

$Y^M(\mathbf{x})$  = modelo matemático que se aproxima do valor da grandeza física  $Y^R(\mathbf{x})$ ;

$\varepsilon$  = taxa de dissipação da energia cinética de turbulência ( $m^2/s^3$ );

$\varepsilon_i^F$  = desvio aleatório entre  $Y^R(\mathbf{x})$  e  $Y^M(\mathbf{x})$ ;

$\phi$  = variável dependente, podendo ser 1 (equação da continuidade) ou  $u, v, w$  (equações de conservação de quantidade de movimento);

$\Gamma_\phi$  = coeficiente de difusão da variável  $\phi$  ;

$\mu$  = viscosidade dinâmica do fluido (kg/m.s);

$\mu_t$  = viscosidade turbulenta (kg/m.s);

$\rho$  = densidade do fluido (kg/m<sup>3</sup>);

$\tau$  = tempo adimensional (adimensional)

## RESUMO

A fabricação de aço líquido envolve diversos processos, e nestes, é possível identificar uma variedade de fenômenos que, de forma majoritária, envolve a interação entre gás, na forma de bolhas e o aço líquido. Além disso, a maioria dos estudos que caracterizam a fluidodinâmica nestes processos considera que as bolhas têm diâmetro fixo, desconsiderando, portanto, a variação em seus tamanhos, proveniente da quebra e coalescência das mesmas.

Em um dos processos utilizados nas panelas de aciaria para homogeneizar quimicamente e termicamente o aço, a rinsagem, observa-se que o tamanho das bolhas tem influência tanto no tempo de mistura quanto na capacidade de flotar as inclusões.

Percebe-se também que a produção de aços especiais, com ultra-baixo teor de carbono utiliza processos de refino a vácuo, tendo como um de seus maiores representantes, o desgaseificador RH. Nesse sentido, a alta demanda por aços de ultra-baixo teor de carbono exige melhorias no processo de desgaseificação do aço que só pode ser alcançada com o avanço tecnológico neste reator. Tornando-se importante o estudo aprofundado sobre os aspectos fundamentais dos fenômenos que o regem.

Neste trabalho foram realizadas modelagens físicas e matemáticas na panela de aciaria com o objetivo de compreender o comportamento das bolhas durante este tipo de operação, por meio dos estudos de curvas de tempos de mistura, perfis de distribuição de tamanho de bolhas e perfis de velocidade das bolhas obtidas tanto por modelagem física quanto matemática. Considerou-se nesse estudo dois modelos distintos de quebra e coalescência das bolhas na modelagem matemática, o modelo de múltiplos grupos de tamanho (MUSIG) e o modelo de diâmetros dispersos (DDM). Os tempos de mistura (considerando 95% de mistura) obtidos pelos dois modelos de quebra e coalescência foram muito semelhantes, mas foi possível perceber que o uso inadequado de um diâmetro fixo nas modelagens pode acarretar desvios significativos nos resultados. Também foi percebido que apesar das médias dos tamanhos de bolhas obtidos pelo MUSIG e pelo DDM serem semelhantes, a variância apresentada pelo MUSIG é muito menor e diverge do comportamento observado em modelagem física, ao contrário do DDM, que se aproximou de forma satisfatória.

Também foi avaliado o efeito da quebra e coalescência das bolhas em um desgaseificador a vácuo RH, através dos perfis de distribuição do tamanho de bolhas e da construção de curvas

de taxa de circulação em função da vazão de injeção de gás na perna de subida, que foram comparadas por método estatístico com a obtida por modelagem física. Os perfis de tamanho de bolhas não puderam ser comparados com modelagem física em função da geometria do reator, mas a taxa de circulação apresentou resultados qualitativamente razoáveis tanto quando as bolhas foram consideradas com tamanho fixo de 10mm, quanto com a consideração de quebra e coalescência de bolhas (MUSIG e DDM), contudo, todos os modelos apresentaram um certo desvio dos resultados experimentais. A comparação estatística demonstrou que o modelo de quebra e coalescência DDM apresentou a melhor aproximação com os resultados experimentais.

## ABSTRACT

The steelmaking involves several processes, where it is possible to identify a great variety of phenomena. These process has in his structure the interaction between gas in the form of bubbles and liquid steel. Furthermore, most studies using the fluid in these processes considers that the bubbles have a fixed diameter, excluding therefore the variation in their sizes, from breaking and coalescence of them.

In one of the processes used in steelmaking ladles to homogenize chemically and thermally the steel called rinsing, it is observed that the size of the bubbles affects both the mixing time and in the capacity to flotation of the inclusions.

It's possible to notice also that the production of special steels, with ultra-low carbon use vacuum refining process, having as one of its greatest representatives, RH degasser. In this sense, the high demand for ultra-low carbon steels requires improvements in the steel degassing process that can only achieve better results with the technological advancement in this reactor. In this case, is necessary to study the fundamental aspects of phenomena that govern it.

In this work were carried out physical and mathematical modeling in the steelmaking ladle in order to understand the behavior of bubbles during this operation, using the study of mixing times curves, bubble size distribution profiles and the velocity of the bubbles profiles was obtained by physical and mathematical models. Were considered in this study two different models of break and coalescence of bubbles in the mathematical modeling, the multiple size groups (MUSIG) and dispersed diameters model (DDM). The mixing times (considering 95% mixture) obtained by the two models breaking and coalescence were very similar, but it was revealed that the inappropriate use of a fixed diameter in the modeling may result in significant deviations in the results. It was also noticed that although the average size of bubbles obtained by Musig and the DDM are similar, the variance presented by MUSIG is much smaller and differs from the behavior observed in the physical modeling, unlike DDM, which approached satisfactorily.

Was evaluated the effect of the break and coalescence of bubbles in a vacuum degasser RH using the distribution profiles of bubble size and the construction of flow rate curves as a

function of gas injection in the upward leg which were compared by statistical method with that obtained by physical modeling.

The bubble size profiles could not be compared with physical modeling as a function of reactor geometry, but the rate of circulation presented qualitatively reasonable results both when the bubbles were considered fixed length of 10 mm, and with consideration break and coalescence bubbles (MUSIG and DDM), however, all the models showed some deviation of the experimental results. The statistical comparison showed that the break and coalescence DDM model presented the best approximation with the experimental results.

## 1- INTRODUÇÃO

A indústria siderúrgica fornece insumos para diversos segmentos de produção industrial, como a indústria automotiva, de máquinas pesadas, linha branca, construção civil, entre outras. No Brasil é constituída predominantemente por usinas integradas, que operam as diversas fases do processo produtivo, desde a redução do minério de ferro a ferro-gusa, em altos-fornos até a produção de semi-acabados, bobinas, chapas, tubos perfis e fios-máquina.

Durante o processo, principalmente na etapa de refino secundário, é bastante comum o uso da injeção de gases nos reatores, com objetivo de homogeneizar o banho tanto térmica quanto quimicamente, além de favorecer a remoção de gases dissolvidos e flotação de possíveis impurezas contidas no metal líquido. Naturalmente, o gás injetado nos reatores toma a forma de bolhas, cujo tamanho, que varia com a vazão, temperatura e interação entre as bolhas, vai interferir na capacidade de arraste do metal líquido.

Nas panelas de aciaria, o processo de injeção de gases é feito pelo fundo do reator durante a rinsagem. O tamanho das bolhas tem influência tanto no tempo de mistura quanto na capacidade de flotar as inclusões neste reator.

Além da panela de aciaria, o desgaseificador a vácuo RH também é utilizado no refino secundário com o objetivo de retirar gases dissolvidos no aço a níveis impossíveis sem o uso do vácuo.

O fluxo de gás existente tanto na panela de aciaria quanto no desgaseificador a vácuo RH é caracterizado por uma inter-relação complexa entre variáveis de projeto e operação, como turbulência, tamanho de bolhas e a interação das fases presentes, justificando a necessidade de um profundo conhecimento sobre sua fluidodinâmica. Este tipo de estudo exige a aplicação de ferramentas adequadas para o desenvolvimento de estratégias de aquisição de informações e compreensão do padrão de escoamento. O crescimento acentuado da tecnologia computacional possibilitou avançar no uso de modelos matemáticos para a previsão e entendimento dos fluxos em reatores.

Em meados do século passado a fluidodinâmica computacional surgiu como uma importante ferramenta de modelagem para o escoamento multifásico. Por meio desta técnica é possível prever o escoamento em sistemas metalúrgicos, obtendo um volume considerável de

informações a um custo reduzido e em regiões onde seria impossível por meio de modelamento físico ou dados industriais. Contudo, para uma utilização correta desta ferramenta, é importante conhecer os métodos numéricos e entender as simplificações formuladas, sabendo como estas influenciam os resultados. No entanto, ainda existem divergências entre os pesquisadores, no que diz respeito a termos de fechamento da equação de Navier-Stokes suavizada (RANS), como a turbulência e as forças de interação entre as fases.

A principal limitação em estudos fluidodinâmicos, que utilizam a fluidodinâmica computacional (CFD), em sistemas gás-líquido, é a simplificação excessiva quanto ao comportamento dinâmico das bolhas e a carência de dados experimentais da região de escoamento, para validação dos modelos matemáticos utilizados nas simulações. Tanto na panela de aciaria quanto no desgaseificador a vácuo RH, as bolhas encontram-se em velocidades relativamente elevadas e a pluma apresenta regime heterogêneo de escoamento, ou seja, existem bolhas de diferentes tamanhos no sistema, além de quebra e coalescência das mesmas.

Na modelagem física, neste caso a frio, água é utilizada para simular o aço líquido e ar comprimido para simular o gás injetado, respeitando critérios de similaridade que possibilitam a utilização dos resultados obtidos em processos industriais. A modelagem física permitiu a construção de curvas de mistura, perfis de velocidade e visualização do tamanho das bolhas.

A modelagem matemática na fluidodinâmica consiste em simular o escoamento e o fenômeno de mistura por métodos numéricos, solucionando um sistema de equações de transporte e um conjunto de modelos matemáticos desenvolvidos independentemente, como por exemplo, modelos de interação líquido-bolha ou modelos de quebra e coalescência de bolhas. A modelagem matemática permite a obtenção de resultados como a construção de curvas de mistura, perfis de velocidade, visualização do perfil de tamanho de bolhas, taxas de circulação, entre outros.

Observa-se que mesmo com o avanço nas técnicas de medição, dados experimentais sobre o comportamento das bolhas, operando em regime heterogêneo de escoamento, em reatores metalúrgicos, são escassos. Este fato dificulta a determinação de apenas um modelo matemático capaz de representar de forma satisfatória a hidrodinâmica do sistema gás-líquido nestes reatores.

Nesse sentido, com o intuito de contribuir para o avanço das discussões em relação à temática abordada e investigar as lacunas encontradas, este trabalho apresenta aspectos da interação entre as bolhas injetadas em uma panela de aciaria e em um desgaseificador a vácuo RH, por meio de modelagem física e matemática.

## 2- OBJETIVOS

Elaboração e validação de um modelo matemático capaz de prever o comportamento do gás injetado em uma panela de aciaria e em um desgaseificador a vácuo RH, considerando a interação entre as fases gasosa e líquida, bem como a variação do tamanho das bolhas, afetado pela quebra e coalescimento, durante o escoamento e sua consequência no movimento do aço líquido contido nestes reatores. Serão considerados neste trabalho:

- Mecanismos de coalescência e quebra de bolhas de gás;
- Mapas de contorno do perfil de diâmetro das bolhas de gás;
- Trajetória do aço líquido e das bolhas de gás nos reatores.

O entendimento integrado destes fenômenos permitirá conhecer os aspectos fundamentais que regem o funcionamento dos reatores em questão.

### 2.1- Objetivos Específicos

- Entendimento do efeito do tamanho das bolhas no movimento do aço em uma panela de aciaria por meio de curvas de mistura obtidas por modelagem matemática;
- Implementação de dois modelos matemáticos de quebra e coalescência de bolhas no software comercial CFX;
- Comparação dos dois modelos matemáticos de quebra e coalescência, em uma panela de aciaria, por meio da análise do movimento das bolhas usando modelagem física;
- Comparação dos dois modelos matemáticos de quebra e coalescência, em uma panela de aciaria, por meio da análise da distribuição dos tamanhos de bolha usando modelagem física;
- Comparação dos dois modelos matemáticos de quebra e coalescência, em um desgaseificador a vácuo RH, por meio da análise da distribuição dos tamanhos de bolha;
- Comparação dos dois modelos matemáticos de quebra e coalescência, em um desgaseificador a vácuo RH, por meio da taxa de circulação no reator, usando um método de avaliação estatística, com resultados da modelagem física.

### 3- REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão bibliográfica foi dividida em três tópicos distintos. Em um primeiro momento são apresentados aspectos do refino secundário do aço, mostrando a importância da injeção de gases no processo e contextualizando o trabalho. Em um segundo momento são apresentados estudos utilizando as modelagens física e matemática em processos de engenharia e finalmente, em um terceiro momento, são descritos os trabalhos realizados até a atualidade onde são estudados os comportamentos das bolhas em reatores metalúrgicos.

#### 3.1- Refino Secundário

Araújo (1997) descreve os processos de fabricação do aço como oxidantes. Como consequência, é natural que o aço produzido tenha quantidades de oxigênio em teores muito superiores aos admissíveis para alguns produtos. Durante o vazamento ocorre ainda a absorção de outros gases, como nitrogênio e hidrogênio. O processo de solidificação é caracterizado pela diminuição da temperatura. Como a solubilidade dos gases no aço é função da temperatura, esta também diminui drasticamente, de forma que seriam formadas bolhas e inclusões no aço, caso os gases não fossem extraídos do metal.

O refino secundário foi desenvolvido, portanto, para garantir a desoxidação do aço, com consequente atendimento dos valores desejados para os teores de oxigênio, bem como o ajuste térmico e químico, com adição de elementos de liga, dessulfuração para teores abaixo de 0,005%, desfosforação e descarburização para teores abaixo de 0,002%.

Araújo (1997) ainda define o refino secundário como o trabalho metalúrgico de refino ou ajuste da composição química e da temperatura, realizado fora do reator primário, onde é feita uma ou mais das seguintes operações unitárias:

- a) Tratamento sob vácuo, para remoção de gases;
- b) Agitação por borbulhamento de gás, para homogeneização do banho;
- c) Mistura completa de adições;
- d) Refino de aço pelo uso de escória sintética;
- e) Manutenção de uma atmosfera de gás inerte na panela;
- f) Aquecimento do aço líquido.

As principais razões que justificam o uso do refino secundário, ainda segundo Araújo (1997), são apresentadas a seguir:

- a) Aumento da produtividade no conversor a oxigênio, ao descarburar em nível baixo, (0,03 a 0,06% de C), seguindo-se uma recarburização e o ajuste da temperatura, na panela.
- b) Aumento da produtividade do forno elétrico, ao produzir aços especiais, transferindo-se as operações antes realizadas com uma segunda escória, para o forno de tratamento.
- c) Melhor controle da temperatura para o lingotamento contínuo.
- d) Maior facilidade em atingir limites estreitos de composição e de propriedades mecânicas.
- e) Obtenção de níveis de hidrogênio inferiores a 1,5 ppm e alcançar reduzidos teores de enxofre (normalmente inferiores a 0,010%).
- f) Fabricação de aços para esmaltação ou inoxidáveis ferríticos de baixo teor de carbono.
- g) Produção de aços ao cromo contendo carbono, em conversor a oxigênio.

### 3.1.2- Classificação dos processos

Os processos de refino secundário podem ser divididos em duas características distintas, sendo elas:

- a) Sistemas com injeção;
- b) Sistemas com tratamento sob vácuo.

#### 3.1.2.1- Sistemas com injeção

O processo de refino secundário com injeção é de operação relativamente simples e baixos custos, tanto operacional quanto de capital, quando comparado ao sistema com tratamento sob vácuo. Desta forma é recomendado para a produção de aços comuns, com exigências limitadas de qualidade e em grande volume. A injeção pode ser de gases inertes, arames ou pós.

Pereira (2011) argumenta que no refino secundário é possível agitar o aço líquido com o uso de gás inerte para a homogeneização da composição química e térmica e, através de uma

camada de escória na superfície do banho, intensificar as reações de refino metal/escória para reduzir as impurezas tais como o enxofre e remover as inclusões.

Azevedo (2010) explica que as estações de borbulhamento de argônio na companhia siderúrgica nacional (CSN) respondem por 55% do refino dos aços nesta empresa e têm a finalidade de permitir ajustes finos de composição química dos aços, através de máquinas de injeção de arames.

Costa (2012) mostra que a dessulfuração do aço pode ser obtida pela injeção de agente dessulfurante em pó, em corrente de gás inerte, através de lança. A eficiência do processo irá depender das condições do banho, da escória e da energia de agitação. A figura 3.1 mostra de forma esquematizada uma estação de refino secundário por sistema de injeção.

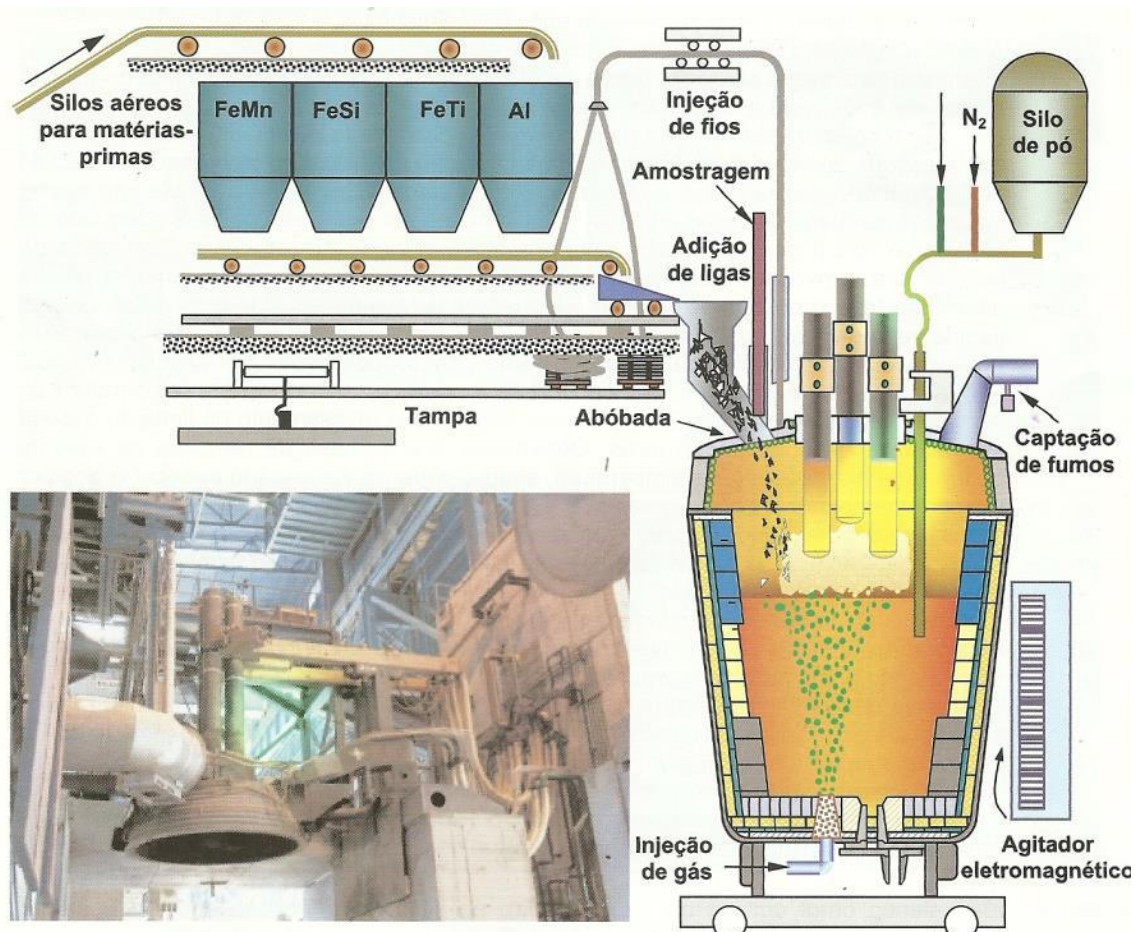


Figura 3.1 - Esquematização do refino secundário (Rizzo. E.M.S. (2005))

### 3.1.2.2- Sistemas com tratamento sob vácuo

O processo de refino secundário com tratamento sob vácuo é obviamente mais complexo e com maiores custos, tanto operacionais quanto de capital, quando comparado com os sistemas com injeção de gás. Desta forma é recomendado para a produção de aços especiais, com exigências restritas de qualidade.

Araújo (1997) descreve o desgaseificador a vácuo RH como um reator metalúrgico associado a metalurgia secundária do aço. É constituído de dois tubos cilíndricos, de material refratário, chamados de pernas do RH, ligados a uma câmara de vácuo. Esta câmara tem o formato de um cilindro alongado, com diâmetro menor que o da panela de vazamento. A distância entre a câmara e o interior da panela fica entre 200mm e 400 mm. A figura 3.2 mostra um desenho esquemático deste reator. O vácuo é gerado por meio de ejetores de vapor, ao invés de bombas mecânicas, por este ser mais resistente ao efeito das poeiras geradas durante o processo. A existência do vácuo induz a subida do aço pelo interior das pernas, até a câmara de vácuo, podendo chegar até a uma altura de 1.500mm de aço

Na parte inferior da perna de subida do desgaseificador (terço inferior) são instalados pontos de injeção de gás inerte. O objetivo inicial da injeção destes gases era provocar a movimentação de aço no reator, garantindo que todo ele passasse pela região de vácuo em um tempo reduzido, contudo, foi verificado em seguida que uma elevada turbulência favorece tanto a formação das bolhas de  $H_2$ ,  $N_2$  e  $CO$ , como o transporte destes elementos até a superfície. O gás injetado é normalmente o argônio, em pequena quantidade (cerca de 5 a 10% em volume, quando comparado ao aço líquido). A expansão deste gás e a liberação dos gases no interior do aço aceleram o processo no terço superior da perna de subida.

Yamaguchi (1995) discute que a taxa de descarburização é extremamente alta nos estágios iniciais do processo, pois ocorre um vigoroso borbulhamento espontâneo do  $CO$  sob baixa pressão. Contudo, o borbulhamento de  $CO$  diminui quando o teor de carbono está mais baixo, de forma que a taxa de descarburização decai sensivelmente. É proposto que o aumento do teor de gases dissolvidos, mesmo não sendo o  $CO$ , incrementa a taxa de descarburização de aços ultra-baixo carbono, por promover o borbulhamento do aço líquido. No trabalho de Yamaguchi foi feito o sopro de hidrogênio misturado ao argônio, no desgaseificador RH.

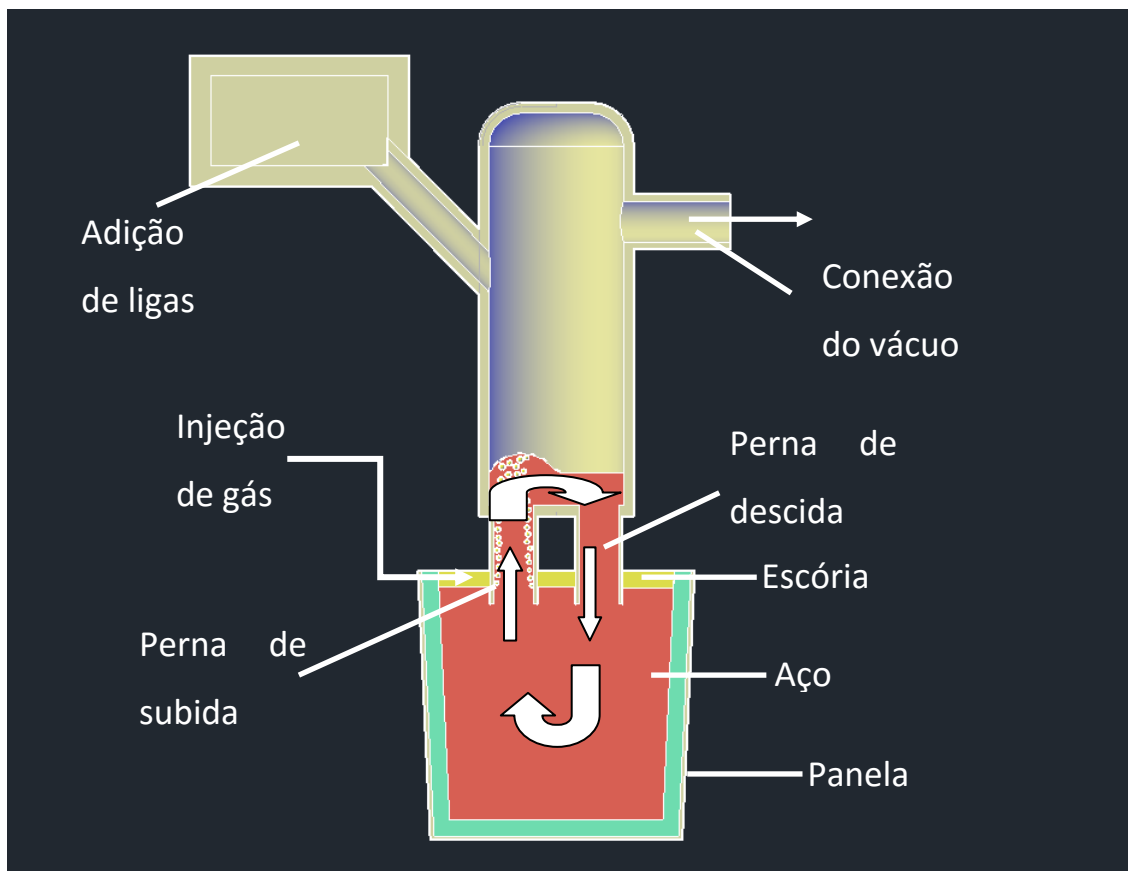


Figura 3.2: Desenho esquemático mostrando os princípios de um processo de degaseificação em um reator RH (adaptado de Araújo, 1997).

O efeito desta técnica pode ser observado na figura 3.3, onde é mostrada a relação entre a concentração final de carbono e o tempo de tratamento, para o método convencional e para o método aprimorado com a injeção de  $H_2$ . Pode-se notar que para teores de carbono abaixo de 10 ppm, o efeito do hidrogênio torna-se significativo.

O sistema de tratamento sob vácuo designado VD (*Vacuum Degassing*) é realizado com o posicionamento da panela de aciaria no interior de uma câmara de vácuo, onde ocorre a degaseificação, conforme ilustrado esquematicamente na figura 3.4. O vácuo na câmara pode atingir valores de até 67 Pa. ( BRUCE, CHEETHAM, V. LEGGE, 2003).

A convecção do aço é obtida por meio da injeção de gás inerte pelo fundo da panela favorecendo a degaseificação do metal líquido e a homogeneização, tanto termica quanto química, após a adição das ligas no aço e durante a realização do vácuo.

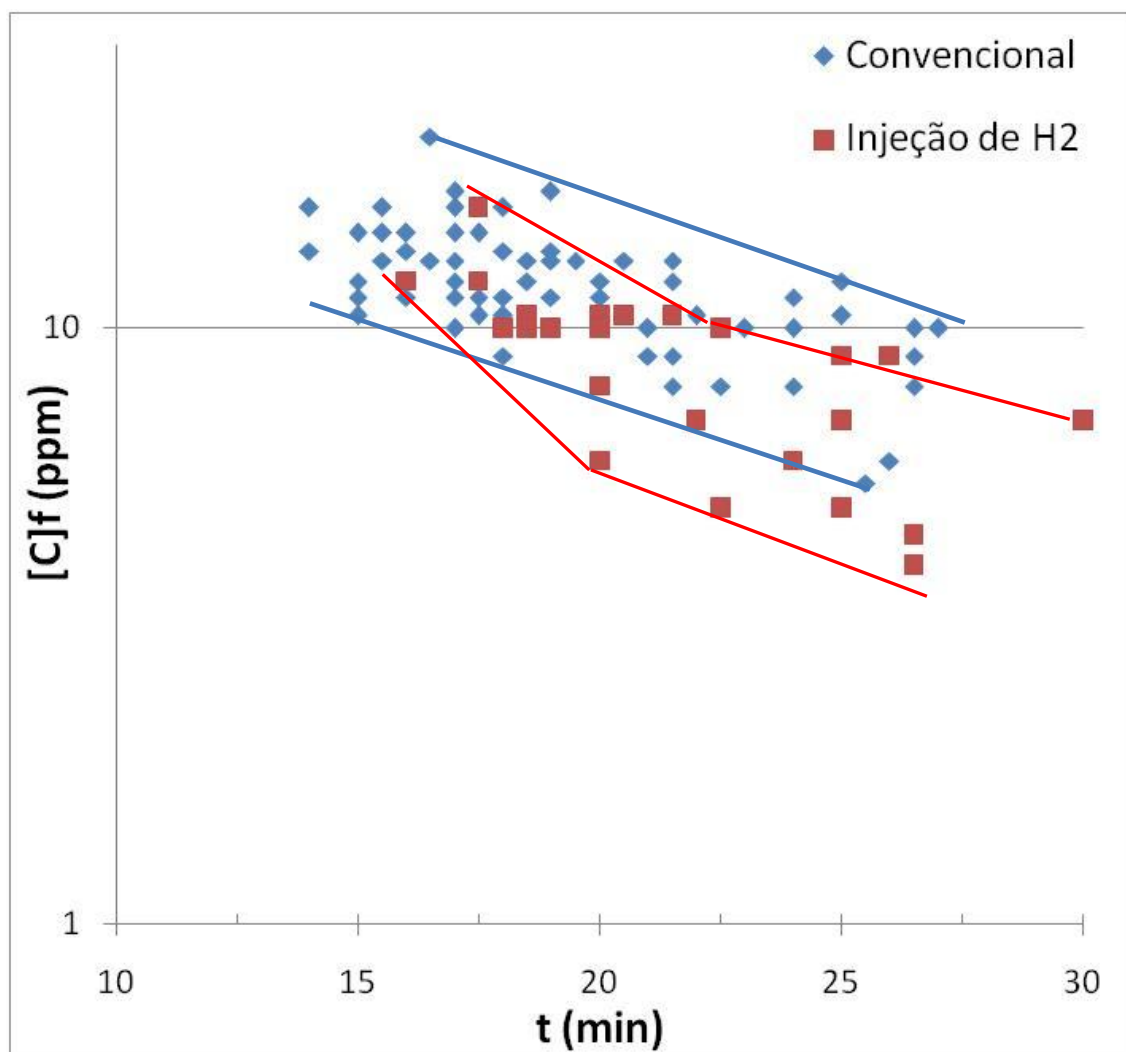


Figura 3.3: Relação entre o teor de carbono e o tempo de tratamento em um desgaseificador a vácuo (adaptado de Yamaguchi, 1995).

O sistema de tratamento sob vácuo designado VOD (Vacuum Oxygen Degassing) é semelhante ao processo VD, contudo a realização do vácuo é feita em uma câmara que permite a injeção de oxigênio para a redução do teor de carbono no banho. O vácuo neste reator atinge valores entre 80 e 200 Pa ( BRUCE, S. CHEETHAM, V. LEGGE, G.,2003). No sistema VOD também deve ser injetado argônio durante a realização do vácuo de forma a promover a homogeneização do aço.

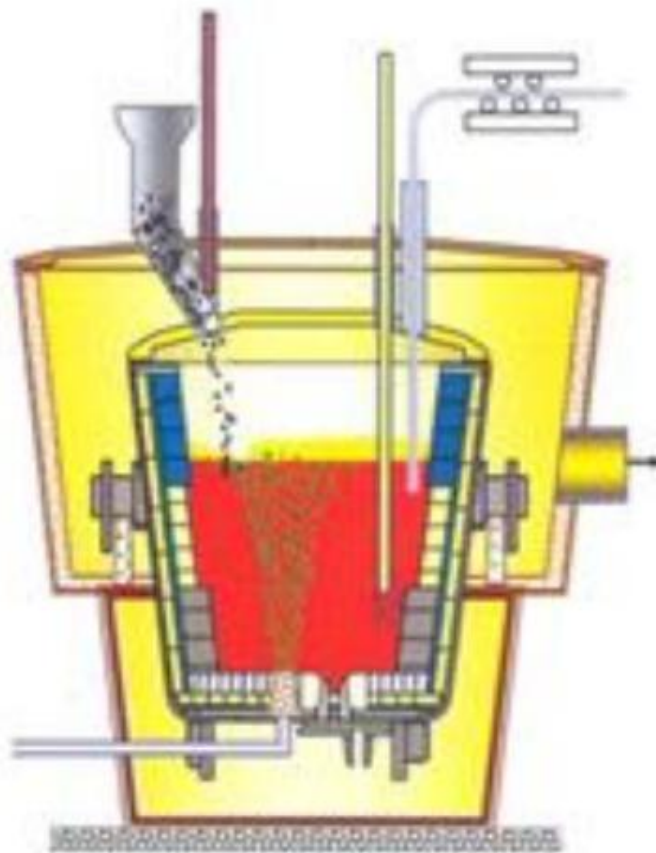


Figura 3.4: Processo de degaseificação VD (Rizzo. E.M.S. (2005)).

### 3.2- Modelagens Física e Matemática

Dentre as ferramentas utilizadas para estudo de novas tecnologias e fenômenos físicos, encontram-se as modelagens físicas e matemáticas. Na modelagem física, protótipos do equipamento ou processo são construídos, respeitando o princípio da similaridade, enquanto na modelagem matemática, os processos de interesse são representados por meio das equações que regem os fenômenos envolvidos. A solução destas equações permite realizar previsões sobre o comportamento dos processos, em diferentes condições operacionais.

A simulação matemática de processos vem apresentando um crescimento acentuado, à medida que a tecnologia computacional também é desenvolvida. A principal vantagem da modelagem matemática está relacionada ao seu baixo custo e rapidez na obtenção de resultados. Na maioria dos casos, o custo envolvido no desenvolvimento de modelos matemáticos é muitas ordens de grandeza menor que o custo envolvido na investigação experimental. O custo experimental também aumenta bruscamente, à medida que o processo

aumenta fisicamente de tamanho e os estudos tornam-se mais complexos. Além disto, enquanto os preços de muitos itens utilizados para a aquisição de dados experimentais têm aumentado, os custos envolvidos com a aquisição de tecnologias computacionais cada vez mais avançadas têm sido reduzidos. O estudo de diferentes configurações e procedimentos operacionais adotados para o processo pode também ser realizado em poucos dias ou semanas, utilizando modelos matemáticos. Por outro lado, um trabalho experimental para investigar os mesmos efeitos poderia demandar muito mais tempo (PATANKAR, 1980).

Outro fator relevante para a utilização de modelos matemáticos é a facilidade de obtenção de informações mais completas sobre o sistema em estudo. Diferentemente da situação encontrada em experimentos, não há dificuldade de se obter dados em qualquer parte do domínio nos modelos computacionais e não existe a preocupação relativa a perturbações no escoamento, com a utilização de aparatos para aquisição de dados.

Finalmente, os modelos matemáticos possuem a capacidade de simular situações ideais (que podem ser utilizadas como parâmetro de comparação com o processo real) e estão livres de erros de medidas, inerentes a qualquer equipamento de medição utilizado para a aquisição de dados experimentais, tanto em modelos físicos (escala reduzida e plena) quanto no processo real.

As vantagens apresentadas pelo uso de modelos matemáticos são impressionantes, mas isso não significa que a investigação experimental deixe de ser importante no estudo de processos. O conhecimento dos pontos fortes e fracos de cada uma das técnicas é essencial para a escolha da abordagem a ser utilizada e de como desenvolver um trabalho, associando as duas técnicas.

Neste sentido, não existe dúvida de que a experimentação é um método muito importante para a obtenção de dados sobre um fenômeno físico. Por isso, a validação dos modelos matemáticos, utilizando dados experimentais, é necessária. A figura 3.5 mostra um esquema que ilustra, perfeitamente, o procedimento para estudo de processos e desenvolvimento de modelos computacionais (OBERKAMPF, 2002).

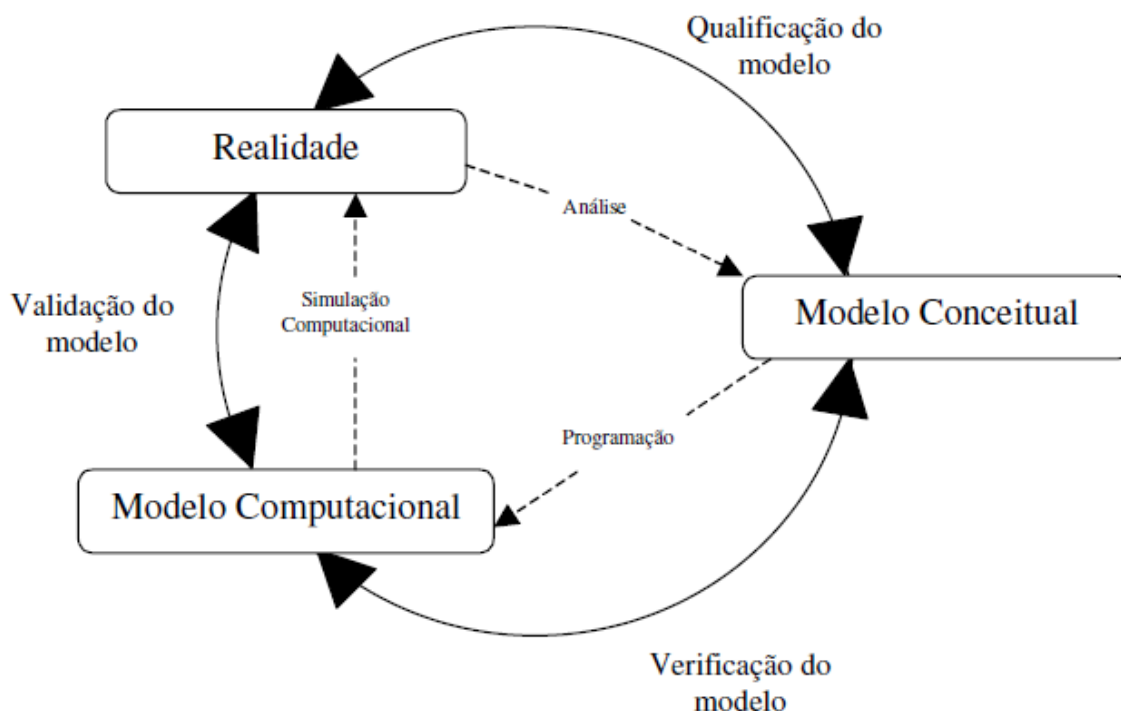


Figura 3.5: Esquema das etapas de modelagem e simulação(OBERKAMPF, 2002).

### 3.2.1- Fluidodinâmica computacional

Elias (2010) argumenta que a fluidodinâmica computacional (CFD – Computational Fluid Dynamics) é uma importante ferramenta técnica utilizada para a simulação de sistemas onde que envolvem o escoamento de fluidos, transferência de calor e outros processos físicos correlatos. As simulações que utilizam a fluidodinâmica computacional podem fornecer uma grande quantidade de informações sobre um determinado sistema a custos reduzidos, com grande rapidez e permitindo acesso a dados em locais onde seriam impossíveis por meio de modelamento físico ou dados industriais. Para uma utilização correta desta ferramenta, é importante conhecer os métodos numéricos e entender as simplificações formuladas, sabendo que estas influenciam diretamente os resultados. Todo modelo matemático deve, contudo, ser validado, seja por meio de modelamento físico, seja por meio de dados industriais. Esta prática é importante principalmente no escoamento turbulento, uma vez que ainda não há um modelo de turbulência de aplicação geral.

Apesar do uso da fluidodinâmica computacional ser relativamente recente, as equações que a regem não são. Bird et al (1960) explica que a modelagem matemática do escoamento de fluidos envolve a solução das equações de conservação global de massa (equação da continuidade) e de quantidade de movimento, utilizando métodos numéricos. A forma geral da equação de conservação é apresentada na equação 3.1.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho u\phi) = \text{div}(\Gamma_{\phi} \text{grad}\phi) + S_{\phi} \quad (3.1)$$

Onde:

$u$  = componente vetorial da velocidade ( $u, v, w$ ) nas direções  $x, y$  ou  $z$ , respectivamente;

$\phi$  = variável dependente, podendo ser 1 (equação da continuidade) ou  $u, v, w$  (equações de conservação de quantidade de movimento), que são as componentes de velocidade nas direções  $x, y$  e  $z$ , respectivamente;

$\rho$  = densidade do fluido;

$t$  = tempo;

$\Gamma_{\phi}$  = coeficiente de difusão da variável  $\phi$ ;

$S_{\phi}$  = termo fonte da variável  $\phi$ .

Para obtenção da equação da continuidade, tem-se que assumir  $\phi = 1, \Gamma_{\phi} = 0$  e  $S_{\phi} = 0$ .

Nesta equação estão representados o termo transiente de acúmulo (1º termo), o termo convectivo (2º termo), o termo difusivo (3º termo) e o termo fonte (4º termo da equação). A solução numérica destas equações no estudo do escoamento do fluido fornece os campos de pressão e a velocidade no interior do domínio de cálculo.

### 3.2.2- Equacionamento do fluxo turbulento

Quando o regime de escoamento é predominantemente turbulento, um modelo de turbulência deve ser acoplado às demais equações de conservação. Segundo Bird (1960), o método mais comum é trabalhar com a velocidade suavizada com o tempo (*time-smoothed velocity*). Este modelo é obtido a partir da média das velocidades instantâneas, avaliadas

durante um curto período de tempo. Desta forma, a velocidade suavizada na direção x pode ser obtida pela equação 3.2.

$$\bar{u} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} u. dt \quad (3.2)$$

Onde:

$\bar{u}$  = velocidade suavizada na direção x;

$\Delta t$  = intervalo de tempo usado para se fazer a integração;

$u$  = valor instantâneo da velocidade na direção x.

Desta forma, pode-se afirmar que os valores instantâneos da velocidade em x podem ser obtidos por meio da soma da velocidade suavizada com a flutuação de velocidade na mesma direção, conforme a equação (3.3), onde  $u'$  é a flutuação da velocidade na direção x.

$$u = \bar{u} + u' \quad (3.3)$$

Tanto as velocidades suavizadas quanto as velocidades instantâneas nas direções y e z podem ser obtidas analogamente.

Com base nestas considerações, as equações da continuidade e do movimento podem ser reestruturadas em termos de velocidades suavizadas, como pode ser observado nas equações 3.4 e 3.5.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho u) = 0 \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \text{div}(\rho \bar{u} \phi) = \text{div}(\Gamma_{\phi} \text{grad} \phi) + \overbrace{\left[ -\frac{\partial(\rho \bar{u}' \phi')}{\partial x} - \frac{\partial(\rho \bar{v}' \phi')}{\partial y} - \frac{\partial(\rho \bar{w}' \phi')}{\partial z} \right]}^{\text{Termos adicionais}} + S_{\phi} \quad (3.5)$$

Onde:

$u' \phi'$  é a média do produto das flutuações das velocidades, com as flutuações da variável dependente, sendo elas, as componentes de velocidade nas direções x, y e z, respectivamente.

Estes termos adicionais tornam a solução das equações do movimento no escoamento turbulento mais complicadas. Desta forma, tornou-se necessário o desenvolvimento de modelos de turbulência para a solução destes termos. Estes modelos são normalmente semi-empíricos e necessitam validação experimental.

Bird (1960) ainda argumenta que, em 1877, Boussinesq propôs que a avaliação destes termos adicionais, associados às flutuações de velocidade, poderiam ser feitas por meio de uma analogia à equação de Newton da viscosidade, apresentada na equação 3.6:

$$\rho \overline{u'_i u'_j} = -\mu_t \left( \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.6)$$

Onde:

$\mu_t$  = viscosidade turbulenta (kg/m.s);

i e j = notação para direções e velocidades. i ou j = 1 corresponde à direção x; i ou j = 2 corresponde à direção y; e i ou j = 3 corresponde à direção z.

Adotando esta abordagem, as equações de conservação de quantidade de movimento, apresentadas na equação 3.5 podem ser aplicadas sem alterações, utilizando uma viscosidade efetiva ( $\mu_{\text{eff}}$ ), como o coeficiente de difusão. A viscosidade efetiva ( $\mu_{\text{eff}}$ ) é obtida ao se somar a viscosidade dinâmica ( $\mu$ ) e viscosidade turbulenta ( $\mu_t$ ). A viscosidade turbulenta não é uma propriedade do fluido, devendo ser avaliada ou estimada para cada sistema em particular.

Creech (1997) discute que o escoamento turbulento é governado pelas equações de Navier-Stokes variantes no tempo, mas a grande complexidade destas equações permitem soluções numéricas diretas apenas para geometrias simples com baixos números de Reynolds com a tecnologia atual. Para resolver escoamentos complexos e com alta complexidade, são usados modelos com aproximações. A equação de Navier-Stokes do Reynolds Médio (RANS) usa o tempo médio na equação de Navier-Stokes. O processo produz novos termos na equação de Navier-Stokes, chamados de tensão de Reynolds e fluxo de Reynolds, que são determinados por meio do uso das variáveis k e  $\epsilon$ , que, por sua vez, são determinadas com o uso de equações de transferência adicionais.

A equação da continuidade para a conservação de massa é mostrada a seguir, sabendo que V é o vetor de velocidade do fluido  $\{V_x, V_y, V_z\}$  e o termo  $S_{\text{mass}}$  é o termo fonte, para a criação ou

destruição de massa. O termo fonte é utilizado na fronteira do domínio, como alternativa para condições de contorno padrões.

$$\nabla \cdot V = S_{mass} \quad (3.7)$$

A equação de Navier-Stokes de tempo médio, para transferência de quantidade de movimento é mostrada a seguir.

$$\nabla \cdot (\rho V \otimes V) = \nabla \left( \mu_{eff} (\nabla V + (\nabla V)^T) \right) - \nabla p + B + S_{mom} \quad (3.8)$$

onde:

$\rho$  é a densidade do fluido;

$p$  é a pressão existente no sistema;

$B$  é o vetor relacionado à força do corpo, representando sua flutuabilidade;

$S_{mom}$  é o termo fonte para a criação ou destruição de quantidade de movimento, análogo à  $S_{mass}$ .

A viscosidade efetiva,  $\mu_{eff}$  é definida como a soma da viscosidade molecular ( $\mu_0$ ) com a viscosidade turbulenta ( $\mu_t$ ), avaliada pelo modelo de turbulência.

$$\mu_{eff} = \mu_0 + \mu_t \quad (3.9)$$

A distribuição de temperaturas pode ser obtida por meio da solução da equação de conservação de energia.

$$\nabla \cdot (\rho H V) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) \quad (3.10)$$

Onde  $T$  é a temperatura e  $H$  é a entalpia total, definida por:

$$H = h + \frac{1}{2} |V \cdot V| \quad (3.11)$$

A entalpia estática ( $h$ ), para uma determinada temperatura ( $T$ ) e pressão é obtida por:

$$h = \int_0^T C_p(T') dT' - \int_0^{T_{ref}} C_p(T') dT' \quad (3.12)$$

Onde  $C_p$  é o calor específico do material e  $T'$  é uma variável temporária para integração.  $T_{ref}$  é a temperatura de referência, que para termos de entalpia estática, é definida como zero. A condutividade térmica efetiva é definida por:

$$k_{eff} = k_0 + k_t \quad (3.13)$$

Onde  $k_0$  é a condutividade e  $k_t$  é a condutividade turbulenta, definida por:

$$k_t = \frac{C_p \mu_t}{Pr_t} \quad (3.14)$$

Onde  $Pr_t$  é a constante de Prandtl.

A pressão hidrostática é geralmente ignorada em todas as equações, logo, a pressão no modelo é a pressão verdadeira menos a pressão hidrostática.

$$p = p_{tot} - \rho g z \quad (3.15)$$

Nas coordenadas cartesianas, o produto do tensor é a classificação de dois tensores, definidos como:

$$(V \otimes V) = \begin{bmatrix} V_x V_x & V_x V_y & V_x V_z \\ V_y V_x & V_y V_y & V_y V_z \\ V_z V_x & V_z V_y & V_z V_z \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

O gradiente dos vetores é definido por:

$$\nabla V = \left\{ \frac{\partial V_x}{\partial x} \frac{\partial V_y}{\partial y} \frac{\partial V_z}{\partial z} \right\} \quad (3.17)$$

$$\nabla^2 V = \left\{ \frac{\partial^2 V_x}{\partial x^2} \frac{\partial^2 V_y}{\partial y^2} \frac{\partial^2 V_z}{\partial z^2} \right\} \quad (3.18)$$

O vetor divergente é definido como:

$$\nabla \cdot V = \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z} \quad (3.19)$$

A divergência da classificação dos dois tensores é definida como:

$$\nabla \cdot (V \otimes V) = + \frac{\partial V_x}{\partial x} V_x + \frac{\partial V_x}{\partial x} V_y + \frac{\partial V_x}{\partial x} V_z + \frac{\partial V_y}{\partial y} V_x + \frac{\partial V_y}{\partial y} V_y + \frac{\partial V_y}{\partial y} V_z + \frac{\partial V_z}{\partial z} V_x + \frac{\partial V_z}{\partial z} V_y + \frac{\partial V_z}{\partial z} V_z \quad (3.20)$$

A magnitude do vetor é definida como:

$$|V| = \sqrt{V_x^2 + V_y^2 + V_z^2} \quad (3.21)$$

e, finalmente, a multiplicação de dois vetores no termo fonte da equação é definido por:

$$SV = \{S_x V_x, S_y V_y, S_z V_z\} \quad (3.22)$$

Segundo Creech (1997) e Elias (2010), o modelo de turbulência do tipo k-ε, proposto por Launder e Spalding (1972), é o que tem fornecido resultados satisfatórios em aplicações metalúrgicas, para a avaliação da viscosidade turbulenta.

O modelo k-ε incorpora duas equações diferenciais adicionais, com o objetivo de estimar a viscosidade turbulenta. A primeira determina a energia cinética de turbulência k e a segunda determina o valor associado à taxa de dissipação da energia cinética de turbulência ε. O parâmetro k é uma função das flutuações das componentes da velocidade, conforme apresentado na equação (3.23).

$$k = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}) \quad (3.23)$$

Onde:

k = energia cinética de turbulência (m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>);

$\overline{u'^2}, \overline{v'^2}, \overline{w'^2}$  = médias do quadrado das flutuações das componentes de velocidade nas direções x, y e z, respectivamente.

No modelo de turbulência k-ε, a viscosidade turbulenta é determinada pela equação 3.24.

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.24)$$

Onde:

$\mu_t$  = viscosidade turbulenta (kg/m.s);

$\rho$  = densidade do fluido (kg/m<sup>3</sup>);

$C_\mu$  = constante adimensional = 0,09;

$k$  = energia cinética de turbulência (m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>);

$\epsilon$  = taxa de dissipação da energia cinética de turbulência (m<sup>2</sup>/s<sup>3</sup>).

Este modelo se encontra bem estabelecido no meio acadêmico e em muitas situações industriais, tendo sido amplamente validado. Sua utilização, contudo, exige que duas equações diferenciais parciais adicionais sejam resolvidas.

### 3.2.3- escoamento multifásico

Segundo Neves (2012), quando existe deslocamento simultâneo de materiais que se apresentam em mais de uma fase, ocorre o escoamento multifásico. No contexto de fluidodinâmica, o conceito de fase pode ser interpretado como volumes imiscíveis de material em um meio comum. As fases são separadas por uma interface, que é caracterizada em função das fases que a constituem como, gás-líquido, gás-sólido, líquido-líquido ou líquido-sólido.

Souza (2010) pondera que diversos autores exploraram o desenvolvimento de modelos para previsão do comportamento de fluidos em escoamento bifásico em estado estacionário, contudo, estes modelos podem ser divididos em dois grupos distintos, sendo eles os modelos empíricos e os modelos fenomenológicos. Os modelos empíricos são baseados apenas na determinação de correlações obtidas por meios experimentais, enquanto os modelos fenomenológicos são baseados em equações de balanço de massa e de quantidade de movimento, com equações de fechamento determinadas por intermédio de experimentos em função do padrão de escoamento, ou seja, atualmente, para o escoamento multifásico, mesmo os modelos fenomenológicos possuem termos empíricos.

O escoamento multifásico está presente nos mais diversos sistemas e processos industriais, sobretudo na indústria metalúrgica. Contudo, a forma de se abordar a situação depende do nível de precisão exigido e de características específicas da aplicação. Segundo Munkejord (2006), os métodos de se resolver um modelo de escoamento multifásico são:

- a) *Interface tracking*: possui um elevado custo computacional, pois é baseado em malhas que se ajustam em função da deformação da interface;
- b) *Particle tracking*: a fase dispersa, com dimensão menor que a discretização (malha) é acompanhada segundo um referencial lagrangiano, enquanto o fluido é regido por uma malha fixa;
- c) *Multi-fluid*: método mais indicado para escoamento em dutos. Considera que todas as fases envolvidas, sejam elas sólidas, líquidas ou gasosas, são fluidos interpenetrantes. Esta abordagem permite a realização de cálculos em sistemas complexos, porém, a compreensão do comportamento de cada fase, a definição de um modelo matemático bem-posto, a relação de fechamento e a utilização de métodos numéricos robustos e precisos para a solução do modelo são aspectos complexos neste método.

#### 3.2.4- Modelagem Física

O modelamento físico é uma importante ferramenta na solução de problemas industriais. É capaz de fornecer resultados com grande precisão, em tempo reduzido e a baixo custo, quando comparado com experimentos em processos industriais, embora, quando validado, o modelamento matemático seja mais vantajoso economicamente. A construção e condução de experimentos em modelos físicos para estudo de processos industriais se baseiam no princípio da similaridade.

Segundo Viena (1989), dois sistemas são similares quando exibem uma relação constante entre os valores de grandezas correspondentes, denominada relação de similaridade ou escala. O princípio da similaridade não envolve apenas características geométricas, mas também características mecânicas, térmicas e químicas.

A similaridade geométrica exige que as razões entre dimensões correspondentes sejam sempre constantes.

A similaridade mecânica compreende as similaridades estática, cinemática e dinâmica.

Se dois sistemas são geometricamente similares, também são estaticamente similares. A similaridade cinemática existe quando, em sistemas geometricamente similares, partículas correspondentes traçam trajetórias geometricamente similares no mesmo intervalo de tempo. A similaridade dinâmica é relacionada às forças que aceleram e retardam massas que se movimentam. Se dois sistemas são geométrica e cinematicamente similares, também o são

dinamicamente. A figura 3.6 mostra esquematicamente esta condição. A figura 3.6 (a) mostra a movimentação de uma partícula hipotética do vértice 1 ao vértice 2 em um elemento de volume também hipotético, em um tempo  $t_1$ . Na escala reduzida deste mesmo elemento de volume mostrada na figura 3.6 (b), a movimentação de uma partícula equivalente dos vértices 1' ao vértice 2' deve levar o tempo relativo à relação de proporcionalidade. No caso em que é usada a similaridade de Froude, o tempo  $t_2$  deve ser relacionado com a raiz quadrada do fator de escala para que a similaridade dinâmica seja atendida.

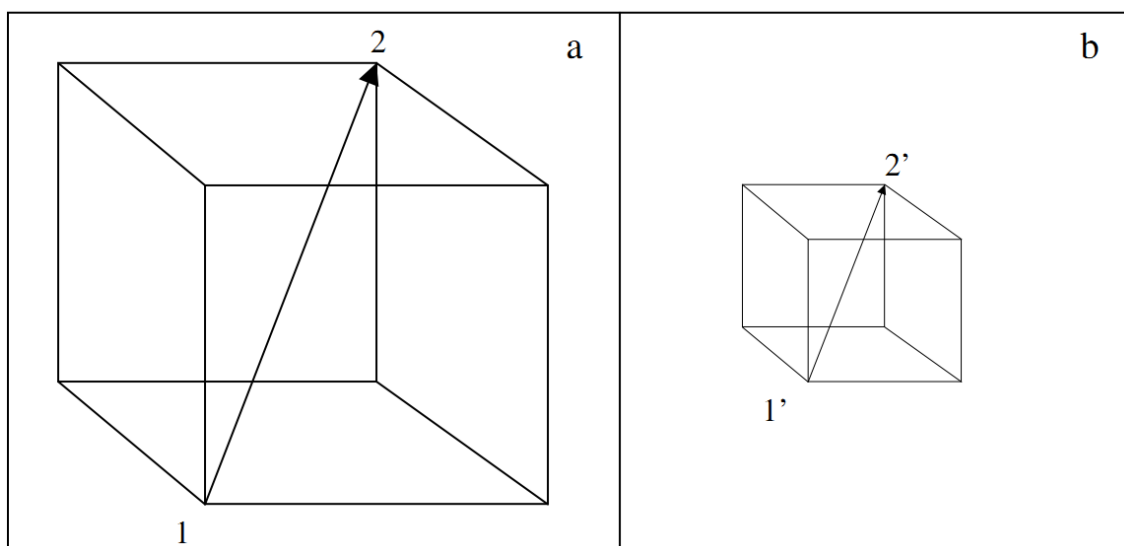


Figura 3.6: Desenho esquemático mostrando condição de similaridade dinâmica.

As condições de similaridade dinâmica são usualmente expressas através de números adimensionais, que estabelecem relações entre as forças relevantes que atuam nos sistemas. Nos modelos físicos para estudo do escoamento do aço em reatores de lingotamento contínuo, a igualdade dos números de Reynolds e Froude com o sistema real são usados como critério de similaridade (Wollmann, 1999).

Em modelos físicos de processos que envolvam o aço, usando água como fluido, quando se usa escala reduzida, é impossível conseguir igualdade simultânea destes dois números. Neste caso, deve-se optar por aquele que representa melhor o sistema de interesse. Para sistemas metalúrgicos, tem-se mostrado que a igualdade do número de Froude é a que melhor representa a similaridade entre o modelo físico e o industrial (Wollmann, 1999). Nesse caso, ao desconsiderar o número de Reynolds, considera-se que a força de inércia é muito superior a

força viscosa. De fato, isso ocorre em regimes turbulentos, porém, em regimes laminares, a força viscosa é equivalente a força de inércia. No sistema a ser estudado neste trabalho, prevalece o regime turbulento.

O número de Reynolds é normalmente utilizado como critério para estabelecimento do regime de escoamento, laminar ou turbulento, no escoamento de fluidos. Ele é um número adimensional definido genericamente pela equação (3.25):

$$Re = \frac{V.L.\rho}{\mu} \quad (3.25)$$

Onde:

Re= número de Reynolds;

L= dimensão característica (definida de acordo com a configuração do sistema);

V= velocidade média do fluido;

$\rho$ = densidade do fluido;

$\mu$ = viscosidade dinâmica do fluido.

O número de Froude é também um número adimensional, definido pela equação (3.26):

$$Fr = \frac{V^2}{g.L} \quad (3.26)$$

Fr= número de Froude;

V= velocidade média do fluido;

g= aceleração da gravidade;

L= dimensão característica (definida de acordo com a configuração do sistema).

Em estudos de escoamento do aço, a água pode ser usada como fluido, pois possui aproximadamente a mesma viscosidade cinemática do aço. A viscosidade cinemática é definida como a razão entre a viscosidade dinâmica e a densidade do fluido, podendo também ser chamada de difusividade de quantidade de movimento.

### 3.2.4.1- Curvas de mistura

Enquanto Silveira (2011) define a taxa de circulação em um desgaseificador a vácuo RH, como a quantidade de aço líquido que passa por um plano perpendicular à perna de descida por unidade de tempo, Silva (2010) ressalta que, devido à grande importância deste parâmetro, vários autores propuseram equações para determinar seu valor, dentre eles, Watanabe (1966), que relaciona a taxa de circulação com o diâmetro da perna de subida e com a vazão de argônio, Kuwabara (1966), que além de considerar o diâmetro da perna de subida e a vazão de argônio, incluiu o efeito da pressão na perna de descida e no vaso superior. Ono (1981) por outro lado, desconsiderou o efeito das pressões e relacionou a taxa de circulação com os diâmetros das pernas de subida e de descida, com a vazão de gás e com a profundidade de imersão do nível de injeção de argônio em relação ao aço. Seshadri (1986) considera que o único parâmetro relevante para a previsão da taxa de circulação é a vazão de argônio, correlacionando estas duas variáveis, enquanto Kamata (1998) considera em sua equação o efeito da aceleração da gravidade, da altura de líquido no vaso superior pressão sobre a perna de descida e o coeficiente de fricção do sistema. Em ambos os casos, contudo, existe a concordância de que a forma que ocorre o escoamento dos fluidos no reator tem relação direta com a taxa de circulação.

Sasaki (2005) pondera que existem dois modelos de escoamento ideais na literatura, sendo eles o de mistura perfeita (*Backmix flow ou Continuous Stirred Tank Reactor - CSTR*) e o pistonado (*Plug flow*). Qualquer outro comportamento no escoamento é considerado como não-ideal.

O escoamento que segue o modelo pistonado é aquele onde todos os elementos de volume que compõe o fluido, por menores que sejam, escoam ordenadamente, a uma mesma velocidade, provocando uma situação onde não existe mistura por dispersão axial. No escoamento de mistura perfeita, por outro lado, os elementos de volume se misturam, provocando uma situação onde a composição do fluido seja perfeitamente homogênea no interior do reator.

Sasaki (2005) afirma ainda que fenômenos de escoamento existentes no interior de reatores podem ocasionar desvios da idealidade, levando o escoamento aos modelos não-ideais. Alguns dos fenômenos citados pelo autor são apresentados a seguir:

- a) Escoamento preferencial: Ocorre quando uma parte significativa do fluido escoia através do equipamento em tempo menor que o restante;
- b) Curto circuito: Ocorre quando uma parte do fluido escoia através do reator sem percorrer todo o seu volume. Este fenômeno não é desejável, pois diminui a eficiência do reator;
- c) Zonas mortas: São regiões do reator onde o fluido fica isolado, não interagindo com as regiões ativas;
- d) Zona estagnante: São regiões do reator onde o fluido fica estagnado, interagindo fracamente com as regiões ativas. A troca de matéria entre estas regiões ocorre lentamente;
- e) Reciclo: Ocorre quando uma fração do fluido é recirculada para a entrada ou para o interior do equipamento;
- f) Retromistura: Ocorre quando uma fração do fluido apresenta movimento na direção contrária ao fluxo principal.

As curvas de distribuição de tempos de residência (DTR) são uma ferramenta técnica que permitem a detecção de alguns destes desvios da idealidade. Soares (1985) ilustra por meio de gráficos do tipo estímulo-resposta os escoamentos ideais, do tipo pistonado e mistura perfeita e o escoamento real, que não atende aos parâmetros de idealidade. Estes gráficos são apresentados na figura 3.7.

A técnica de estímulo-resposta, utilizada na construção de curvas DTR, consiste na adição de um traçador na entrada do reator e no monitoramento da concentração deste mesmo traçador na saída do reator. A injeção do traçador pode ser realizada na forma de pulso, na forma de degrau, ou mesmo de forma aleatória, como mostra a figura 3.8.

A injeção de traçador na forma de pulso é a opção mais adequada para o estudo em reatores de mistura, como o caso do desgaseificador a vácuo RH, pois, como o reator é abastecido na forma de bateladas, é tecnicamente inviável o uso de qualquer outro método sem afetar de forma significativa o volume de material em processo, além do fato que esta forma de injeção permite a obtenção das informações desejadas.

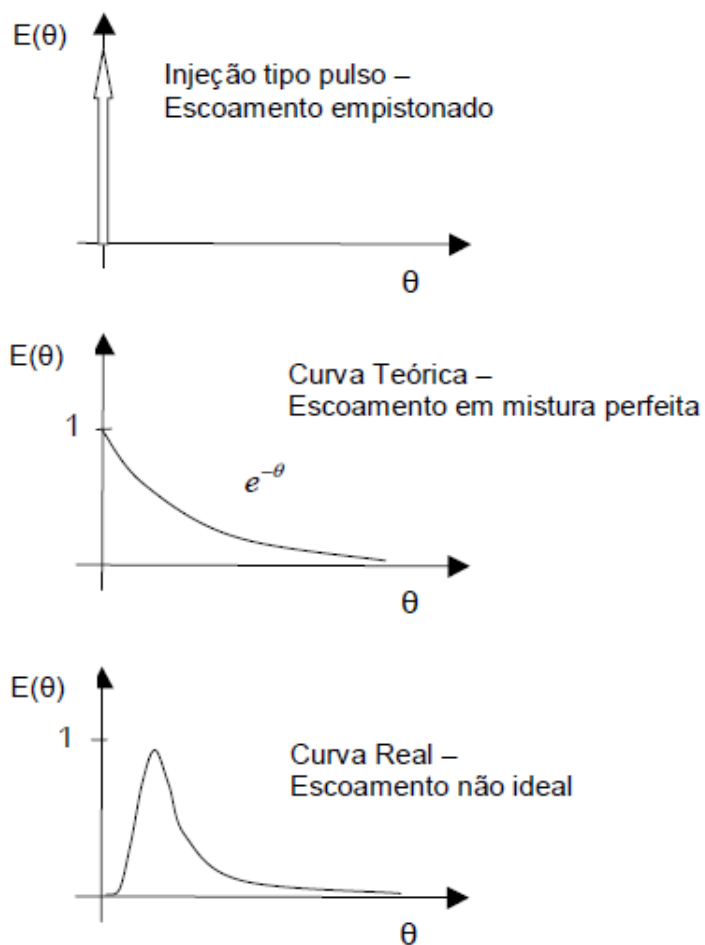


Figura 3.7: Curvas DTR para escoamento empistonado, em mistura perfeita e não ideal (Soares, 1985).

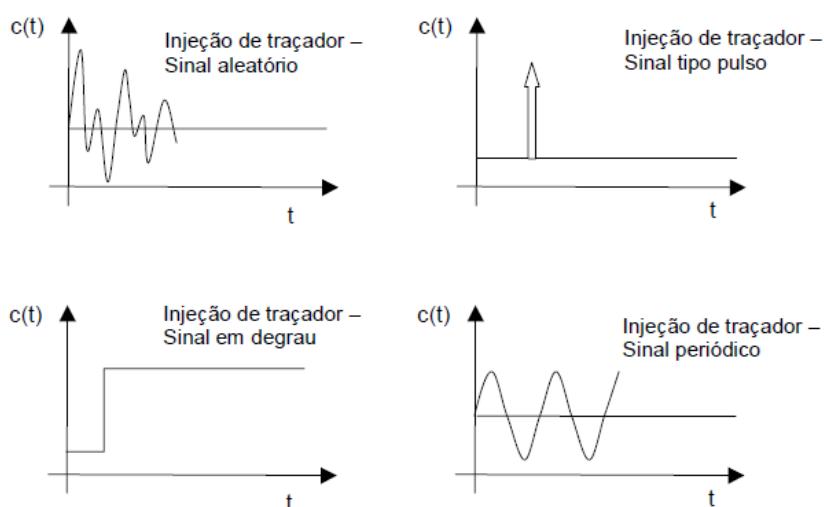


Figura 3.8: Representação esquemática de diferentes métodos de injeção de traçador utilizados no método estímulo-resposta (Sasaki, 2005).

Kato (1993) construiu curvas DTR para uma panela de aciaria sob o efeito de um degaseificador a vácuo RH. Foram apresentadas curvas obtidas para dois diferentes volumes de aço no reator (240t e 300t), além de plotar as funções de distribuição de tempos de residência para escoamento ideal, obtidas para um sistema de mistura em série com N estágios, conforme a equação 3.27. (N=1 para mistura perfeita, N=∞ para escoamento pistonado). Este gráfico é apresentado na figura 3.9.

$$E(t) = \frac{1}{\tau} \cdot \frac{N^N}{(N-1)!} \cdot \exp\left(\frac{-Nt}{\tau}\right) \dots \quad (3.27)$$

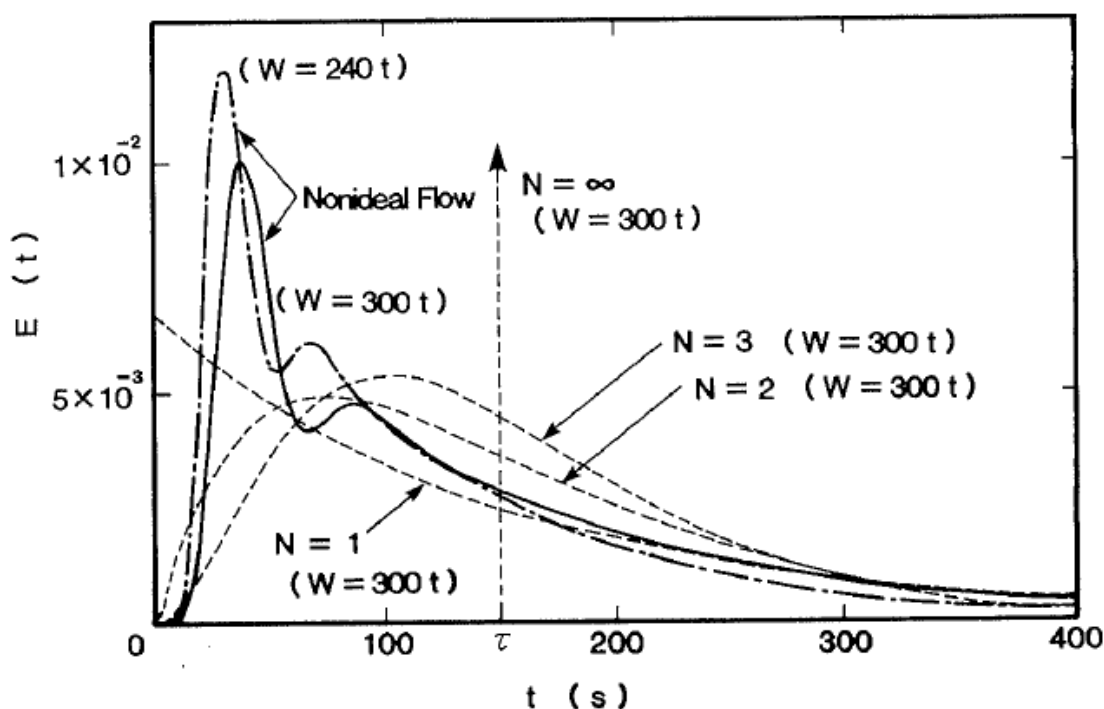


Figura 3.9: Funções DTR para panelas de 240t e 300t sob efeito de um degaseificador a vácuo RH(Kato, 1993).

Contudo, Kato (1993) não deixa claro em seu trabalho o processo de obtenção das curvas DTR nem sua importância em seu estudo. Neves (2012) por outro lado, explica que utilizou a mesma metodologia de Seshadri e Costa (1986), considerando a taxa de circulação como a razão entre o volume de líquido contido na panela ( $m^3$ ) e o tempo necessário para circular um volume de trabalho, ou tempo de circulação (s). Neves (2012) afirma ainda que em seu trabalho, um sensor foi fixado junto à perna de descida do reator, enquanto a injeção de traçador (10 ml de uma solução de 20%<sub>p</sub> de KCl) foi feita, na forma de pulso, na perna de subida. O tempo de circulação foi obtido pela diferença entre o tempo obtido no primeiro vale

e o obtido na primeira detecção, sendo representados como os pontos  $t_2$  e  $t_1$ , respectivamente, na figura 3.10.

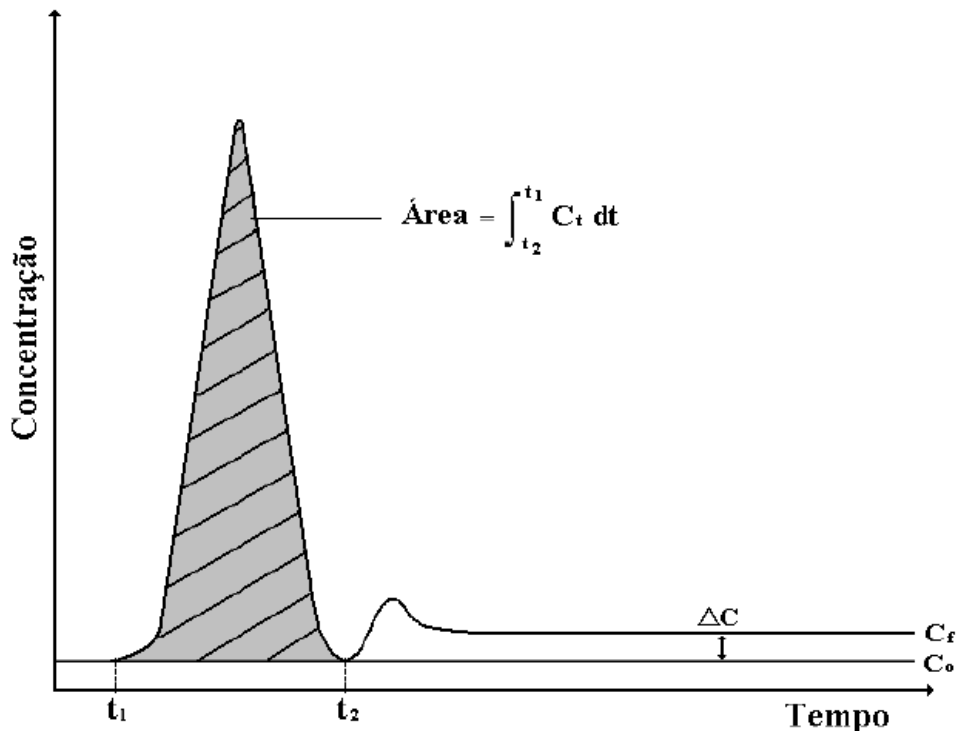


Figura 3.10: Representação esquemática de uma curva de distribuição de tempo de homogeneização (Neves, 2012).

#### 3.2.4.2- Análise de imagens

A análise de imagens é uma importante ferramenta utilizada para estudar fenômenos em diversos processos industriais. Sakaguchi (1995) utilizou uma câmera de filmagem para registrar e comparar o tamanho das bolhas de nitrogênio em diferentes condições operacionais. O autor argumenta que até aquele momento a maioria dos estudos era realizado à pressão atmosférica, contudo, a pressão reduzida causada pelo desgaseificador a vácuo afetaria a distribuição de tamanho das bolhas. A figura 3.11 mostra a captura da imagem da filmagem da formação de bolhas em um modelo físico a frio para duas condições distintas. Na figura 3.11 (a) a vazão de gás é de 2,0l/min e a pressão sobre o reator de 0,101MPa. Na figura 3.11 (b) a vazão de gás permanece como 2,0l/min, contudo a pressão é reduzida para 0,0213MPa.

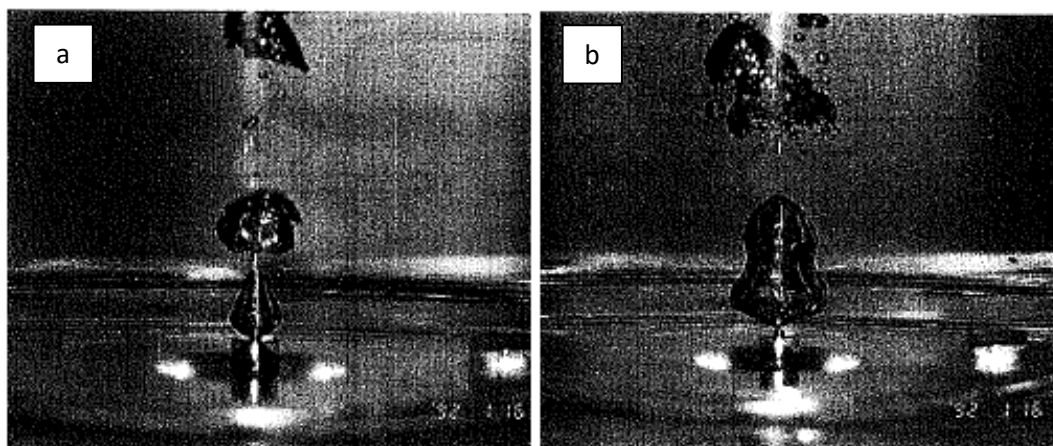


Figura 3.11: Bolhas imediatamente após desprenderem do duto de injeção ( $Q=2,0\text{l/min}$ ,  $P=0,101\text{MPa}$  (a) e  $P=0,0213\text{MPa}$  (b)) (Sakaguchi, 1995).

Por meio desta técnica, Sakaguchi (1995) foi capaz de relacionar o tamanho da bolha de gás formada com a vazão de gás soprada no reator, possibilitando associar o coeficiente volumétrico de transferência de massa com a pressão de trabalho.

Pérez (2007) utilizou uma técnica baseada em filmagem de alta velocidade e acompanhamento de múltiplos objetos em movimento para estudar o efeito do surfatante em cada bolha presente na pluma. Este trabalho envolveu o desenvolvimento de um algoritmo para processamento das imagens, capaz de isolar e medir as propriedades geométricas das bolhas, em uma seqüência de imagens gravadas com um intervalo de 1ms entre elas.

Pérez afirma que a filmagem de alta velocidade permite a aquisição de uma seqüência ordenada de imagens de objetos que estejam em movimento e/ou objetos que estejam mudando de forma. Estes eventos podem então ser acompanhados e medidos em relação ao tempo. A figura 3.12 apresenta dois exemplos de uso da filmagem de alta velocidade. Em “a” é mostrada a técnica de superposição de imagens para estudo de trajetória e velocidade de partículas (no caso, bolhas). Em “b” é mostrada a técnica para avaliação da mudança de forma no decorrer do tempo.

A figura 3.13 apresenta outros exemplos de imagens adquiridas por meio da filmagem com câmera de alta velocidade. A figura 3.13 (a) mostra as bolhas formadas para uma vazão de gás de  $1\text{l/min}$ , enquanto na figura 3.13 (b) a vazão é de  $3\text{l/min}$  e na figura 3.13 (c) a vazão é de  $5\text{l/min}$ . Nos 3 casos o diâmetro do bico de injeção tem um diâmetro de  $5\text{mm}$ , de forma que a

variação no comportamento é consequência exclusivamente da vazão. A filmagem permite a avaliação do diâmetro das bolhas e a frequência com que as bolhas atingem a superfície.

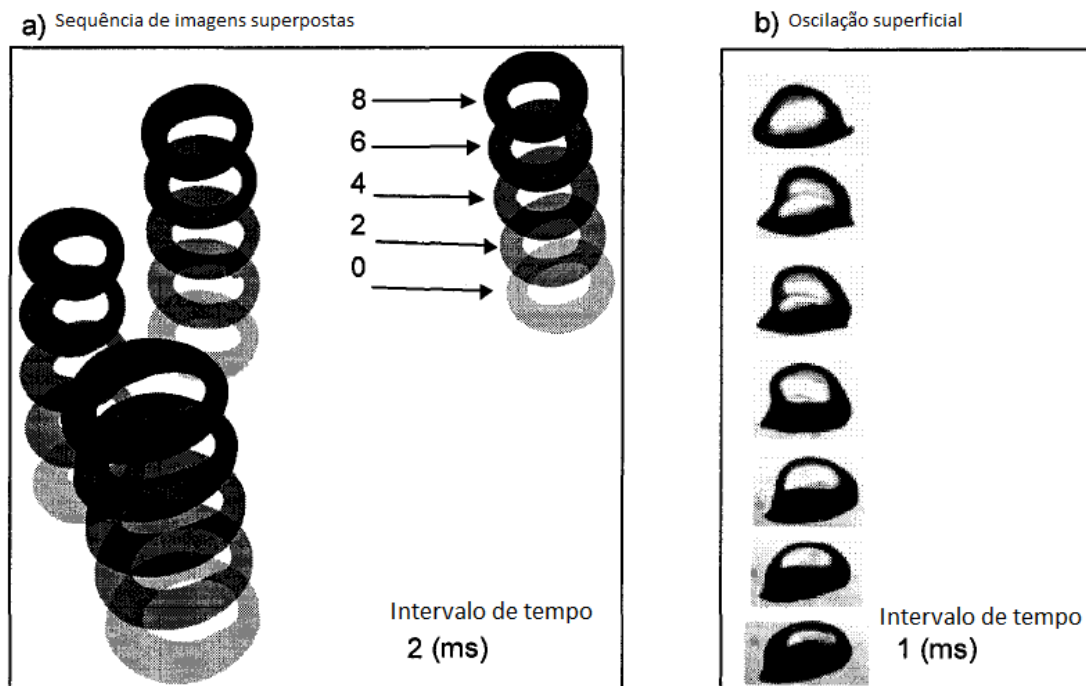


Figura 3.12: Exemplo de filmagem de alta velocidade para (a) movimento de bolhas e (b) mudança de forma (Pérez, 2007).

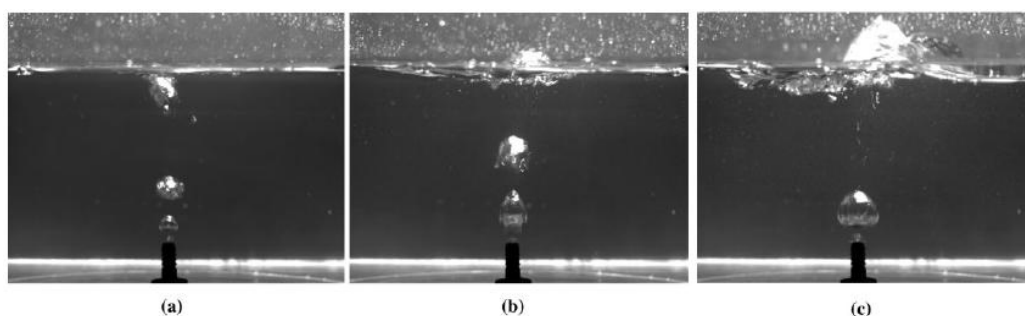


Figura 3.13: Visualização do escoamento de bolhas e da superfície livre em um tanque agitado por coluna de bolhas com vazões de (a) 1,0 l/min, (b) 3,0 l/min, (c) 5,0 l/min (Kim, 2012).

### 3.2.5- Verificação e validação de modelos computacionais

O guia de verificação e validação de simulações fluidodinâmicas computacionais (2002), do instituto americano de aeronáutica e astronáutica apresenta os conceitos de verificação e validação de modelos computacionais. As simulações computacionais fluidodinâmicas de

processo são utilizadas atualmente para projetar, investigar e operar sistemas de engenharia e determinar o desempenho sob diversas condições. Segundo o guia, a verificação consiste em determinar se a implementação do modelo representa de forma adequada a descrição conceitual e a solução do modelo, mas isso não significa um atendimento da representação adequada do mundo real. A estratégia fundamental de verificação consiste em identificar e quantificar os erros na solução computacional. Na fluidodinâmica computacional existem quatro fontes de erro predominantes, sendo elas:

- Discretização espacial insuficiente para convergência;
- Discretização temporal insuficiente para convergência;
- Falta de convergência nas interações;
- Programação do computador.

A figura 3.14 mostra esquematicamente o processo de verificação de um modelo matemático. As atividades mais importantes na verificação de um modelo são o refino sistemático da malha e do salto de tempo.

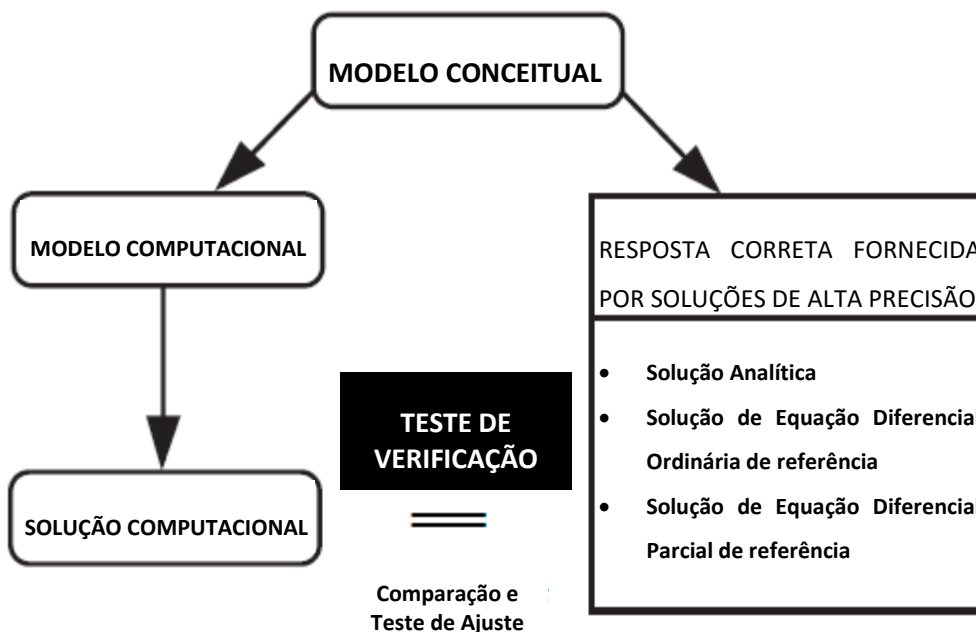


Figura 3.14: Esquema do processo de verificação de um modelo computacional (guia de verificação e validação de simulações fluidodinâmicas computacionais, 2002).

A validação é definida como o processo de determinar o grau de acuidade com que o modelo é capaz de representar o mundo real na perspectiva do usuário do modelo.

Oreskes (1994) argumenta que a verificação e validação de modelos numéricos de sistemas naturais é impossível, pois sistemas naturais (incluindo processos de engenharia) nunca são sistemas fechados. Os modelos podem ser confirmados por meio da concordância entre fenômenos observados e aqueles previstos pelo modelo, mas esta confirmação será sempre inerentemente parcial. O autor exemplifica sua afirmação com uma situação cotidiana:

“se chover amanhã, ficarei em casa revisando o artigo”. No dia seguinte chove, mas um amigo verifica que não estou em casa. A verificação foi falha. Meu amigo conclui que minha afirmação original é falsa. Mas de fato, minha intenção era ficar em casa e trabalhar no artigo. A formulação era verdadeira em relação à minha intenção. Mais tarde, meu amigo fica sabendo que eu não estava em casa porque minha mãe faleceu. Então meu amigo conclui que minha afirmação original não era falsa, mas incompleta. Não foi considerada a possibilidade de uma circunstância extrema. A verificação falhou porque o sistema não era fechado.”

Oreskes (1994) afirma que qualquer sistema, por mais simples que pareça, faz parte de um sistema aberto e complexo e por isso a validação é impossível em um aspecto filosófico.

O guia de verificação e validação de simulações fluidodinâmicas computacionais (2002) argumenta, contudo, que o processo de validação pode ser flexível, dependendo do nível de acuidade e da tolerância que o processo permite.

A figura 3.15 mostra esquematicamente o processo de validação de um modelo matemático, por meio da confrontação entre os resultados obtidos pela modelagem com dados experimentais.

Nestas condições Bayarri (2007) propõe uma metodologia estatística que determina a validade do processo considerando um intervalo de confiança, garantindo uma metodologia bem definida e que considera a situação normal de operação em sistemas, sendo por esta razão, bastante apropriado a processos metalúrgicos.

A metodologia estatística para validação do modelo inclui quatro passos, sendo eles:

- Passo 1: Adaptação estatística do modelo e teste de inclinação;

- Passo 2: Análise de resíduos;
- Passo 3: Teste de hipótese para os coeficientes estatísticos do modelo;
- Passo 4: Determinação de intervalos de confiança para o valor real da quantidade de Interesse.

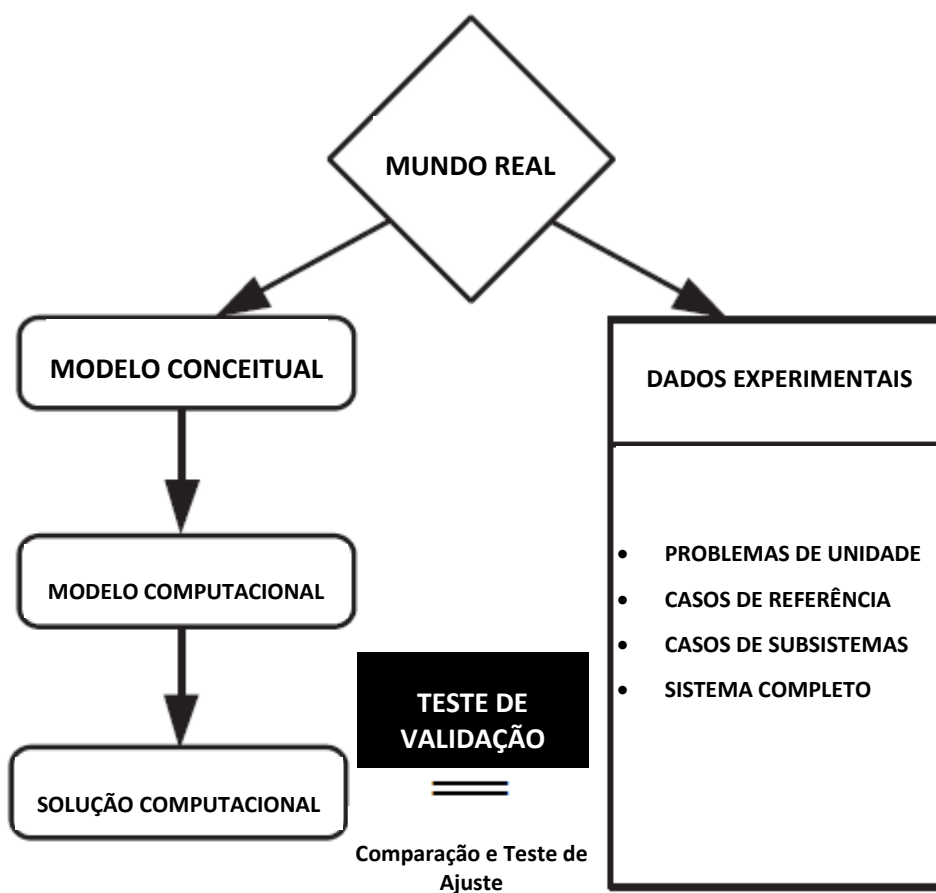


Figura 3.15: Esquema do processo de validação (guia de verificação e validação de simulações fluidodinâmicas computacionais, 2002).

### 3.3- Estudos recentes

Pereira (2011) utilizou um modelo físico de uma panela de aciaria agitada por gás para verificar o efeito de diversas variáveis operacionais no processo de mistura, fenômenos de emulsificação e comportamento da abertura de olho na escória do reator. Foram utilizadas

técnicas de medição da concentração de traçador no reator e velocimetria por imagem de partícula (PIV), mas não foi utilizada a modelagem matemática neste estudo.

Pereira (2011) cita Turkdogan (1996) e Fruehan (1998) ao afirmar que a injeção de gás é usual em processo de fabricação do aço durante o refino secundário. O aço líquido é agitado com gás inerte para a homogeneização da composição química e térmica, além de intensificar as reações de refino metal/escória para reduzir impurezas tais como o enxofre e a remoção de inclusões.

Pereira (2011) demonstra ainda que existem diferenças nos resultados dos tempos de mistura, dependendo do ponto no reator onde o sensor é posicionado. A figura 3.16 mostra claramente a variação do tempo de mistura em função da vazão de gás injetado no modelo para o sensor posicionado em três pontos distintos. Naturalmente, para vazões maiores, a variação entre os resultados diminui significativamente.

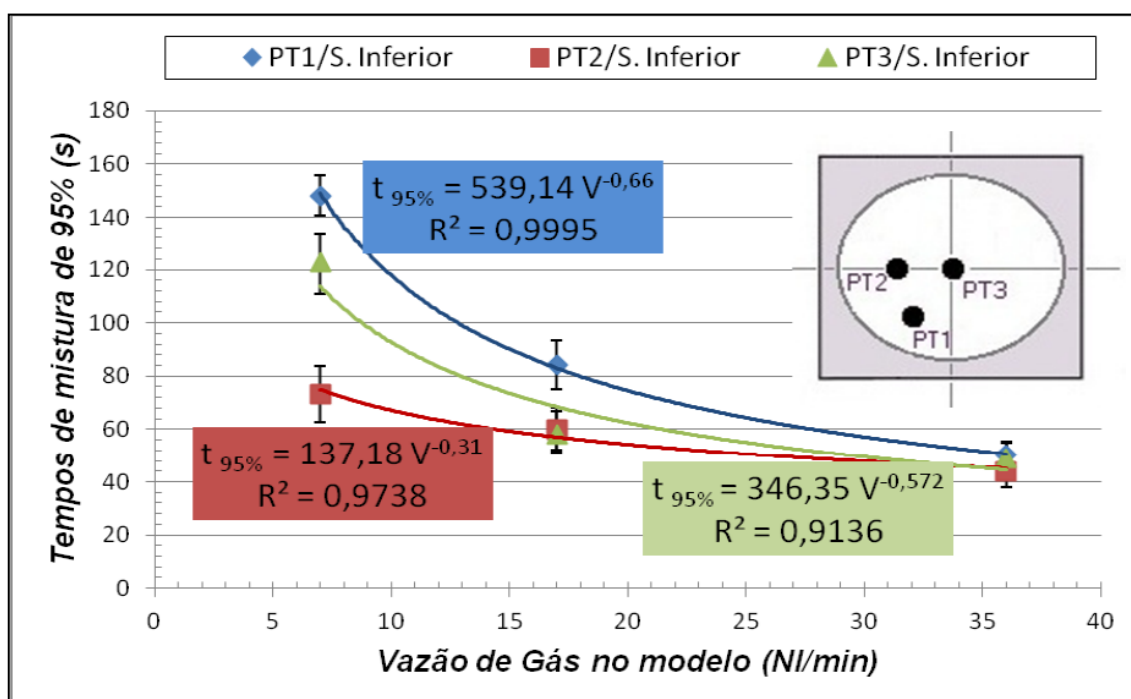


Figura 3.16: Tempo de mistura de 95% em função da vazão e em diferentes posições de injeção de gás sem camada de querosene. (Pereira, 2011).

Pereira (2011) também discute o fato de que o gás pode dispersar de diferentes maneiras em um reator contendo aço líquido. Citando Brimacombe (1990), demonstra que para vazões mais baixas ( $8-14 \text{ cm}^3/\text{s cm}^2$  em seu modelo) as bolhas apresentam um alto grau de independência, mantendo-se finas e discretas. Para vazões intermediárias ( $>14 \text{ cm}^3/\text{s cm}^2$  em seu modelo)

existe uma coalescência incipiente, enquanto para vazões maiores ( $40\text{cm}^3/\text{s cm}^2$  em seu modelo) a coalescência é bastante pronunciada. Estes aspectos são ilustrados pela figura 3.17.

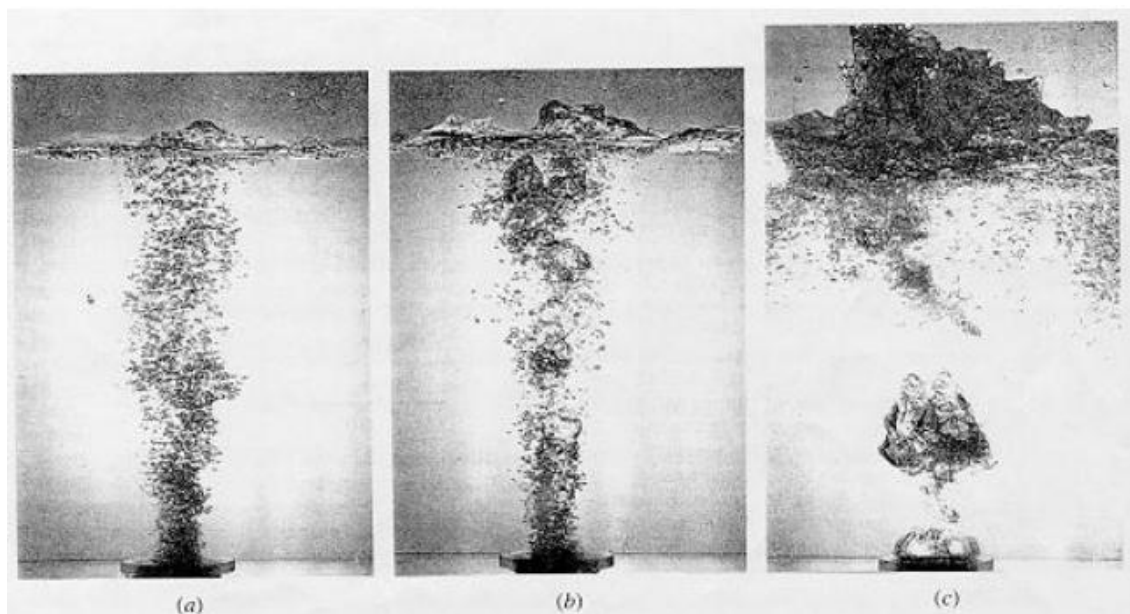


Figura 3.17: Três modos de dispersão de gás no banho. (a) finas bolhas dispersas, (b) coalescência incipiente, (c) coalescência (Anagbo; Brimacombe, 1990).

Li et al (2015) utiliza o modelo matemático denominado *Large Eddy Simulation* (LES) para simular matematicamente a injeção de gás em uma panela de aciaria. O esquema mostrado na figura 3.18 ilustra o comportamento das bolhas no reator de forma esquemática, mostrando detalhadamente diversas etapas do comportamento das bolhas em sua trajetória desde o plug até a superfície.

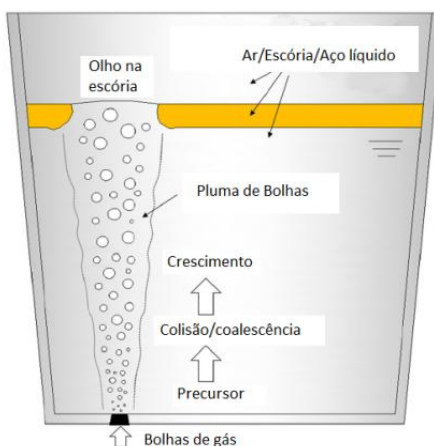


Figura 3.18: Desenho esquemático mostrando o processo de arraste de gás por fases (Li at all, 2015).

Os autores argumentam que o resultado representa muito bem os resultados obtidos por modelagem física, mas não foram apresentados resultados relativos a curvas de mistura para avaliação do modelo neste aspecto.

Zhang e Li (2014) avaliaram o fenômeno de mistura no aço durante o refino em um reator RH. Foi utilizado um modelo físico a frio e modelagem matemática. O tempo de mistura foi obtido por meio da injeção de um traçador e da medida da condutividade da água, enquanto o perfil de velocidades foi obtido por velocimetria por imagem de partícula. Os autores mostraram que a medida do tempo de mistura no RH apresenta uma grande discrepância quando os sensores de condutividade são posicionados em locais diferentes do reator, como mostram as figuras 3.19 a 3.21. Este fenômeno ocorre em função da energia cinética existente em cada região. Naturalmente os sensores localizados em pontos onde a movimentação do aço é muito pequena (volume morto) o tempo de mistura será muito maior do que o tempo de mistura medido por um sensor localizado na perna de descida, onde o movimento do aço é muito intenso. A figura 3.19 mostra os pontos onde os sensores foram posicionados. A figura 3.20 mostra as curvas obtidas pelas medidas de condutividade da água após a injeção de traçador e a figura 3.21 mostra o tempo de mistura para diferentes pontos de medição e com diferentes vazões de gás injetado na perna de subida.

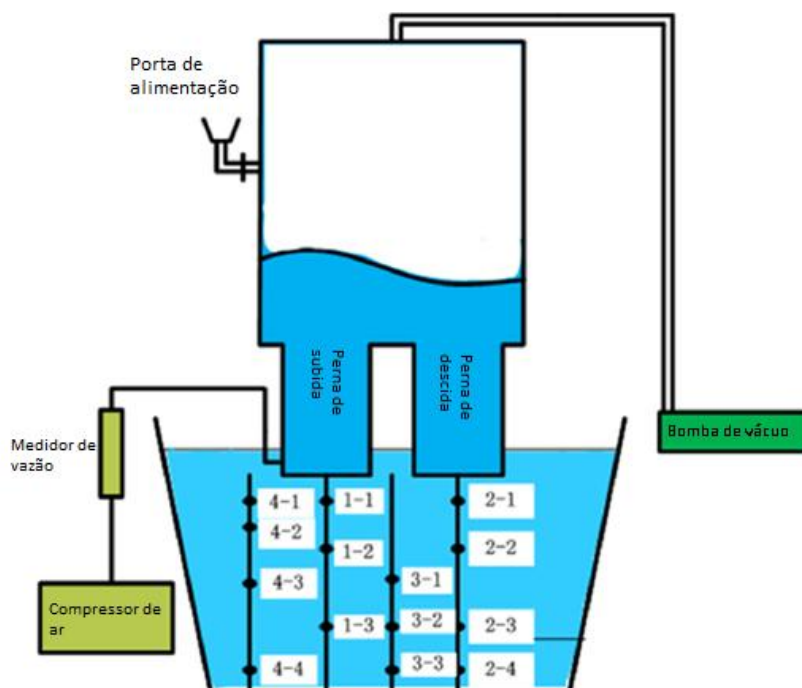


Figura 3.19: Desenho esquemático mostrando os pontos de medição de concentração de traçador (Zhang e Li 2014).

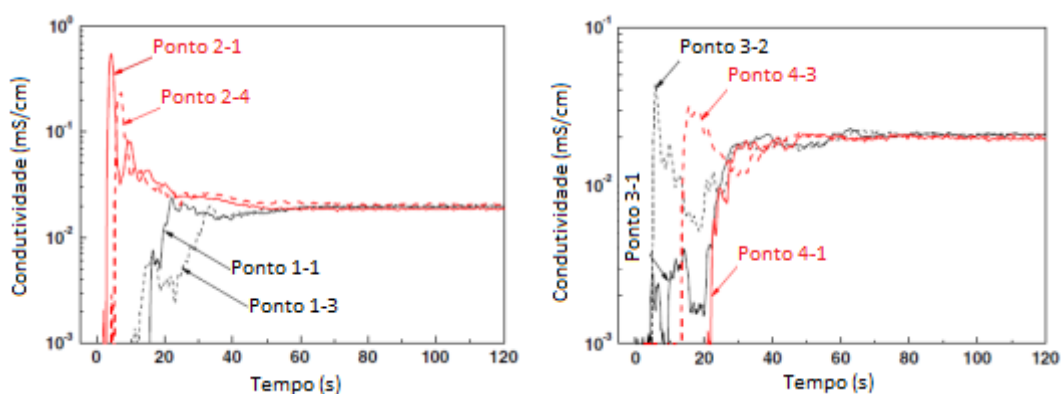


Figura 3.20: Medidas de condutividade em função do tempo em diferentes pontos de monitoramento (Zhang e Li 2014).

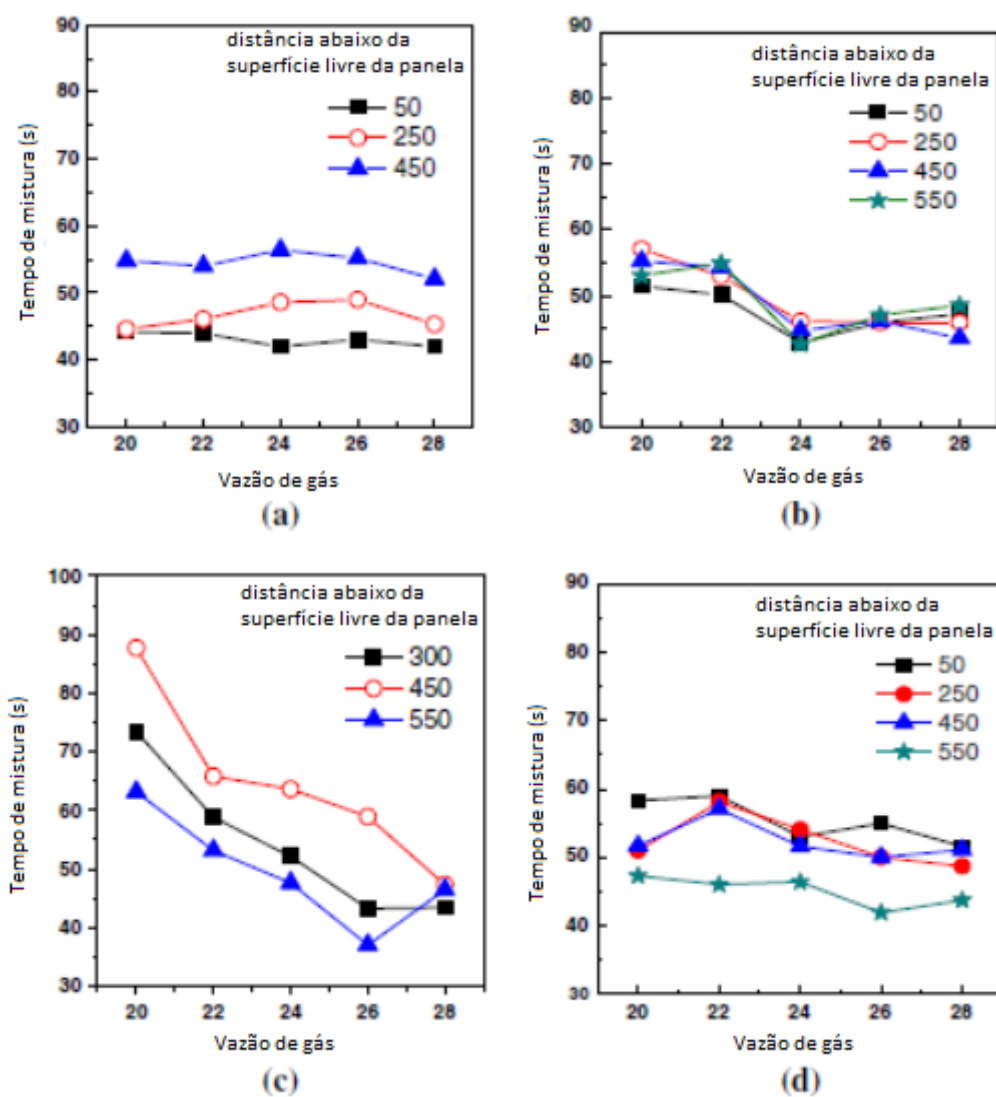


Figura 3.21: Tempo de mistura para diferentes pontos de monitoramento (a) ponto 1-1 (b) ponto 2-1 (c) ponto 3-1 (d) ponto 4.3 (Zhang e Li 2014).

Estes resultados comprovam que análises comparativas devem ser feitas sempre em pontos equivalentes.

Geng et al (2015) simulam a descarburização e remoção de inclusões em um RH com sopro pelo fundo, como mostrado esquematicamente na figura 3.22. O autor pondera que estes processos são grandemente influenciados pelo tamanho das bolhas de gás injetado no reator. Apesar de ter usado uma equação empírica para a determinação do diâmetro, poderia ter utilizado o modelo de múltiplos grupos de tamanho (MUSIG), como feito por Liu et al (2015) para um molde de lingotamento contínuo.

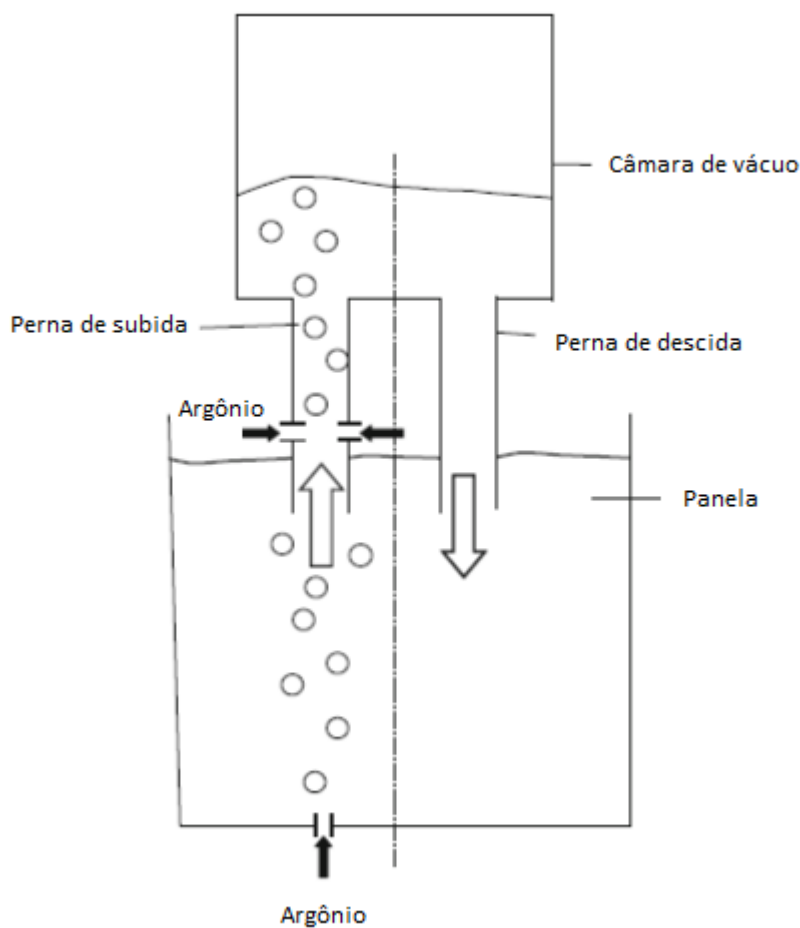


Figura 3.22: Desenho esquemático de um RH com injeção de gás pelo fundo da panela (Geng et al 2015).

## 4- METODOLOGIA

O estudo do escoamento do aço foi realizado em dois reatores de refino secundário: uma panela de aciaria agitada por gás e um desgaseificador a vácuo RH. Neste estudo foram utilizadas modelagens matemática e física.

Na modelagem física foram utilizados modelos a frio, construídos em acrílico, em escala com equipamentos industriais, que utilizam água para simular o aço líquido e ar comprimido para simular o argônio soprado nos reatores, respeitando os critérios de similaridade pertinentes.

Na modelagem matemática foram considerados aspectos de quebra e coalescimento de bolhas. Para isso, foram usados dois modelos distintos. O modelo MUSIG, contido no pacote comercial do CFX foi utilizado, assim como o modelo DDM, que foi implementado e utilizado.

### 4.1 Modelagem física

A modelagem física é feita a partir da construção de réplicas, em escala de laboratório, de equipamentos industriais e da realização de ensaios, de forma rápida e econômica, que simulam os processos produtivos. Estes modelos permitem a realização de estudos preliminares de mudanças operacionais e a verificação de seus efeitos sem interferir no processo produtivo do equipamento industrial.

Todos os parâmetros operacionais de um equipamento industrial, sejam eles geométricos, térmicos, mecânicos (que incluem aspectos estáticos, cinéticos e mecânicos), químicos, ou magnéticos, podem ser modelados. Contudo, um modelo físico não precisa simular o sistema industrial integralmente, mas apenas os aspectos de interesse.

Para o presente estudo, onde a modelagem é feita a frio (utilizando água em substituição ao aço líquido), os critérios de similaridade para a construção e operação dos reatores são:

- Similaridade geométrica: Quando a razão entre dimensões correspondentes é constante;
- Similaridade cinemática: Quando a trajetória das partículas que compõe o sistema, é geometricamente similar e quando a razão de proporcionalidade do tempo entre dois eventos correspondentes for constante;

- Similaridade dinâmica: Quando as forças atuantes em posições e tempos correspondentes é constante.

Para a simulação do escoamento do aço líquido em um reator metalúrgico é necessário considerar tanto aspectos dinâmicos como cinemáticos. A similaridade dinâmica pode ser representada pela igualdade do número de Reynolds, entre o modelo e o equipamento industrial, enquanto a similaridade cinemática pode ser representada pela igualdade do número de Froude, entre o modelo e o equipamento industrial.

O número de Reynolds ( $Re$ ), é obtido pela razão entre as forças inerciais e as forças viscosas, atuantes no sistema, como mostrado anteriormente na equação 4.1.

$$Re = \frac{\rho.V^2.L^2}{\mu.V.L} = \frac{V.L.\rho}{\mu} \quad (4.1)$$

O número de Froude ( $Fr$ ), é obtido pela razão entre as forças inerciais e as forças gravitacionais, atuantes no sistema, como mostra a equação 4.2.

$$Fr = \frac{\rho.V^2.L^2}{\rho.L^3.g} = \frac{V^2}{g.L} \quad (4.2)$$

Para modelos em escala reduzida não é possível garantir a igualdade para estes dois números simultaneamente. Para sistemas siderúrgicos o número que melhor representa a similaridade é o de Froude, que foi adotado neste trabalho como critério de similaridade.

Neste trabalho foram utilizadas técnicas de fotografia e filmagem, com o uso das devidas edições de imagem, permitindo a obtenção de vetores de velocidade das bolhas e a construção de histogramas de distribuição do tamanho das bolhas. A filmagem e as fotografias foram realizadas no Laboratório de Simulação de Processos, localizado no Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da Universidade Federal de Minas Gerais. A filmagem foi realizada com uma vazão de injeção de gás de 20 litros por minuto, enquanto as fotografias foram tiradas para vazões de 5, 10, 15 e 20 litros por minuto, em sequências de 3 imagens para cada condição. As edições das imagens foram feitas utilizando o software comercial AutoCAD.

#### 4.1.1 Construção de vetores de velocidade

Os vetores de velocidades foram construídos a partir da sobreposição de quadros obtidos da filmagem. O intervalo de tempo entre cada quadro foi de 0,5 segundo. Este intervalo foi suficientemente pequeno para se distinguir o movimento de cada bolha no modelo físico da panela de aciaria. No tempo  $i$  foi marcada a origem de cada uma das bolhas, enquanto no tempo  $i+\Delta t$  foi marcado o seu destino. Unindo-se os pontos origem-destino, foi possível a construção dos vetores de velocidade.

#### 4.1.2 Histograma de distribuição do tamanho de bolhas

Para verificar a distribuição do tamanho das bolhas no modelo físico da panela de aciaria foram utilizadas as sequências de três fotografias para cada condição de ensaio. Cada bolha foi contornada por um círculo, utilizando o software comercial AutoCAD. Os diâmetros de cada um dos círculos foram medidos e registrados. Com estas dimensões, foi possível classificar os diâmetros em ordem crescente e verificar a frequência de cada uma das faixas de diâmetros. A figura 4.1 mostra a edição de uma destas imagens a título de exemplo.

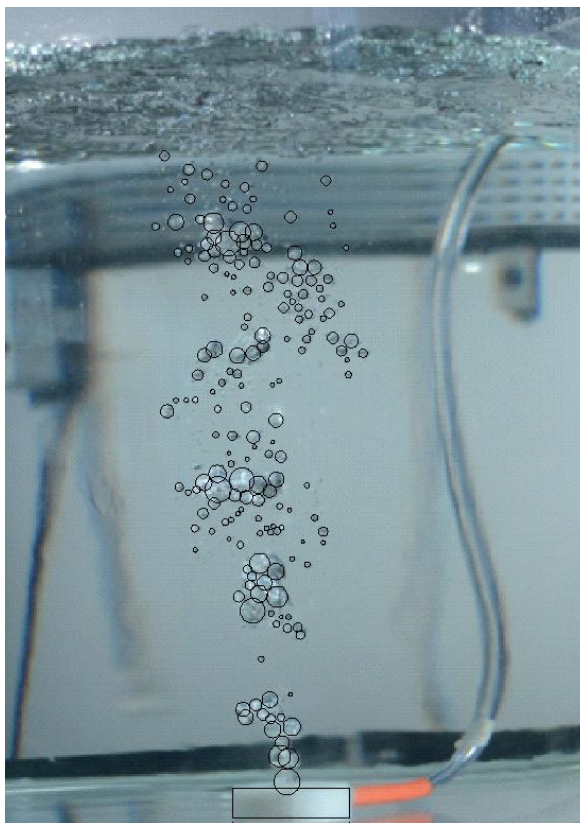


Figura 4.1: Análise do tamanho das bolhas no modelo físico da panela de aciaria

## 4.2 Modelagem matemática

Atualmente existem diversos pacotes de CFD disponíveis no mercado. Estes programas seguem, geralmente, uma mesma sequência de etapas para a solução dos problemas propostos. A primeira etapa é a construção da geometria, seguida da malha, seguida do pré-processamento, o processamento de dados e finalmente o pós-processamento.

Em geral, a modelagem matemática utilizada atualmente, para equipamentos industriais, trabalha com métodos de discretização, ou seja, o reator é dividido em pequenos volumes de controle, onde os cálculos de balanço de massa e balanço de energia são mais convenientes. O método mais comum é conhecido como volumes finitos. As condições de contorno, fundamentais para a solução de problemas numéricos, são características conhecidas do sistema, seja por facilidade de medição, por ser característica de controle do reator ou características fundamentais dos materiais, bem conhecidas e consolidadas.

Uma das características mais importantes no desenvolvimento da modelagem matemática que utiliza métodos de elementos finitos é a garantia da independência da malha. Esta independência é obtida quando param de existir variações significativas nos resultados entre o modelo com malha final e outro com malha ainda mais refinada.

Foram criados modelos matemáticos tanto para a panela de aciaria quanto para o desgaseificador a vácuo RH utilizando o software comercial CFX. Em ambos os casos foram utilizados os modelos MUSIG e DDM, para simular a quebra e coalescência das bolhas no sistema. Neste item serão apresentados detalhes da construção destes modelos.

### 4.2.1. Panela de aciaria

O modelo matemático elaborado para a panela de aciaria simula um reator industrial em escala de 1:5. O plug de injeção de gás foi posicionado no centro do fundo da panela, permitindo o uso de dois planos de simetria, diminuindo assim o custo computacional das simulações. A figura 4.2 mostra esquematicamente a geometria utilizada.

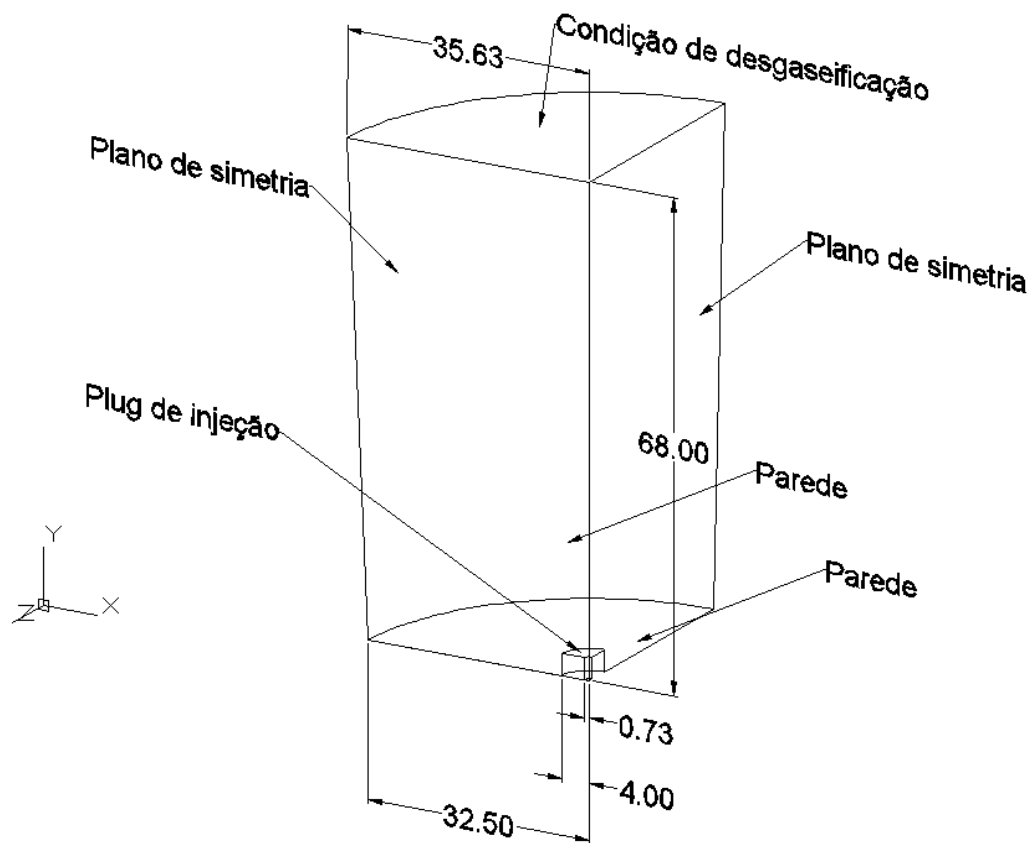


Figura 4.2: Geometria da placa de aciaria modelada matematicamente

A construção da malha foi feita utilizando quadros de referência lagrangianos, com alta suavização e transição suave. Foi utilizada a técnica de dilatação da malha em todas as paredes, com transição suave, onde a taxa de transição foi de 0,77, taxa de crescimento de 1,2 e um máximo de 5 camadas. Estas condições foram estabelecidas a partir de um estudo de independência de malha, resultando em  $1,5 \times 10^6$  elementos de volume. Este foi o número mínimo de elementos de volume para o qual os resultados obtidos pelo modelo pararam de variar, com o uso das mesmas condições de contorno. A figura 4.3 mostra o aspecto geral da malha utilizada no modelo.

A configuração do modelo, realizada no CFX, foi realizada definindo-se a modelagem em estado estacionário com placa de aciaria como o domínio. Os fluidos utilizados na modelagem foram água e ar, ambos a  $25^\circ\text{C}$  objetivando simular o aço e o argônio soprado pelo fundo da placa respeitando os critérios de similaridade. A pressão de referência foi ajustada para 1,0 atm e a opção de flutuação foi selecionada. Enquanto a água foi configurada como fluido contínuo, o ar foi configurado como fluido disperso. O modelo de turbulência escolhido

para a fase contínua (água) foi o k-epsilon, enquanto para a fase dispersa foi utilizado o modelo de fase dispersa, equação zero. O modelo de flutuação selecionado foi o de diferença de densidades. O coeficiente de tensão superficial adotado para a interface ar-água foi de 0,072N/mm, utilizando o modelo de partículas e o modelo de Grace com coeficiente 2 (condição padrão no software) para a força de arraste.

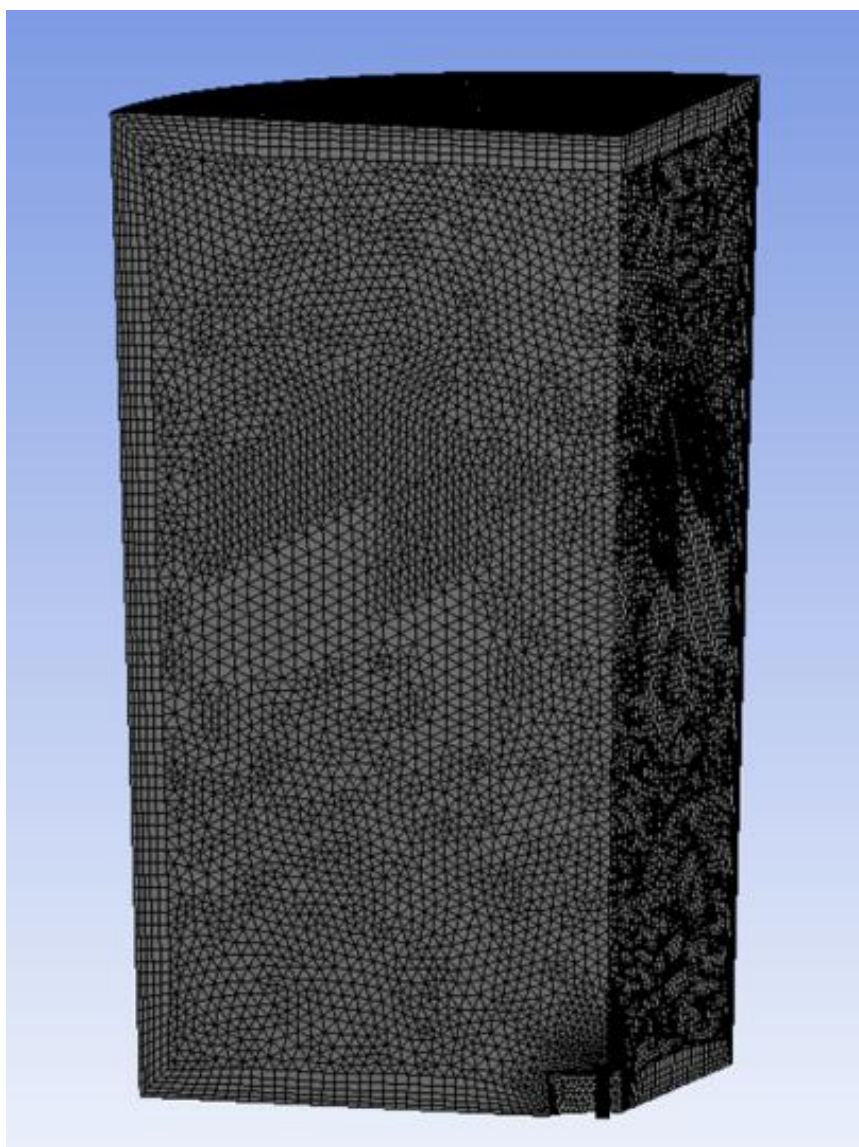


Figura 4.3: Malha computacional utilizada na modelagem da panela de aciaria

A injeção de gás foi modelada no plug de injeção, com uma vazão mássica de 0,0001kg/s, que representa uma vazão volumétrica de 5,0l/min no modelo e consequentemente 20,0l/min na panela, quando considerados os dois planos de simetria. O regime de escoamento selecionado

foi o subsônico, com uma intensidade de turbulência de 5% (média). Também foram modeladas injeções de gás simulando vazões de 5,0l/min, 10,0l/min e 15,0l/min na panela de aciaria.

A superfície superior da panela foi configurada como saída, em condição de desgaseificação, também com regime de escoamento subsônico.

A condição de convergência adotada foi de resíduo RMS menor que  $10^{-6}$  e a velocidade média da água na panela foi monitorada continuamente para acompanhamento. A figura 4.4 mostra a panela de aciaria durante a configuração do modelo.

O esquema de solução do modelo adotado foi o Upwind com turbulência numérica de primeira ordem.

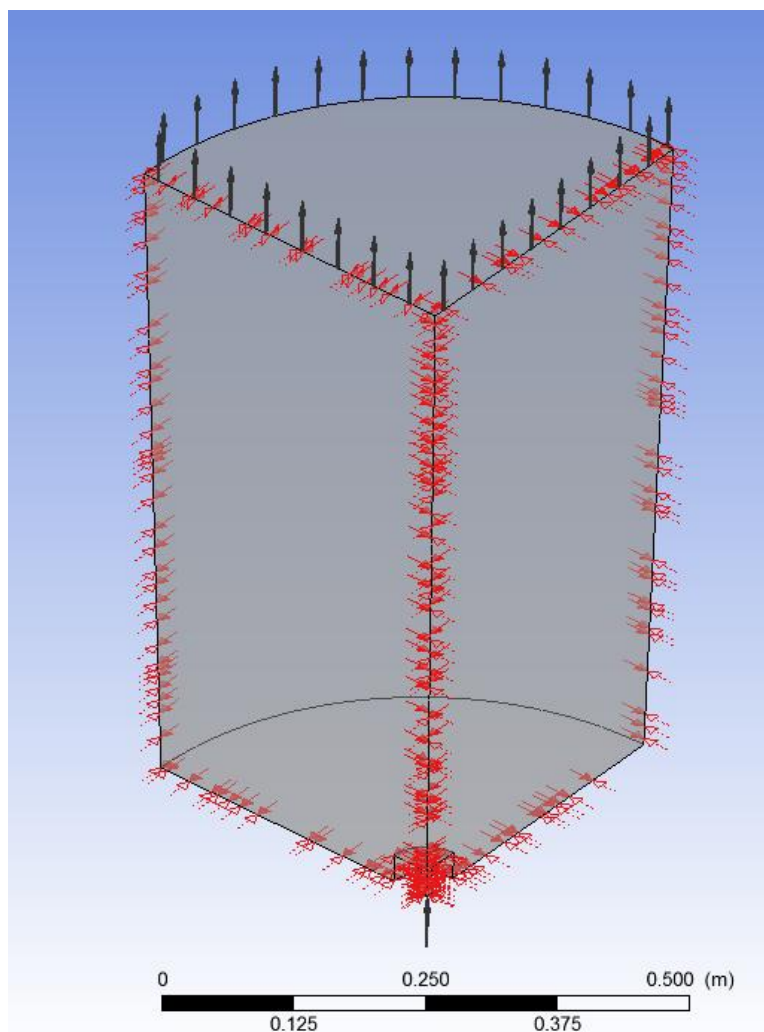


Figura 4.4: Condições de contorno adotadas na modelagem da panela de aciaria

#### 4.2.1.1 Configuração das bolhas na panela de aciaria

A configuração dos tamanhos das bolhas na panela de aciaria foi implementada de três formas diferentes, a saber:

- Bolhas de tamanho fixo

A configuração das bolhas de tamanho fixo é simples. Basta configurar no domínio o ar como fluido disperso e preencher o campo de diâmetro médio com o valor desejado. Neste trabalho foram realizadas simulações utilizando os diâmetros de 2,0mm, 20,0mm, 40,0mm e 80,0mm. Neste caso o modelo considera que o diâmetro da bolha permanece o mesmo, desde a saída do plug até a superfície do fluido.

- Quebra e coalescência de bolhas usando o modelo MUSIG

A utilização do modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG é ativada quando se seleciona a opção de fluido polidisperso no domínio do modelo. A opção de diâmetro médio de bolha é imediatamente desabilitada e deve-se então incluir no modelo as variáveis adicionais que representem as faixas de tamanho de bolha que serão adotadas. Neste trabalho foram adicionadas nove variáveis adicionais que representam as faixas de diâmetro de bolha consideradas. Todas estas variáveis foram configuradas como não especificadas, adimensionais e com tensores do tipo escalar. As expressões associadas a estas variáveis calculam a quantidade de bolhas que se encontra em cada faixa de tamanho associadas à fração de volume de gás no modelo. Este modelo está contido no software comercial CFX.

- Quebra e coalescência de bolhas usando o modelo DDM

O modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM não está contido no software comercial CFX e deve ser implementado por meio da adição de variáveis e expressões adicionais no domínio do modelo. As variáveis implementadas, bem como suas características fundamentais são apresentadas na tabela VI.1. A tabela VI.2 apresenta as expressões matemáticas implementadas no programa.

Tabela VI.1: Variáveis implementadas na modelagem matemática da panela de aciaria

Variável adicional	Tipo de Variável	unidade	Tipo de Tensor
FonteBolhaVar	Não Especificada	kg/(m <sup>2</sup> .s)	Escalar
Dlocal	Especificada	m	Escalar
dlocalEqVar	Não Especificada	m	Escalar
talBVar	Não Especificada	s	Escalar
talCVar	Não Especificada	s	Escalar
talKVar	Não Especificada	s	Escalar
talRelaxUsadoVar	Não Especificada	s	Escalar
talRelaxVar	Não Especificada	s	Escalar

Tabela VI.2: Expressões matemáticas implementadas na modelagem matemática da panela de aciaria

Expressão	
FonteBolha	Ar.Density*(dlocalEq-Ar.dlocal)/talRelaxUsado
St	talP/talL
dInicial	9 [mm]
dlocalEq	$4,15 * Ar.vf^{0,5} * (0,072 [n/m] / 997 [kg/m^3])^{0,6} / ed^{0,4} + 900e-6 [m]$
talB	$1 * Ar.dlocal^{(2/3)} * ed^{(-1/3)}$
talC	$1 * (\pi/6) * 1 / \max(Ar.vf, 1e-7)^{1/3} * Ar.dlocal * \sqrt{(1+St)} / \sqrt{(2 * ke/3)}$
talK	$6 * \sqrt{(0,0008899 [pa s] / 997 [kg/m^3])} / ed$
talL	$1,5 * 0,09 * ke / ed$
talP	$1,185 [kg/m^3] * Ar.dlocal^2 / (18 * 0,0008899 [Pa s])$
talRelax	if(Ar.dlocal > dlocalEq, talB, talC)
talRelaxUsado	max (talRelax, talK)

No domínio matemático do modelo, a opção de fluido disperso foi adotada para o ar soprado no plug, mas o diâmetro médio foi inserido na forma de uma função ( $\text{abs}(Ar.dlocal)$ ) que calcula o valor absoluto do diâmetro da bolha utilizando a variável adicional “dlocal” para o ar.

O valor do diâmetro inicial da bolha foi calculado a partir da equação 4.3 de Johansen e Boysan, citada por Sicorski (2006):

$$D_b = 0,35(Q^2/g)^{0,2} \quad (4.3)$$

Onde Q é a vazão de gás e g é a aceleração da gravidade.

#### 4.2.1.2 Análise do efeito do tamanho das bolhas sobre a homogeneização do aço

Para verificar o efeito do tamanho das bolhas sobre a homogeneização do aço em panelas de aciaria, foram construídas curvas de mistura, utilizando modelagem matemática, para diferentes diâmetros de bolhas na panela de aciaria, tanto para bolhas com diâmetro fixo (2,0mm, 20,0mm, 40,0mm e 80,0mm), quanto para bolhas com tamanho variável em função de quebra e coalescimento (utilizando os modelos MUSIG e DDM). Para a construção das curvas, foi considerado o estado transiente no reator, tendo como alimentação do modelo transiente a resposta, já atendendo os critérios de convergência (RMS máximo de  $10^{-6}$ ) do modelo em estado estacionário, para uma vazão de gás de 20l/min. Foi modelada a injeção de traçador (1 kg pelo período de 1 segundo) na superfície da panela, no centro do reator. As propriedades físicas do traçador foram definidas com os mesmos valores do fluido contínuo, a água. A concentração foi medida continuamente por um período de 600 segundos, tempo suficiente para garantir que a mistura fosse completa, no fundo da panela, na metade de seu raio (16,25cm do plug de injeção de gás). A figura 4.5 mostra os pontos de injeção do traçador e o ponto de monitoramento.

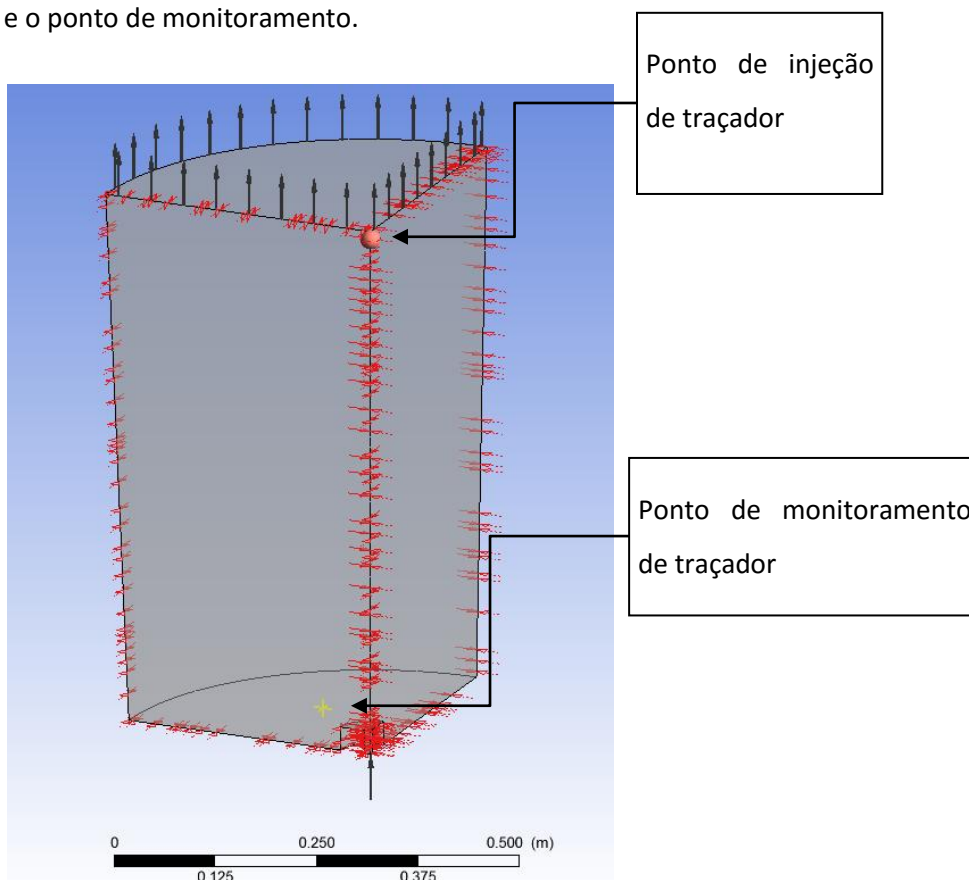


Figura 4.5: Pontos de injeção de traçador e de monitoramento utilizados na panela de aciaria

#### 4.2.1.3 Comparação dos modelos de quebra e coalescência das bolhas

A comparação entre os modelos de quebra e coalescência das bolhas por modelagem matemática (MUSIG e DDM) foi realizada de forma a verificar a distribuição de tamanhos de bolha durante o escoamento em estado estacionário para diferentes vazões. Foram utilizadas vazões de 5l/min, 10l/min, 15l/min e 20l/min. Os resultados obtidos nesta etapa serão comparados com resultados obtidos por modelagem física. Serão considerados para tanto:

- Vetores de velocidade das bolhas: Obtido por meio de mapas de vetores no plano de simetria do reator, que representam a velocidade média do gás em cada ponto;
- Perfil de tamanho de bolhas: Obtidos por meio de mapas de contorno no plano de simetria do reator, que representam o tamanho médio das bolhas em cada ponto;
- Perfil da fração de volume de gás: Obtido por meio de mapas de contorno no plano de simetria do reator, que representam a fração volumétrica de gás em cada ponto.

Os modelos de quebra e coalescência de bolhas predizem o tamanho de bolhas em todos os pontos do reator, em alguns casos, até onde a quantidade de gás é tão baixa que efetivamente não existem bolhas. Desta forma, os perfis de tamanho de bolhas e de fração de volume de gás devem ser analisados em conjunto. Uma forma efetiva e de fácil visualização é a construção de histogramas de distribuição de tamanho de bolhas.

A construção dos histogramas consistiu do cálculo de volume de gás no reator, restrito a uma determinada faixa de diâmetro de bolhas. Posteriormente, este volume foi dividido pelo volume médio da faixa, resultando no número de bolhas existente para esta faixa de tamanho.

#### 4.2.2 Desgaseificador a vácuo RH

De forma semelhante à construção do modelo da panela de aciaria, o modelo matemático elaborado para o desgaseificador a vácuo RH simula um reator industrial em escala de 1:5. A geometria do reator permitiu o uso de um plano de simetria, diminuindo assim o custo computacional das simulações. Tanto a perna de subida quanto a de descida foram construídas com 124mm de diâmetro. Foram considerados 10 plugs de injeção de gás com 2,2mm de diâmetro cada um. A figura 4.6 mostra esquematicamente a geometria utilizada.

Também seguindo o procedimento da construção do modelo da panela de aciaria, foi implementada uma malha utilizando quadros de referência lagrangianos, com alta suavização e transição suave. A taxa de transição foi de 0,77, taxa de crescimento de 1,2 e um máximo de 5 camadas. Estas condições foram estabelecidas a partir de um estudo de independência de malha, resultando em aproximadamente  $2,4 \times 10^6$  elementos de volume. Este foi o número mínimo de elementos de volume para o qual os resultados obtidos pelo modelo pararam de variar, com o uso das mesmas condições de contorno.

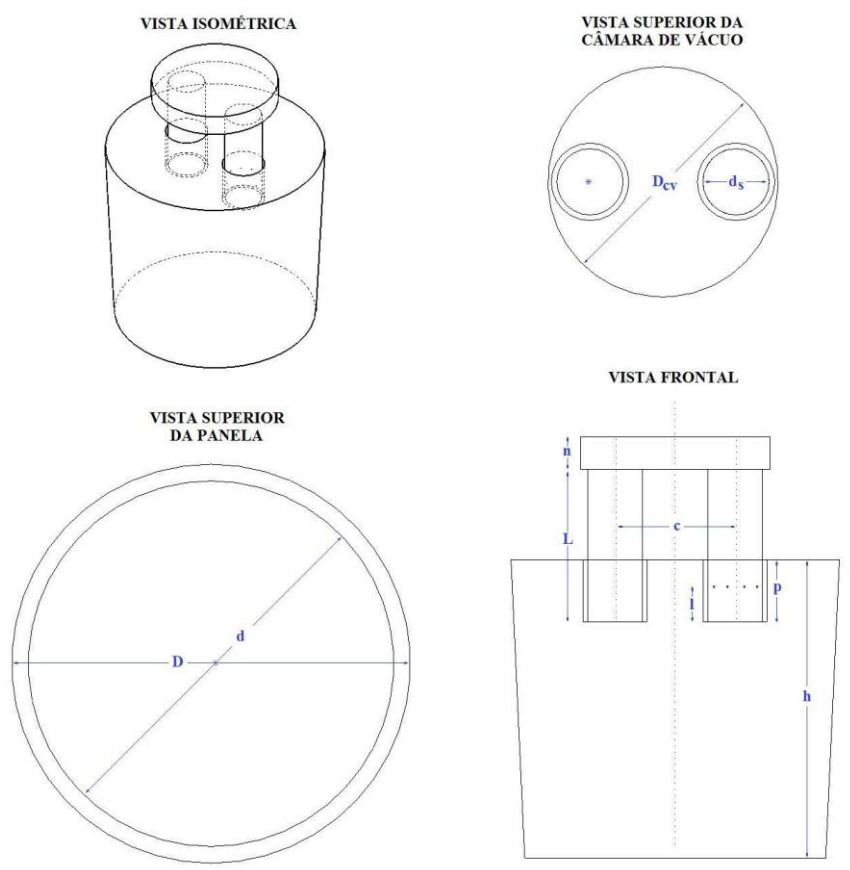


Figura 4.6: Geometria do degaseificador a vácuo RH modelado matematicamente

D<sub>cv</sub>: Diâmetro da câmara de vácuo (0,41m)

D<sub>s</sub>: Diâmetro da perna de subida (0,12m)

L: Comprimento das pernas (0,31m)

C: Distância entre os centros das pernas (0,26m)

D: Diâmetro superior da panela (0,72m)

d: Diâmetro inferior da panela (0,65m)

h: Altura da panela (0,76m)

A configuração do modelo, utilizando o software CFX, foi realizada tomando-se como base a configuração da panela, ou seja, a simulação adotou o estado estacionário utilizando como domínio a panela e o desgaseificador a vácuo RH, conforme mostrado na figura 4.7. Os fluidos utilizados na modelagem foram água e ar, ambos a 25°C objetivando simular o aço e o gás durante a operação do reator, também respeitando os critérios de similaridade. A pressão de referência foi ajustada para uma atmosfera e a opção de flutuação foi selecionada. Enquanto a água foi configurada como fluido contínuo, o ar foi configurado como fluido disperso. O modelo de turbulência escolhido para a fase contínua (água) foi o k-epsilon, enquanto para a fase dispersa foi utilizado o modelo de fase dispersa, equação zero. O modelo de flutuação selecionado foi o de diferença de densidades. O coeficiente de tensão superficial adotado para a interface ar-água foi de 0,072N/mm, utilizando o modelo de partículas para interfaces e o modelo de Grace para a força de arraste.

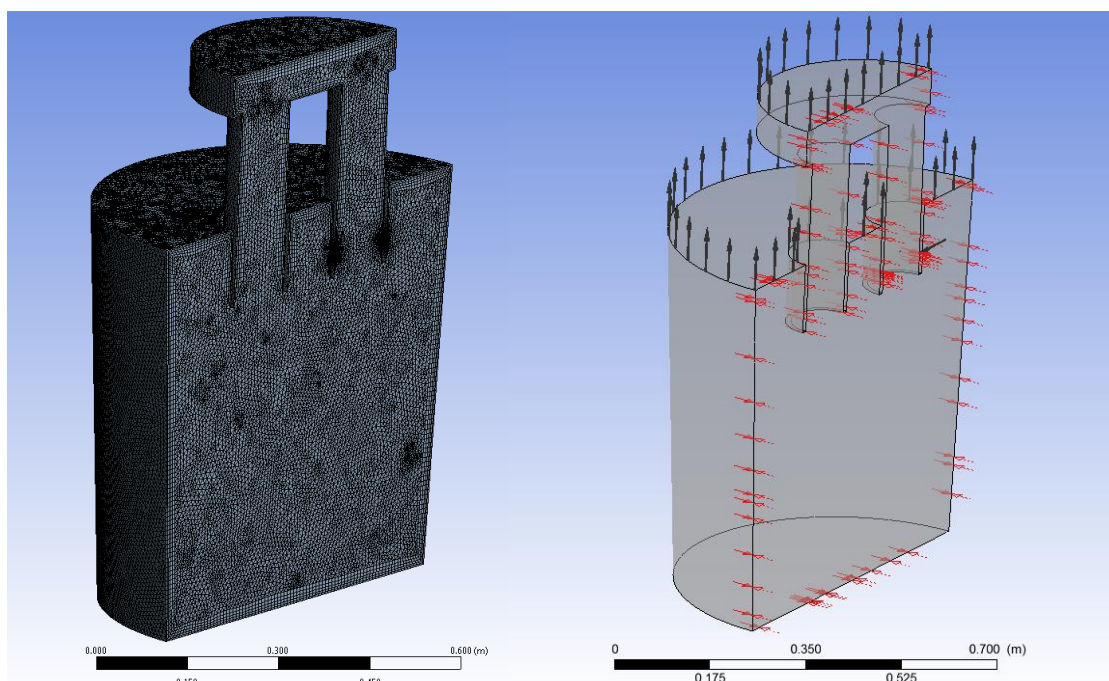


Figura 4.7: Condições de contorno adotadas na modelagem do desgaseificador a vácuo.

A injeção de gás nos plugs foi configurada de forma a simular vazões de 100, 200, 300, 400 e 500 l/min no reator, quando considerado o plano de simetria. O regime de escoamento selecionado foi o subsônico, com uma intensidade de turbulência de 5% (média).

Observando-se a figura 4.7 pode-se perceber ainda os locais onde foi configurada a condição de desgaseificação, os plugs de injeção de gás e o plano de simetria.

A condição de convergência adotada foi de resíduo RMS menor que  $10^{-6}$  e a velocidade média da água na panela foi monitorada continuamente para acompanhamento.

O esquema de solução do modelo adotado foi o Upwind com turbulência numérica de primeira ordem.

#### 4.2.2.1 Configuração das bolhas no desgaseificador a vácuo RH

A configuração dos tamanhos das bolhas no RH foi implementada da mesma forma que na panela de aciaria, ou seja, tamanho fixo, quebra e coalescência utilizando o modelo MUSIG e quebra e coalescência utilizando o modelo DDM.

- Bolhas de tamanho fixo

O reator mostrado na figura 4.7 foi definido como domínio. O ar foi definido como fluido disperso e o diâmetro médio foi determinado em 10 mm, obedecendo a proposta de Johansen e Boysan, citada por Sicorski (2006) na equação 4.3. Assim como na modelagem da panela de aciaria, o modelo considera que o diâmetro da bolha permanece o mesmo, desde a saída do plug até a superfície do fluido.

- Quebra e coalescência de bolhas usando o modelo MUSIG

A configuração do modelo de quebra e coalescência de bolhas contido no software CFX (MUSIG) é idêntica àquela realizada na panela de aciaria. O modelo é ativado quando se seleciona a opção de fluido polidisperso no domínio do modelo. A opção de diâmetro médio de bolha é imediatamente desabilitada e deve-se então incluir no modelo as variáveis adicionais que representem as faixas de tamanho de bolha que serão adotadas. Neste trabalho foram adicionadas nove variáveis que representam as faixas de diâmetro de bolha consideradas. Todas estas variáveis foram configuradas como não especificadas, adimensionais e com tensores do tipo escalar. As expressões associadas a estas variáveis

calculam a quantidade de bolhas que se encontra em cada faixa de tamanho associadas à fração de volume de gás no modelo.

- Quebra e coalescência de bolhas usando o modelo DDM

Assim como o MUSIG, o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM foi implementado por meio da adição de variáveis e expressões adicionais no domínio do modelo, da mesma forma que a modelagem matemática realizada para a panela de aciaria. As variáveis implementadas, bem como suas características fundamentais são apresentadas na tabela VI.3. A tabela VI.4, mostrada em sequência, apresenta as expressões matemáticas implementadas no programa.

Tabela VI.3: Variáveis implementadas na modelagem matemática do desgaseificador a vácuo RH

Variável adicional	Tipo de Variável	unidade	Tipo de Tensor
FonteBolhaVar	Não Especificada	kg/(m <sup>2</sup> .s)	Escalar
dlocal	Especificada	m	Escalar
dlocalEqVar	Não Especificada	m	Escalar
talBVar	Não Especificada	s	Escalar
talCVar	Não Especificada	s	Escalar
talKVar	Não Especificada	s	Escalar
talRelaxUsadoVar	Não Especificada	s	Escalar
talRelaxVar	Não Especificada	s	Escalar

Tabela VI.4: Expressões matemáticas implementadas na modelagem matemática do desgaseificador a vácuo RH

Expressão	
FonteBolha	$Ar.Density*(dlocalEq-Ar.dlocal)/talRelaxUsado$
St	$talP/talL$
dInicial	9 [mm]
dlocalEq	$4,15*Ar.vf^{0,5}*(0,072 [n/m]/997 [kg/m^3])^{0,6}/ed^{0,4}+900e-6[m]$
talB	$1*Ar.dlocal^{(2/3)}*ed^{(-1/3)}$
talC	$1*(\pi/6)*1/\max(Ar.vf, 1e-7)^{1/3}*Ar.dlocal*\sqrt{1+St}/\sqrt{2*ke/3}$
talK	$6*\sqrt{((0,0008899[pa s]/997[kg/m^3])/ed)}$
talL	$1,5*0,09*ke/ed$
talP	$1,185[kg/m^3]*Ar.dlocal^2/(18*0,0008899[Pa s])$
talRelax	$if(Ar.dlocal>dlocalEq, talB, talC)$
talRelaxUsado	$\max (talRelax, talK)$

No domínio matemático do modelo, a opção de fluido disperso foi adotada para o ar soprado no plug, mas o diâmetro médio foi inserido na forma de uma função ( $\text{abs}(\text{Ar.dlocal})$ ) que calcula o valor absoluto do diâmetro da bolha utilizando a variável adicional “dlocal” para o ar.

O valor do diâmetro inicial da bolha foi calculado a partir da equação de Johansen e Boysan, citada por Sicorski (2006)

$$D_b = 0,35(Q^2/g)^{0,2} \quad (4.4)$$

Onde Q é a vazão de gás e g é a força gravitacional.

#### 4.2.2.2 Análise da distribuição de tamanho das bolhas no RH

A comparação entre os modelos de quebra e coalescência das bolhas por modelagem matemática (MUSIG e DDM) foi realizada de forma a verificar a distribuição de tamanhos de bolha durante o escoamento em estado estacionário para diferentes vazões. Foram utilizadas vazões de 100l/min, 200l/min, 300l/min, 400l/min e 500l/min. Os resultados obtidos nesta etapa serão comparados com resultados obtidos por modelagem física. Serão considerados para tanto:

- Perfil de tamanho de bolhas: Obtidos por meio de mapas de contorno no plano de simetria do reator, que representam o tamanho médio das bolhas em cada ponto;
- Perfil da fração de volume de gás: Obtidos por meio de mapas de contorno no plano de simetria do reator, que representam a fração volumétrica de gás em cada ponto.

Os modelos de quebra e coalescência de bolhas predizem o tamanho de bolhas em todos os pontos do reator, em alguns casos, até onde a quantidade de gás é tão baixa que efetivamente não existem bolhas. Desta forma, os perfis de tamanho de bolhas e de fração de volume de gás devem ser analisados em conjunto. Uma forma efetiva e de fácil visualização é a construção de histogramas de distribuição de tamanho de bolhas.

A construção dos histogramas consistiu do cálculo de volume de gás no reator, restrito a uma determinada faixa de diâmetro de bolhas. Posteriormente, este volume foi dividido pelo volume médio da faixa, resultando no número de bolhas existente para esta faixa de tamanho.

#### 4.2.2.3 Avaliação da taxa de circulação no RH

A taxa de circulação é, por definição, o tempo necessário para que o fluido circule no reator. Em modelagem física, um traçador é injetado na perna de subida, enquanto um sensor é posicionado na perna de descida. A concentração de traçador é medida em função do tempo e o tempo entre os vales representa o tempo necessário para circular o material no reator. A taxa de circulação pode ser estimada pela razão entre o volume de fluido no reator e o tempo necessário para circular o material.

Na modelagem matemática o mesmo processo pode ser simulado, mas alternativamente, a taxa de circulação na modelagem matemática pode ser estimada simplesmente calculando-se a vazão em massa em um plano na perna de descida (função *massflow* no CFD post). A figura 4.8 mostra o plano onde a taxa de circulação foi calculada.

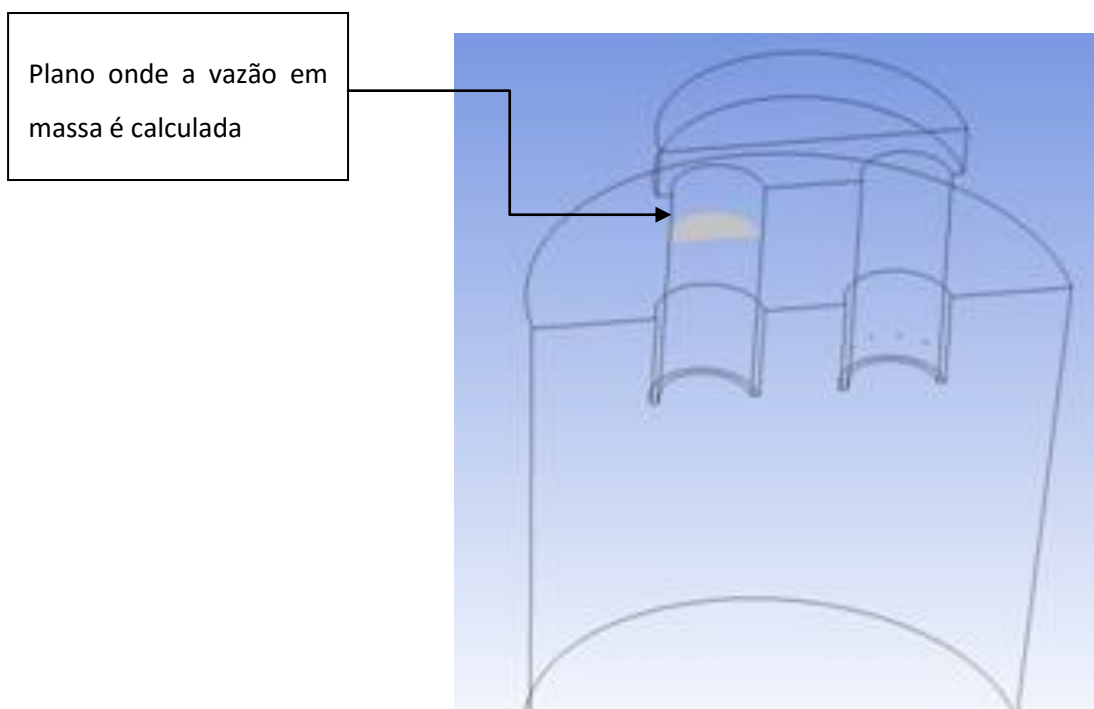


Figura 4.8: Plano na perna de descida onde vazão em massa foi calculada

Foi realizado um teste preliminar que provou que não existe diferença significativa entre os dois métodos. Desta forma, para este trabalho foram usados cálculos de “massflow”, por ser mais simples de se avaliar no modelo.

As taxas de circulação no desgaseificador a vácuo RH foram calculadas para vazões de 100, 200, 300, 400 e 500l/min.

#### 4.2.3 Validação estatística

A taxa de circulação prevista pela modelagem matemática, tanto utilizando o modelo MUSIG quanto o DDM, foi verificada segundo uma metodologia estatística utilizando dados históricos obtidos no modelo físico localizado no laboratório de simulação de processos, do Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais da Universidade Federal de Minas Gerais. A figura 4.9 mostra uma fotografia das instalações utilizadas nos ensaios físicos.



Figura 4.9: Modelo físico do desgaseificador a vácuo RH

A metodologia estatística para validação do modelo inclui quatro passos, sendo eles:

- Passo 1: Adaptação estatística do modelo e teste de inclinação;
- Passo 2: Análise de resíduos;
- Passo 3: Teste de hipótese para os coeficientes estatísticos do modelo;
- Passo 4: Determinação de intervalos de confiança para o valor real da quantidade de Interesse.

A descrição destes passos é feita a seguir.

#### 4.3 Modelo estatístico proposto

Bayarri (2007) argumenta que quando se está interessado em prever o valor de uma grandeza física escalar  $Y^R$ , sendo esta uma função de um vector de variáveis  $\mathbf{x}$ , ou seja,  $Y^R(\mathbf{x})$ , um modelo matemático pode ser utilizado para estimar um valor de  $Y^M(\mathbf{x})$  que se aproxima do valor da grandeza física, contudo, os valores reais e as aproximações podem diferir devido a um desvio  $b(\mathbf{x})$ , de modo que:

$$y^R(\mathbf{x}) = y^M(\mathbf{x}) + b(\mathbf{x}) \quad (4.5)$$

Por outro lado, se  $Y^R(\mathbf{x})$  é medido experimentalmente  $n$  vezes para diferentes valores de  $\mathbf{x}_i$ , (com  $i$  variando de 1 até  $n$ ), os valores experimentais  $y^F(\mathbf{x}_i)$  são obtidos valores que se diferenciam dos valores reais  $y^R(\mathbf{x}_i)$  por um desvio aleatório que pode ser representado por  $\varepsilon_i^F$ . Matematicamente o valor de  $y^F(\mathbf{x}_i)$  pode ser descrito como:

$$y^F(\mathbf{x}_i) = y^R(\mathbf{x}_i) + \varepsilon_i^F \quad (4.6)$$

Combinando as duas equações, obtém-se:

$$y^F(\mathbf{x}_i) = y^M(\mathbf{x}_i) + b(\mathbf{x}_i) + \varepsilon_i^F \quad (4.7)$$

Bayarri (2007) ainda discute que para modelar a função de desvio  $b(\mathbf{x})$  deve-se adotar a versão de Kriging do processo de Gauss (GASP).

O GASP tem duas deficiências no presente contexto. Em primeiro lugar, é uma função de interpolação, então só pode ser utilizado se os dados tiverem replicações, caso contrário, o modelo estatístico terá um erro nulo. Na verdade, repetições são desejáveis; uma vez que permitem testar falta de ajuste por erro puro e para verificar a igualdade da variância, mas nem sempre é possível obtê-las. Em segundo lugar, é pouco provável que GASP possa interpolar adequadamente os dados, especialmente porque a quantidade de dados é normalmente escassa. Desta forma, utiliza-se como alternativa modelar  $b(\mathbf{x})$  de uma forma mais simples:

$$b(\mathbf{x}) = \beta_0 + (\beta_1 - 1)y^M(\mathbf{x}) \quad (4.8)$$

Onde  $\beta_0$  e  $\beta_1$  são constantes. Substituindo a equação para  $b(\mathbf{x})$ , a forma final para o modelo estatístico proposto pode ser obtida e é apresentada a seguir:

$$y^F(\mathbf{x}_i) = \beta_0 + \beta_1 y^M(\mathbf{x}_i) + \varepsilon_i^F \quad (4.9)$$

O modelo estatístico desenvolvido é exatamente o mesmo utilizado por outros autores (Mandel and Linning (1957); Montgomery, Peck and Vining (2006)) para calibração linear de métodos experimentais.

A previsão do valor que resolve a equação anterior coincide com a previsão dos valores reais da grandeza de interesse, pois  $E(y^F) = y^R$ , logo, é possível determinar intervalos de confiança para o valor real da grandeza de interesse.

Na próxima seção será mostrado como o método dos mínimos quadrados pode ser usado para determinar os valores dos coeficientes  $\beta_0$  e  $\beta_1$ . Assim, presume-se que os erros  $\varepsilon_i^F$  são independentes e identicamente distribuídos na forma de valores aleatórios com uma distribuição normal  $N(0, \sigma^2)$ . Comportamentos não normais ou com variâncias desiguais poderiam ser geridos, por exemplo, com uma variável apropriada de transformação. Por outro lado, a independência de erro deve ser garantida durante a coleta de dados. Isto significa que os experimentos devem ser aleatorizados e que em cada repetição, todo o procedimento experimental é completamente replicado.

Também é necessário tomar precauções com o planejamento da aplicação do modelo estatístico proposto. Os pontos de dados obtidos em um único experimento transiente, como uma curva de mistura, não podem ser comparados com os dados obtidos em uma única simulação transitória, pois os erros relacionados aos pontos de dados obtidos em um mesmo experimento são correlacionados e conseqüentemente, não são independentes. Além disso pode-se utilizar métricas calculadas a partir de uma saída temporária para validar um modelo matemático, como por exemplo a taxa de circulação em um desgaseificador a vácuo RH.

A utilização do método dos mínimos quadrados é válida apenas para modelos matemáticos determinísticos. Para a validação de modelos matemáticos estocásticos deve-se utilizar preferencialmente técnicas de regressão específicas.

### 4.3.1 Procedimento para o método proposto

#### 4.3.1.1 Passo 1: Modelo estatístico de ajuste e teste de declive

Nesta etapa verifica-se se o modelo matemático prevê as tendências gerais dos fenômenos simulados de forma adequada.

Embora o modelo estatístico de ajuste seja um procedimento bem conhecido, os cálculos envolvidos serão apresentados de forma resumida. Os estimadores dos mínimos quadrados  $\beta_0$  e  $\beta_1$ , que garantem a minimização da soma do quadrado dos erros  $S(\beta_0, \beta_1)$  são determinados por:

$$S(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^n (\varepsilon_i^F)^2 = \sum_{i=1}^n [y^F(\mathbf{x}_i) - \beta_0 - \beta_1 y^M(\mathbf{x}_i)]^2 \quad (4.10)$$

O resultado que corresponde a essa equação é a aproximação  $\hat{\beta}_0$  e  $\hat{\beta}_1$  para  $\beta_0$  e  $\beta_1$ , respectivamente obtidos pelas equações:

$$\hat{\beta}_1 = \frac{S_{mf}}{S_{mm}} \quad (4.11)$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{f} - \hat{\beta}_1 \bar{m} \quad (4.12)$$

Onde:

$\bar{f} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y^F(\mathbf{x}_i)$	$\bar{m} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y^M(\mathbf{x}_i)$
$S_{mm} = \left\{ \sum_{i=1}^n [y^M(\mathbf{x}_i)]^2 \right\} - n\bar{m}^2$	$S_{mf} = \left[ \sum_{i=1}^n y^M(\mathbf{x}_i) y^F(\mathbf{x}_i) \right] - n\bar{f}\bar{m}$

Desta forma, o modelo estatístico pode ser descrito como:

$$\hat{y}^F(\mathbf{x}_i) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 y^M(\mathbf{x}_i) \quad (4.13)$$

Um simples gráfico de dispersão dos dados brutos com a linha de regressão linear poderia fornecer informações valiosas sobre a precisão do modelo matemático. Se o ajuste do modelo estatístico é fraco (o que pode ocorrer se  $b(\mathbf{x})$  tem um comportamento não-linear em  $y^M(\mathbf{x})$  ou se  $y^M(\mathbf{x})$  não é um bom preditor para  $b(\mathbf{x})$ ), a utilização do modelo estatístico proposto não se

justifica. No entanto, essa informação já é um bom indicativo de que o modelo matemático é inadequado ou que os dados experimentais foram obtidos de forma inadequada, mostrando que os erros apresentam dependência com as condições de teste (viés de planejamento dos experimentos). Considerando que o modelo estatístico explica ao menos de forma qualitativa os dados experimentais, pode-se continuar a análise.

Para que um modelo matemático seja capaz de prever um fenômeno físico, mesmo que qualitativamente, é condição fundamental que o coeficiente angular do modelo estatístico seja positivo ( $\beta_1 > 0$ ). Isso garante que, ao menos, para as condições em que a magnitude do fenômeno tem seu valor aumentado, o valor previsto pela modelagem matemática também irá aumentar. O valor do coeficiente angular pode ser testado utilizando um teste F unilateral.

A estatística de teste pode ser obtida pela seguinte equação:

$$F_0 = \frac{s_{mm}(\hat{\beta}_1)^2}{2\hat{\sigma}^2} \quad (4.14)$$

Onde  $\hat{\sigma}^2$  é o valor estimado da variância dos erros experimentais obtida por meio da média dos erros quadrados:

$$\hat{\sigma}^2 = MS_{Res} = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (\hat{\varepsilon}_i^F)^2 \quad (4.15)$$

Como os resíduos estimados  $\hat{\varepsilon}_i^F$  são aproximações para os resíduos do modelo  $\varepsilon_i^F$ , obtemos os mesmos por meio dos valores de  $\hat{\beta}_0$  e  $\hat{\beta}_1$ , que são as estimativas para os valores de  $\beta_0$  e  $\beta_1$ , respectivamente, ou seja,

$$\hat{\varepsilon}_i^F = y^F(\mathbf{x}_i) - \hat{y}^F(\mathbf{x}_i) \quad (4.16)$$

Se o valor calculado de  $F_0$  é maior que  $F_{\alpha,2,n-2}$  (valor obtido para a distribuição F com dois graus de liberdade no numerador e n-2 graus de liberdade no denominador que define uma cauda direita com área de valor  $\alpha$ ), a hipótese nula ( $\beta_1 = 0$ ) é rejeitada com um grau de confiança de  $100(1 - \alpha)\%$  de confiança. Além disso, pode-se concluir que, se  $\hat{\beta}_1 > 0$ ,  $\beta_1 > 0$  com o mesmo grau de confiança.

Se for determinado que  $\beta_1 > 0$ , pode-se concluir que provavelmente o modelo matemático prevê, pelo menos de forma qualitativa, o fenômeno físico simulado. Caso contrário, o modelo deve ser reconsiderado. A conclusão definitiva de que o modelo prevê o fenômeno depende

da verificação das análises de resíduo, que são premissa fundamental de toda e qualquer análise estatística.

Apesar do teste-F unilateral ser um pouco menos eficiente do que o teste-T unilateral (o teste-F rejeita a hipótese nula com menos frequência do que o teste-T), este é utilizado para garantir a confiança do procedimento estatístico em  $100(1 - \alpha)\%$ .

#### 4.3.1.2 Passo 2: Análise de Resíduos

A análise de resíduos é uma etapa fundamental para garantir que as premissas dos modelos estatísticos são válidas. Além disso, fornece esclarecimentos adicionais sobre a qualidade das previsões do modelo matemático. Especificamente, a análise de resíduos permite avaliar se o modelo matemático falha em alguma região específica do espaço amostral.

A análise de resíduos pode ser realizada facilmente por meio da observação de gráficos de resíduo ou formalmente com testes estatísticos. Infelizmente, enquanto a primeira técnica depende da experiência do usuário, a segunda pode não ser sensível o suficiente. Independentemente disso, a análise gráfica dos resíduos é a mais difundida, de forma que será o método adotado neste trabalho. Os gráficos mais importantes para análise são:

- Gráfico normal: usado para verificar se os resíduos apresentam distribuição próxima da normal;
- Gráfico de resíduos  $\hat{\varepsilon}_i^F$  versus valores ajustados  $\hat{y}^F(\mathbf{x}_i)$ : usado para identificar se a variância experimental depende da magnitude da variável de interesse e se existe alguma região onde os erros são polarizados (o que também viola a suposição de independência de condição para os erros);
- Gráfico de resíduos  $\hat{\varepsilon}_i^F$  versus variáveis do modelo matemático  $\mathbf{x}_i$ : usado para identificar se a variância experimental depende da magnitude de qualquer variável do modelo matemático e se existe alguma região onde os erros são polarizados (o que também viola a suposição de independência de condição para os erros);
- Gráfico de resíduos  $\hat{\varepsilon}_i^F$  versus a ordem  $i$  da colata de dados: usado para verificar a existência de qualquer fator externo que afete a aquisição de dados (o que também viola a suposição de independência de condição para os erros);
- Gráfico de resíduos  $\hat{\varepsilon}_i^F$  versus variáveis experimentais  $v_i$  não incluídos em  $\mathbf{x}_i$ : usado para verificar a existência de qualquer fator externo que afete a aquisição de dados,

contudo, estes valores não são modelados, como por exemplo, operador do equipamento, lote de traçador, etc.

Durante a análise dos resíduos é importante perceber que são apenas aproximações dos verdadeiros erros do modelo. A existência de um ou mais pontos consideravelmente distantes da curva, provenientes dos dados pode significar tanto uma região onde o modelo matemático não representa o fenômeno quanto um problema na aquisição dos dados experimentais.

#### 4.3.1.3 Passo 3: Testes de hipótese para os coeficientes do modelo estatístico

Quando as premissas do modelo estatístico são confirmadas, torna-se necessário verificar se o modelo matemático é polarizado, ou seja,  $b(\mathbf{x}) \neq 0$ , de forma que  $y^M(\mathbf{x}) \neq y^R(\mathbf{x})$ . Isso pode ocorrer quando  $\beta_0 \neq 0$  e/ou se  $\beta_1 \neq 1$ . Estas condições podem ser testadas simultaneamente pelo procedimento descrito por Mandel e Linning (1957).

Um intervalo de confiança simultâneo para  $\beta_0$  e  $\beta_1$  com intervalo de confiança de  $100(1 - \alpha)\%$  é delimitado pela seguinte equação de elipse:

$$n (\hat{\beta}_0 - \beta_0)^2 + 2 P (\hat{\beta}_0 - \beta_0)(\hat{\beta}_1 - \beta_1) + Q (\hat{\beta}_1 - \beta_1)^2 = R \quad (4.17)$$

Onde os valores de P, Q e R podem ser determinados por:

$$P = \sum_{i=1}^n y^M(\mathbf{x}_i) \quad (4.18)$$

$$Q = \sum_{i=1}^n [y^M(\mathbf{x}_i)]^2 \quad (4.19)$$

$$R = 2 F_{\alpha, 2, n-2} \hat{\sigma}^2 \quad (4.20)$$

Desta forma pode-se concluir que o modelo matemático é polarizado com  $100(1 - \alpha)\%$  de confiança, se o ponto  $(\beta_0, \beta_1) = (0, 1)$  é localizado fora da região de confiança. Isto pode ser verificado graficamente traçando a equação de elipse e localizar o ponto mencionado e verificando se a seguinte desigualdade é satisfeita:

$$n (\hat{\beta}_0)^2 + 2 P (\hat{\beta}_0)(\hat{\beta}_1 - 1) + Q (\hat{\beta}_1 - 1)^2 > R \quad (4.21)$$

Embora se prefira um modelo matemático imparcial, um modelo matemático tendencioso pode ainda ser útil, tanto qualitativamente quanto quantitativamente, desde que o modelo estatístico seja usado como uma fórmula de calibração.

De acordo Montgomery, Peck e Vining (2006), o método de Mandel e Linnig é eficiente, considerando que proporciona sempre uma região de confiança menor do que o procedimento de Bonferroni onde se emprega o teste-T para  $\beta_0$  e  $\beta_1$  individualmente, utilizando uma significância de  $\alpha/4$  em cada teste.

O intervalo de confiança simultâneo obtido para  $\beta_0$  e  $\beta_1$  foi utilizado para derivar o teste-F unilateral utilizado no item 4.3.1.1.

$$n (\hat{\beta}_0 - \beta_0)^2 + 2 P (\hat{\beta}_0 - \beta_0)(\hat{\beta}_1) + Q (\hat{\beta}_1)^2 = R \quad (4.22)$$

Quando  $\beta_1 \neq 0$ , a equação da elipse não terá nenhuma solução real para  $\beta_0$ , pois isso resultaria em um resultado negativo para a equação. Após algumas manipulações algébricas o teste-F aplicado no item 4.3.1.1 pode ser encontrado. Além disso, como a elipse que representa o intervalo de confiança simultâneo para  $\beta_0$  e  $\beta_1$  está centrada no ponto  $(\beta_0, \beta_1) = (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$ , se  $\hat{\beta}_1 > 0$  e  $\beta_1 \neq 0$ , toda a elipse estará sobre a linha  $\beta_1 = 0$ . Por consequência, um teste-F unilateral pode ser utilizado para verificar se a hipótese nula é rejeitada e  $\hat{\beta}_1 > 0$ .

Considerando que os testes estatísticos realizados nos itens 4.3.1.1, 4.3.1.2 e 4.3.1.3 são baseados na mesma região de confiança, o intervalo de confiança total do procedimento estatístico proposto é mantida a mesma da elipse de confiança.

4.3.1.4: Passo 4: Determinação dos intervalos de confiança para o valor real da variável de Interesse

Durante o processo de validação de um modelo matemático destinado a utilização quantitativa, a estimativa da exatidão do modelo matemático é crítica, uma vez que define se o modelo matemático é adequado para uma aplicação específica ou não. Uma forma intuitiva de medir a precisão do modelo matemático é a determinação dos intervalos de confiança para o valor real da variável de interesse com base em previsões do modelo matemático. Estes intervalos devem ter em conta tanto o viés da modelagem matemática quanto a incerteza dos dados experimental.

De acordo com Mandel e Linning (1957), os intervalos de confiança utilizando modelos estatísticos pode ser obtido do intervalo de confiança simultâneo para  $\beta_0$  e  $\beta_1$  (passo 3). Desta

forma, um número ilimitado de intervalos de confiança pode ser determinado sem reduzir a confiança total do procedimento estatístico. A relação apropriada é:

$$\hat{y}^F(\mathbf{x}_i) - \sqrt{R \left\{ \frac{1}{n} + \frac{[y^M(\mathbf{x}_i) - \bar{m}]^2}{S_{mm}} \right\}} \leq E(y^F(\mathbf{x}_i)) \leq \hat{y}^F(\mathbf{x}_i) + \sqrt{R \left\{ \frac{1}{n} + \frac{[y^M(\mathbf{x}_i) - \bar{m}]^2}{S_{mm}} \right\}} \quad (4.23)$$

Um intervalo de confiança mais estreito para a resposta média pode ser calculado substituindo

$\sqrt{2 F_{\alpha/2, n-2}}$  (presente no termo  $\sqrt{R}$ ) por  $t_{\alpha/2, n-2}$  (valor da distribuição  $t$  com  $n - 1$  graus de liberdade que definem a área sob a cauda direita da curva para  $\alpha/2$ ) na última equação. Para grandes  $n$ ,  $t_{\alpha/2, n-2} / \sqrt{2 F_{\alpha/2, n-2}} \approx 0.8$ . No entanto, seu uso poderia reduzir a confiança total do procedimento estatístico (Mandel and Linning(1957)).

Para o modelo estatístico proposto  $E(y^F) = y^R$ . Portanto, intervalos de confiança para o valor real da quantidade de interesse pode ser escrito diretamente como:

$$\hat{y}^F(\mathbf{x}_i) - \sqrt{R \left\{ \frac{1}{n} + \frac{[y^M(\mathbf{x}_i) - \bar{m}]^2}{S_{mm}} \right\}} \leq y^R(\mathbf{x}_i) \leq \hat{y}^F(\mathbf{x}_i) + \sqrt{R \left\{ \frac{1}{n} + \frac{[y^M(\mathbf{x}_i) - \bar{m}]^2}{S_{mm}} \right\}} \quad (4.24)$$

Para modelos matemáticos polarizados que foram verificados estatisticamente, gráficos particularmente úteis são construídos com o intervalo de confiança junto à curva prevista pelo modelo matemático  $y^M(\mathbf{x}_i)$  versus variáveis do modelo matemático  $\mathbf{x}_i$  ou predição do modelo matemático  $y^M(\mathbf{x}_i)$ . Estes gráficos identificam se as predições do modelo matemático são polarizadas em alguma região e ajudam a julgar se a polarização verificada estatisticamente é realmente importante na prática. Um envezamento irrelevante pode ser desconsiderado com segurança e a calibração linear pode ser desprezada.

Nota-se que a largura do intervalo de confiança obtido depende explicitamente de  $y^M(\mathbf{x}_i)$ . Isso é inconveniente para fins de comparação dos modelos matemáticos. Neste caso, basta escolher o modelo matemático que apresenta menor  $\hat{\sigma}^2$ , uma vez que este parâmetro incorpora implicitamente o efeito da falta de ajuste do modelo matemático além do erro puro, devido à variabilidade experimental (Montgomery). Esta prática também identifica o comprimento do intervalo de confiança para  $y^R(\mathbf{x}_i)$  que é:

$$l(\mathbf{x}_i) = 2 \sqrt{R \left\{ \frac{1}{n} + \frac{[y^M(\mathbf{x}_i) - \bar{m}]^2}{S_{mm}} \right\}} \quad (4.25)$$

Para experiências replicadas e equilibradas, com  $m$  replicações e  $k$  condições diferentes, somando um total de  $n$  experiências ( $n = m k$ ), ou para experimentos sem replicações, onde  $n = k$ , o valor da RMS (média das raízes quadradas) para  $l(\mathbf{x}_i)$  é:

$$l_{RMS} = \sqrt{\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k [l(\mathbf{x}_i)]^2} = \sqrt{\frac{8R}{n}} \quad (4.26)$$

Onde  $R = 2 F_{\alpha, 2, n-2} \hat{\sigma}^2$ ,  $l_{RMS}$  é mínimo para o modelo matemático com menor  $\hat{\sigma}^2$ .

## 5- RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados obtidos por meio de ensaios realizados utilizando modelagens física e matemática, possibilitando verificar o comportamento das bolhas e consequente escoamento do aço líquido tanto em uma panela de aciaria quanto em um desgaseificador a vácuo RH. Em um primeiro momento serão apresentados os resultados obtidos por modelagem física e matemática da panela de aciaria, seguidos dos resultados relativos às modelagens matemáticas do desgaseificador RH. Para as modelagens matemáticas foram considerados dois modelos de quebra e coalescência de bolhas, o DDM e o MUSIG. Finalmente será apresentada uma verificação estatística dos modelos de quebra e coalescência de bolhas, com a devida comparação entre estes e os resultados obtidos por modelagem física.

### 5.1 Panela de aciaria

Foram realizadas modelagens, física e matemática, para simular a injeção de gás pelo fundo da panela de aciaria. Inicialmente, foi realizada uma simulação para verificar o efeito do tamanho das bolhas sobre a mistura do aço em uma panela de aciaria. Este efeito pode ser verificado com o uso de curvas de mistura adimensionais. A figura 5.1 mostra o aspecto das curvas obtidas para uma vazão de 20 litros por minuto, com bolhas de diâmetro fixo, nos valores de 2,0mm, 20,0mm, 40,0mm e 80,0mm, e com modelos de quebra e coalescência de bolhas, onde o diâmetro da bolha varia em função da posição e das condições de escoamento.

É possível perceber que bolhas menores promovem maior mistura no aço líquido que as bolhas maiores. Contudo, para os modelos de quebra e coalescência de bolhas, tanto o MUSIG quanto o DDM, os resultados foram praticamente os mesmos. Os tempos necessários para uma mistura de 95% são mostrados na tabela V.1. Os valores da concentração normalizada da figura 5.1 correspondem exatamente à mistura, afinal a curva foi ajustada de tal forma que a concentração máxima tivesse valor unitário.

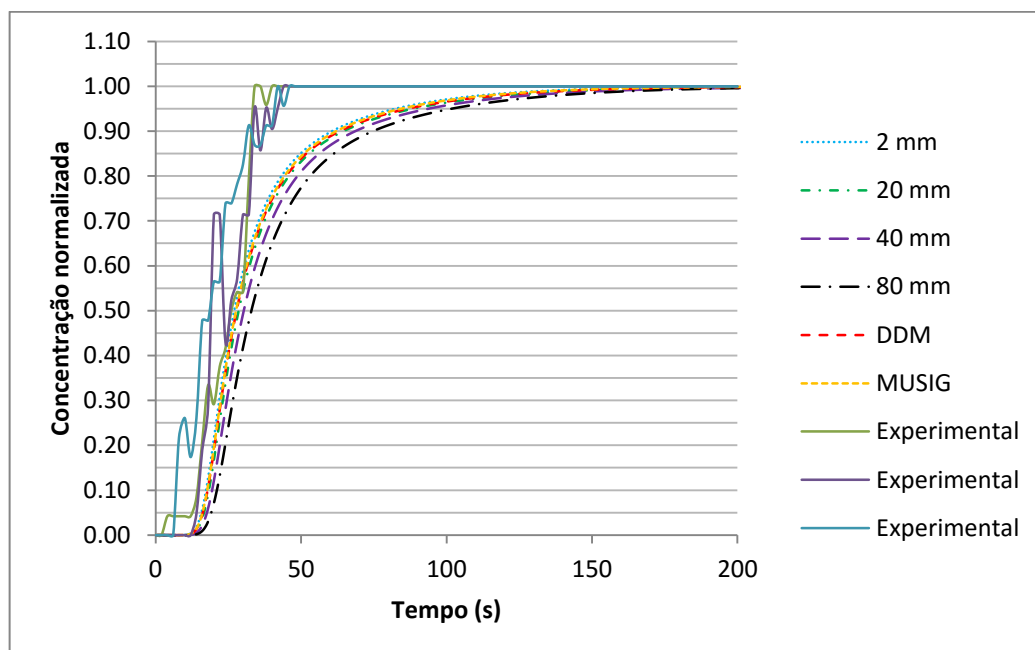


Figura 5.1: Tempo de mistura para diferentes tamanhos de bolhas

Tabela V.1: Tempo de mistura do aço para diferentes diâmetros de bolha

Diâmetro da bolha (mm)	Tempo de mistura de 95% (s)
2	82
20	88
40	93
80	102
DDM	87
MUSIG	88
Experimental (média)	37

Este resultado justifica a preocupação em se compreender apropriadamente o comportamento das bolhas nos reatores metalúrgicos. Ele mostra também que os modelos DDM e MUSIG representam de forma semelhante o efeito das bolhas sobre o escoamento do aço líquido, contudo, esta é uma análise indireta sobre o comportamento das bolhas em reatores metalúrgicos.

Para verificar de forma mais profunda o comportamento das bolhas no reator, os modelos DDM e MUSIG foram utilizados para simular a panela de aciaria agitada por gás utilizando diferentes vazões de gás (5, 10, 15 e 20l/min). Estas simulações permitiram visualizar a distribuição de tamanho de bolhas no reator e a fração de volume de gás. A figura 5.2 mostra a

distribuição do tamanho de bolhas no reator, através de mapas de contorno fornecidos pelo software CFX para uma vazão de 5 litros por minuto. É fácil perceber diferenças significativas nos resultados obtidos com os modelos de quebra e coalescência diferentes. Contudo, a informação do tamanho das bolhas em cada ponto do reator não é o suficiente. É necessário saber quanto de gás existe em cada ponto do reator. Esta informação pode ser visualizada na figura 5.3, onde é mostrada a fração de volume de gás em cada ponto do reator, na forma de mapas de contorno, também para uma vazão de 5 litros por minuto. Neste caso, não existem diferenças significativas entre os resultados obtidos para os dois modelos. Combinando as informações das duas imagens foi possível construir histogramas de distribuição do tamanho das bolhas, como o mostrado na figura 5.4. Pode-se notar que para o modelo MUSIG a variância das bolhas é menor que para o modelo DDM, mas o tamanho médio de bolha é semelhante.

O diâmetro médio das bolhas obtido pelo modelo de quebra e coalescência MUSIG para uma vazão de 5 litros por minuto foi de 13,7mm, enquanto o modelo DDM forneceu um diâmetro médio de 14,3mm. Ambos com mesma ordem de grandeza, contudo, enquanto o desvio padrão do tamanho das bolhas encontrada para o modelo MUSIG foi de 1,5mm, para o modelo DDM o valor foi bem maior, de 1,9mm.

Para vazões maiores de injeção de gás no modelo matemático da panela de aciaria os resultados foram semelhantes, no que diz respeito ao comportamento dos gases no reator. A figura 5.5 mostra o mapa de contornos para a distribuição dos tamanhos das bolhas obtido para a panela de aciaria, usando os modelos de quebra e coalescência MUSIG e DDM quando a vazão de injeção é de 10 litros por minuto. A figura 5.6 mostra a distribuição da fração de volume no reator para estas mesmas condições.

Mais uma vez é possível notar que enquanto a distribuição de gás, em fração volumétrica, é muito parecida para os dois modelos, a variação dos diâmetros das bolhas é maior para o modelo de quebra e coalescência DDM.

A figura 5.7 ilustra este resultado na forma de um histograma de distribuição do tamanho de bolhas para os dois modelos de quebra e coalescência com a vazão de injeção de 10 litros por minuto.

O tamanho médio das bolhas obtido para esta vazão foi de 12,8 milímetros para o uso do MUSIG e 13,5 milímetros para o uso do DDM, enquanto a variância do diâmetro foi de 0,8 milímetros para o MUSIG e 1,9 milímetros para o DDM.

Para a vazão de injeção de gases de 15 litros por minuto o perfil de distribuição de tamanho de bolhas é apresentado na figura 5.8, enquanto o perfil de fração volumétrica de gás é mostrado na figura 5.9.

A tendência de uma maior variância dos diâmetros para o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM em relação ao modelo MUSIG permanece, assim como o comportamento semelhante da distribuição de gás no reator. A figura 5.10, onde é mostrado o histograma da quantidade de bolhas em cada faixa de tamanho, confirma esta tendência. Neste caso, o tamanho médio das bolhas foi de 12,2 milímetros para o uso do MUSIG e 13,7 milímetros para o DDM.

Para a vazão de 20 litros por minuto, foram obtidos os perfis de tamanho de bolhas para a panela de aciaria utilizando os modelos de quebra e coalescência MUSIG e DDM são mostrados na figura 5.11, enquanto o perfil de fração de volume é mostrado na figura 5.12.

Mais uma vez fica óbvia a tendência de o modelo de quebra e coalescência DDM apresentar uma maior dispersão nos diâmetros de bolha calculados do que o modelo MUSIG. A figura 5.13 mostra o histograma de distribuição de tamanho de bolhas obtidos para estes modelos para a vazão de 20 litros por minuto.

Combinando os histogramas obtidos para cada uma das vazões avaliadas do modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG, é possível observar de forma global, conforme mostrado na figura 5.14, como o modelo simula a distribuição do tamanho de bolhas em função da vazão. Com o aumento da vazão existe uma leve tendência na diminuição do tamanho médio das bolhas, mas mantendo a mesma ordem de grandeza. A variância dos valores também não teve grandes variações. A maior diferença é a ocorrência de bolhas no reator, que naturalmente aumentou com o aumento da vazão.

Os histogramas obtidos pela modelagem utilizando o modelo de quebra e coalescência DDM também foram combinados e são mostrados na figura 5.15. Neste caso é possível notar que para vazões maiores, dois picos de máximo se tornam cada vez mais proeminentes. O tamanho médio das bolhas também se manteve praticamente constante, assim como a

variância dos resultados, tendo como maior diferença a quantidade de bolhas contida no reator para as vazões maiores.

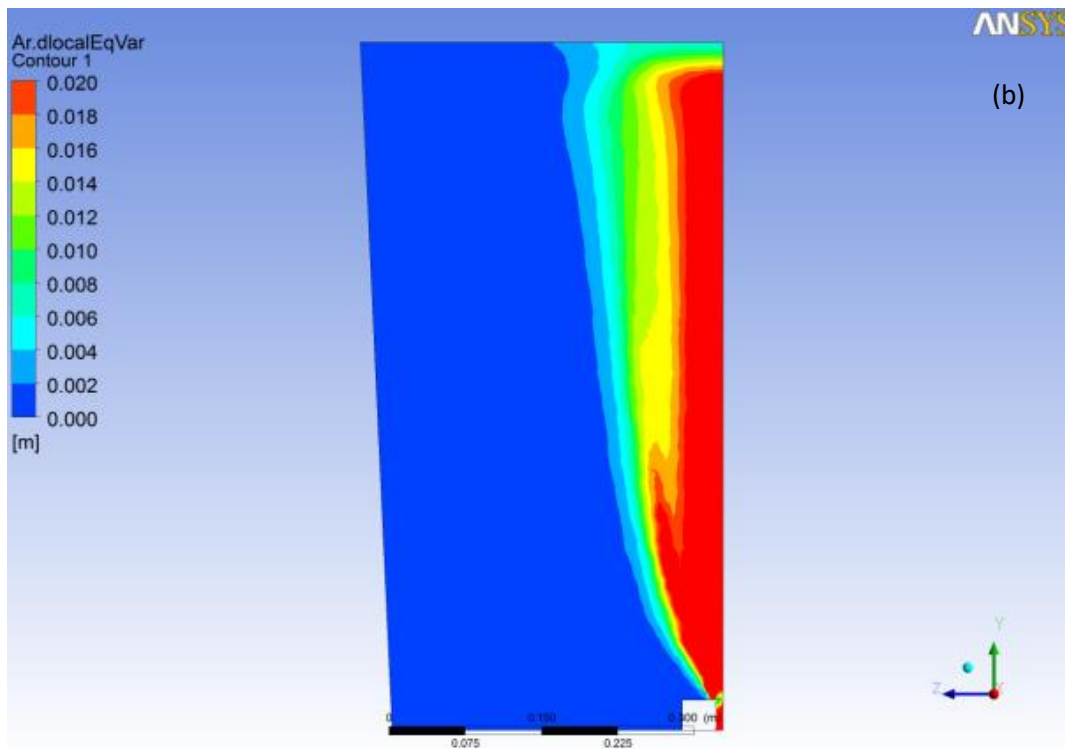
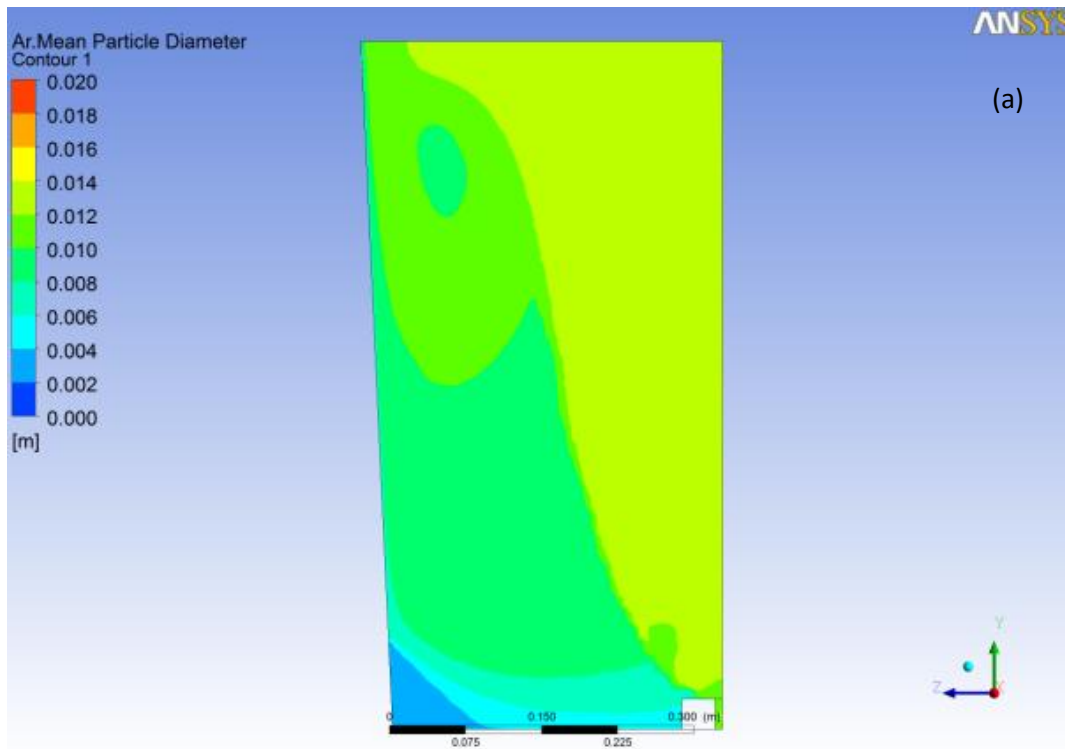


Figura 5.2: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas da panela de aciaria, para uma vazão de 5l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

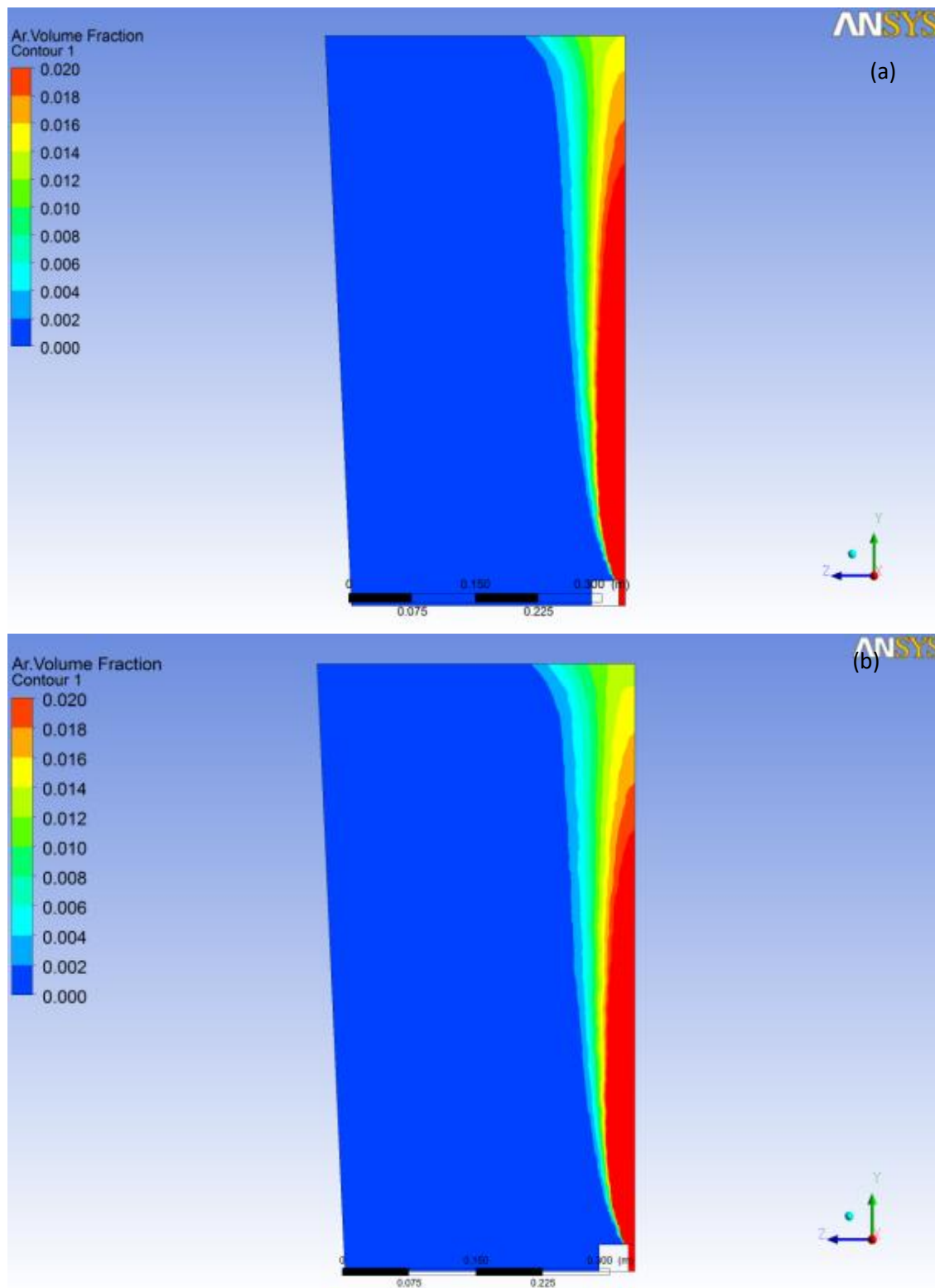


Figura 5.3: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás na panela de aciaria, para uma vazão de 5l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

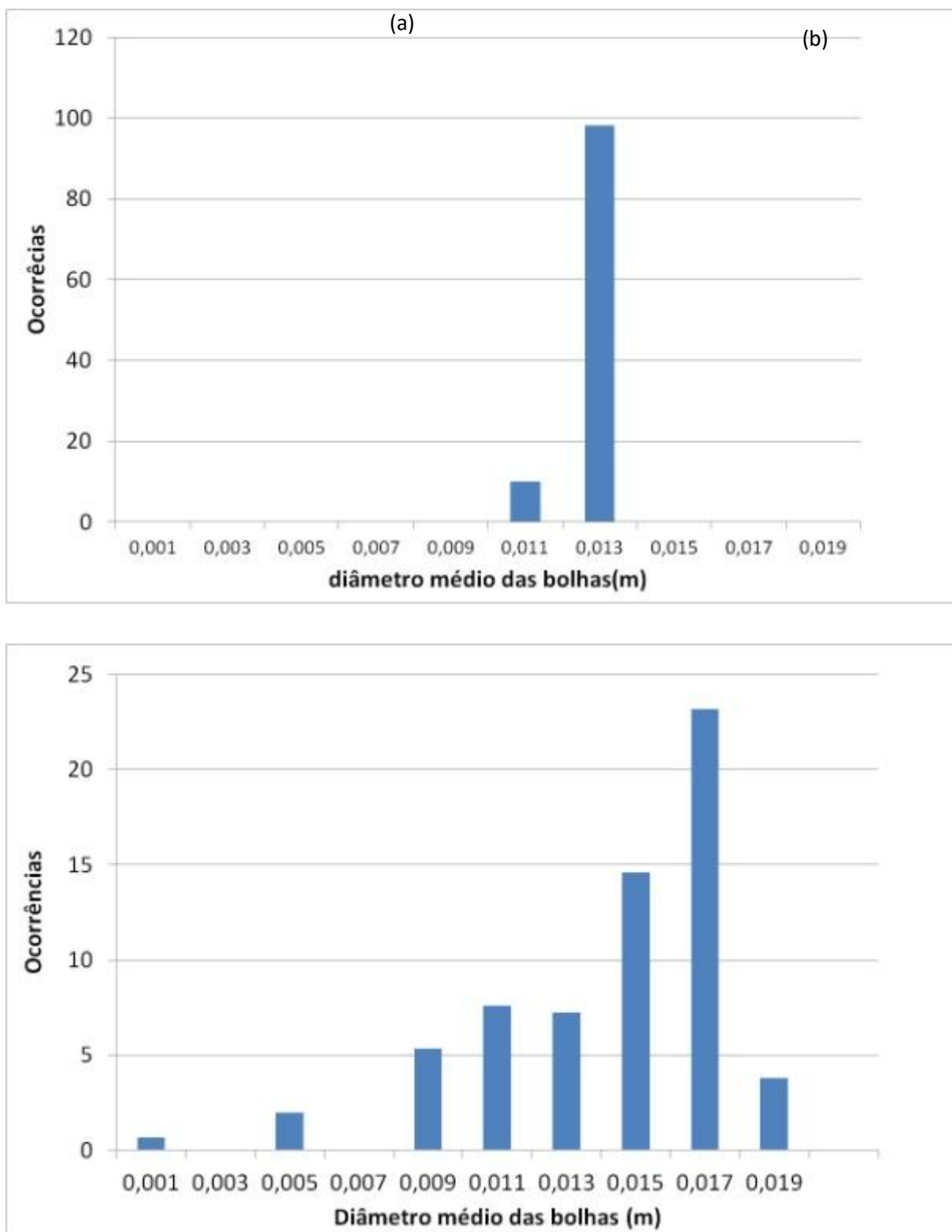


Figura 5.4: Histograma do tamanho de bolhas na panela para vazão de 5l/min MUSIG e DDM

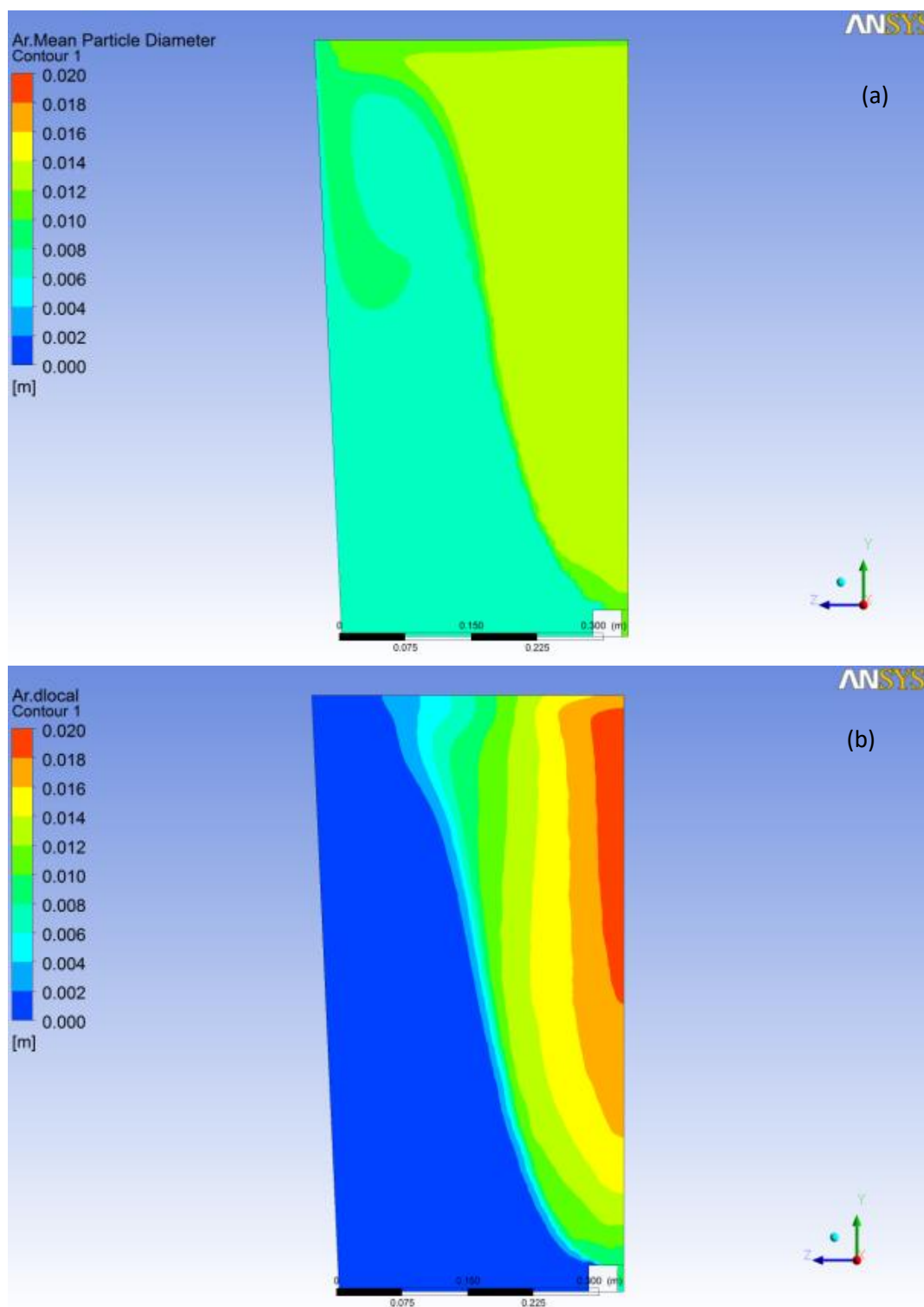


Figura 5.5: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas da panela de aciaria, para uma vazão de 10l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

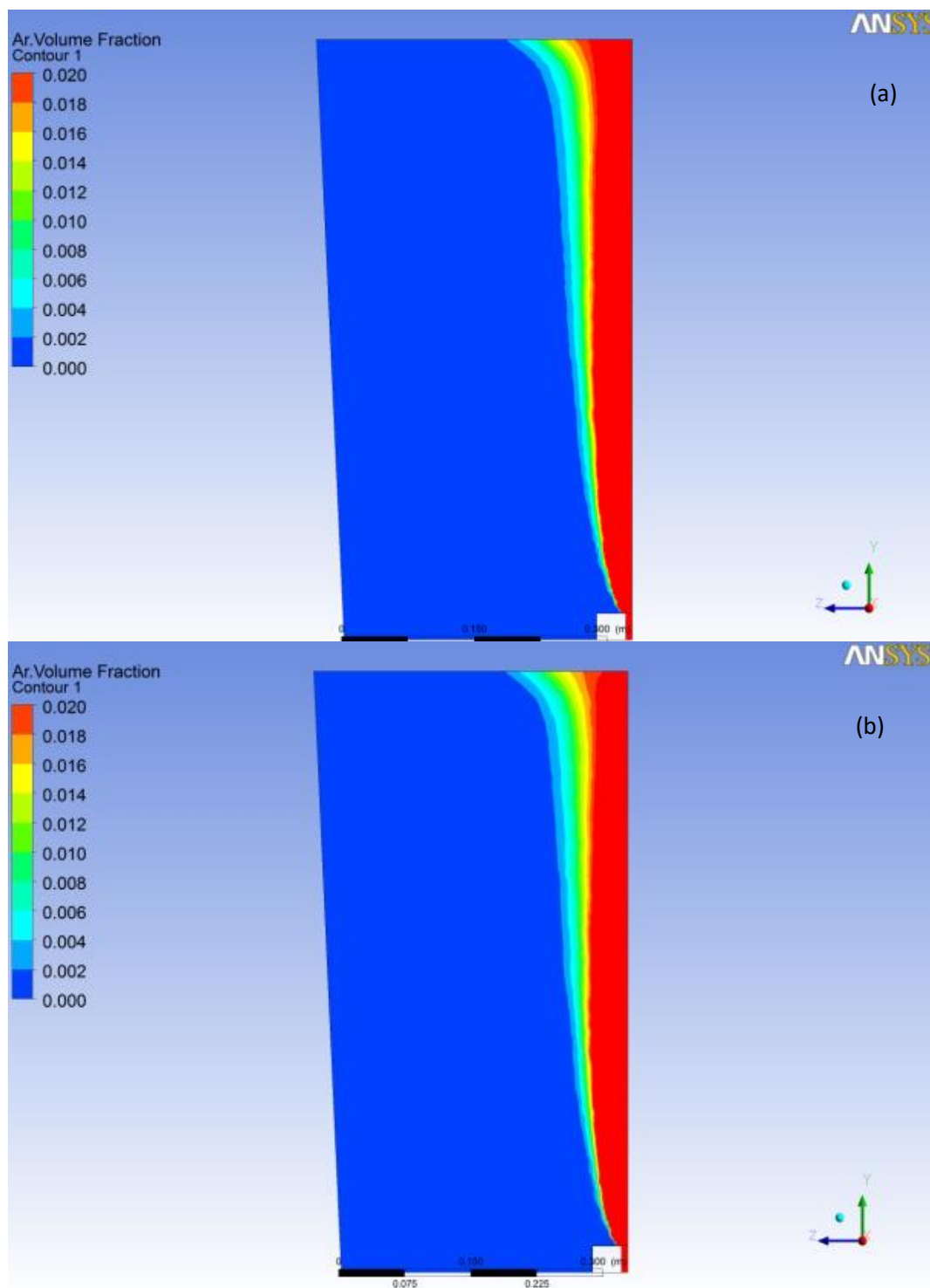


Figura 5.6: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás na panela de aciaria, para uma vazão de 10l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

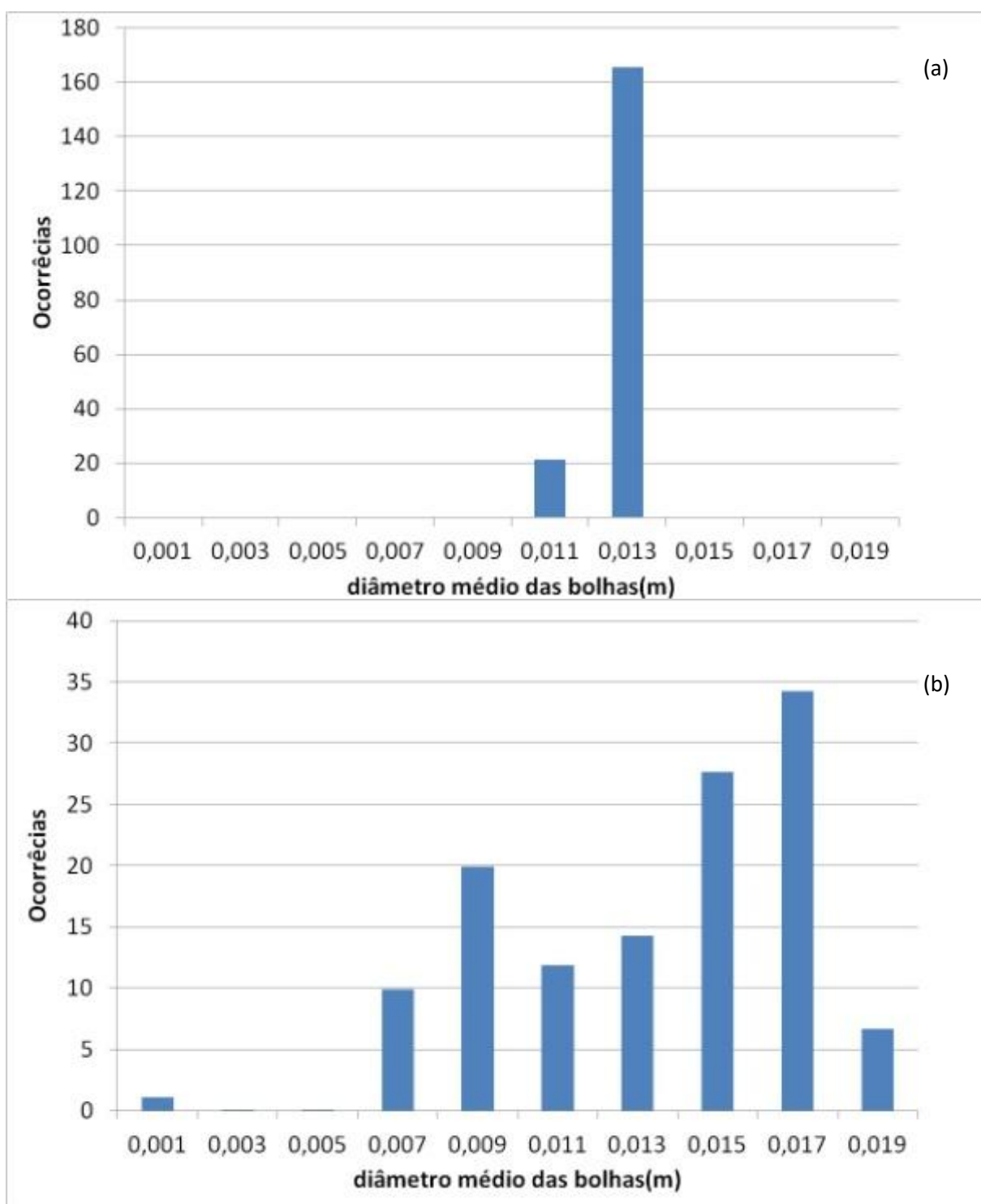


Figura 5.7: Histograma do tamanho de bolhas na panela para vazão de 10 l/min MUSIG e LJM

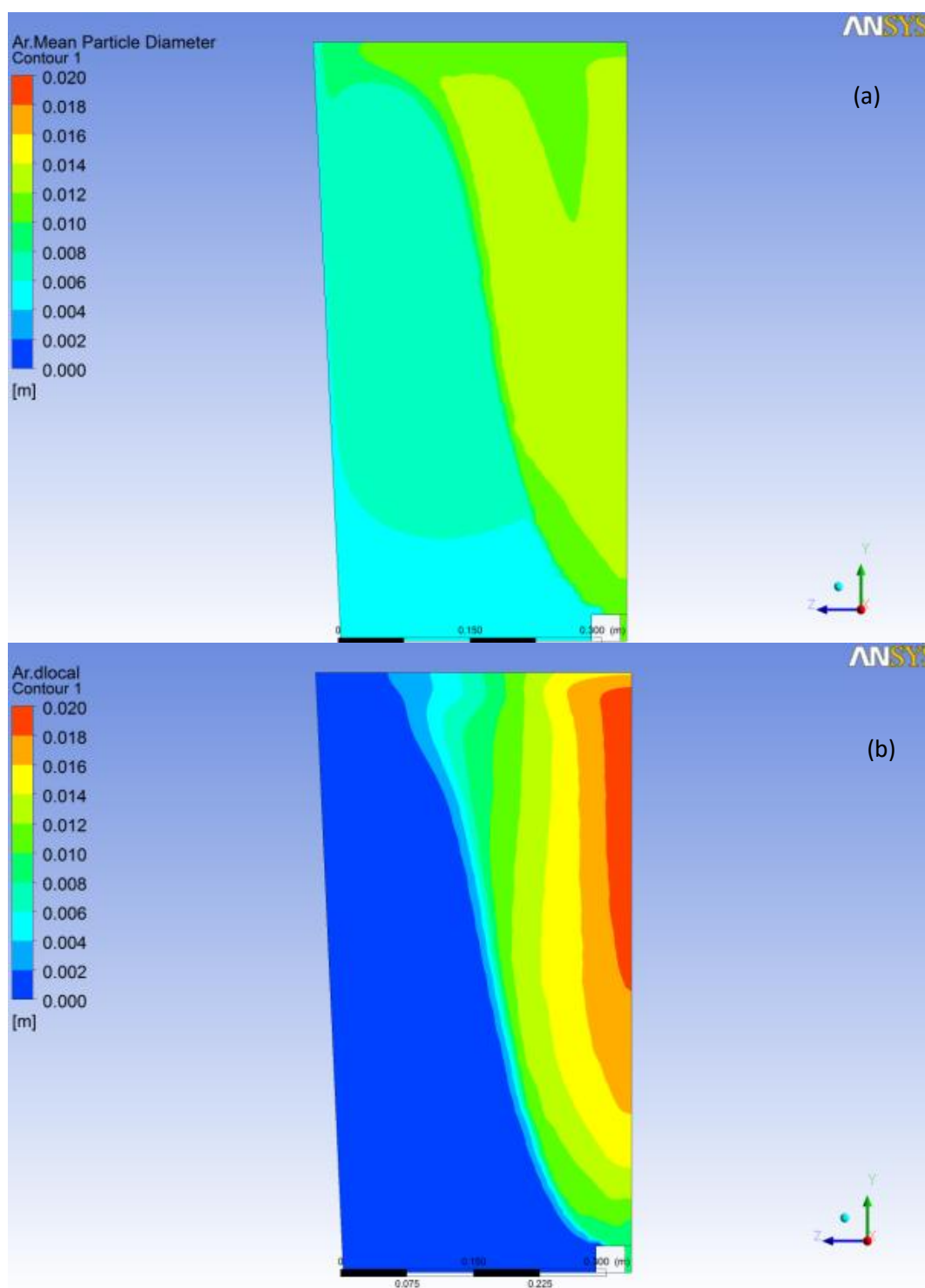


Figura 5.8: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas da panela de aciaria, para uma vazão de 15l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

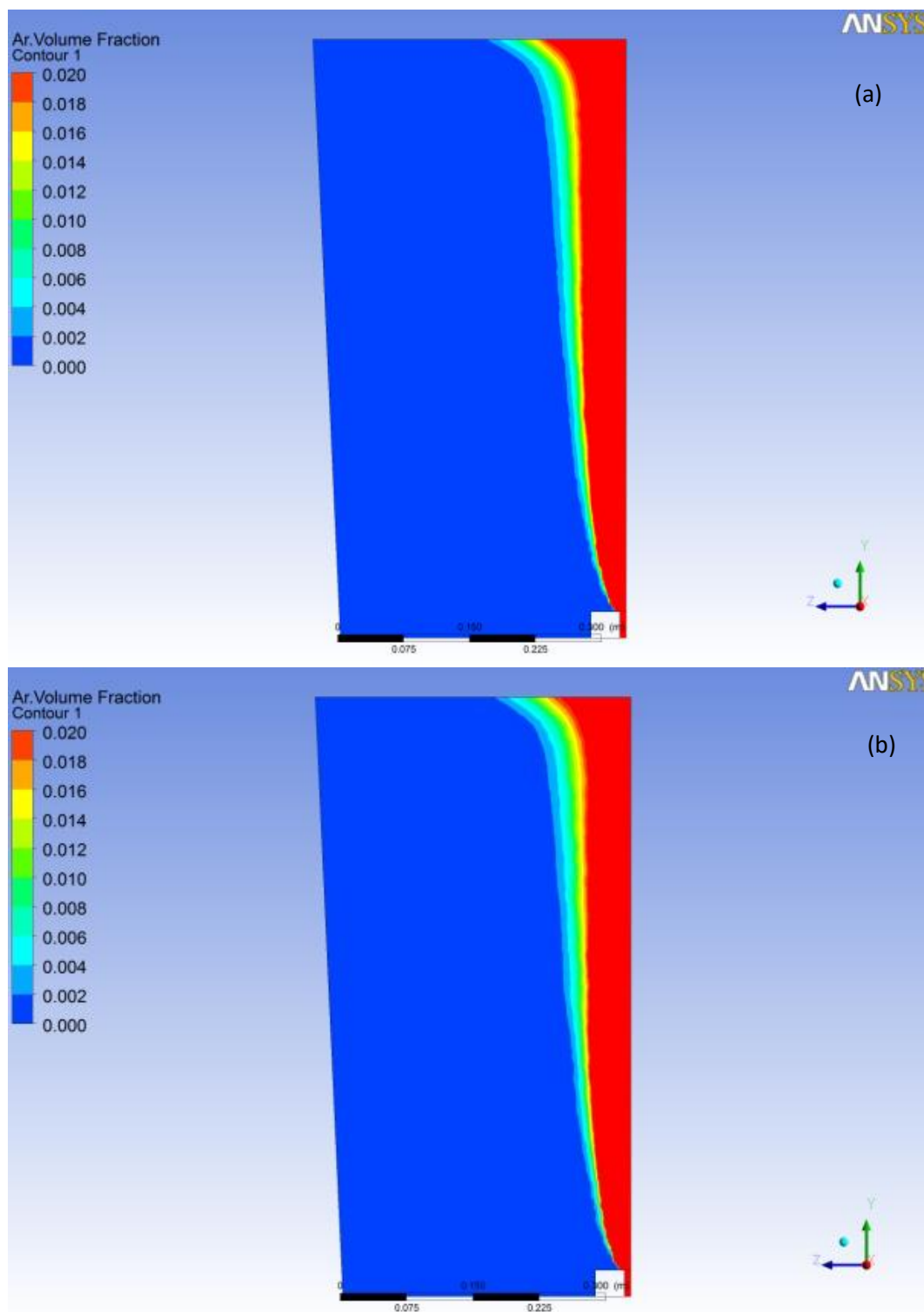


Figura 5.9: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás na panela de aciaria, para uma vazão de 15l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

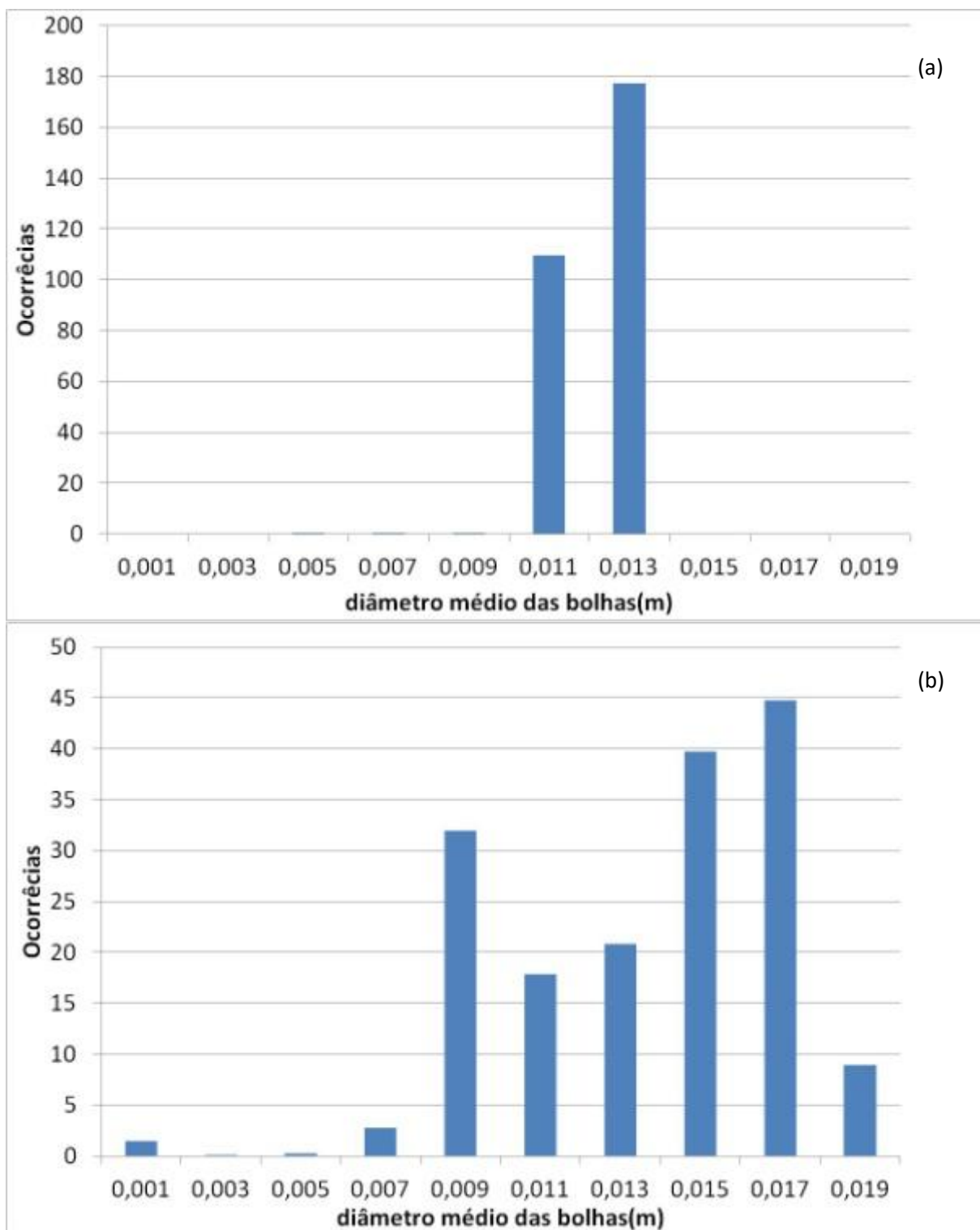


Figura 5.10: Histograma do tamanho de bolhas na panela para vazão de 15 l/min MUSIG e DDM

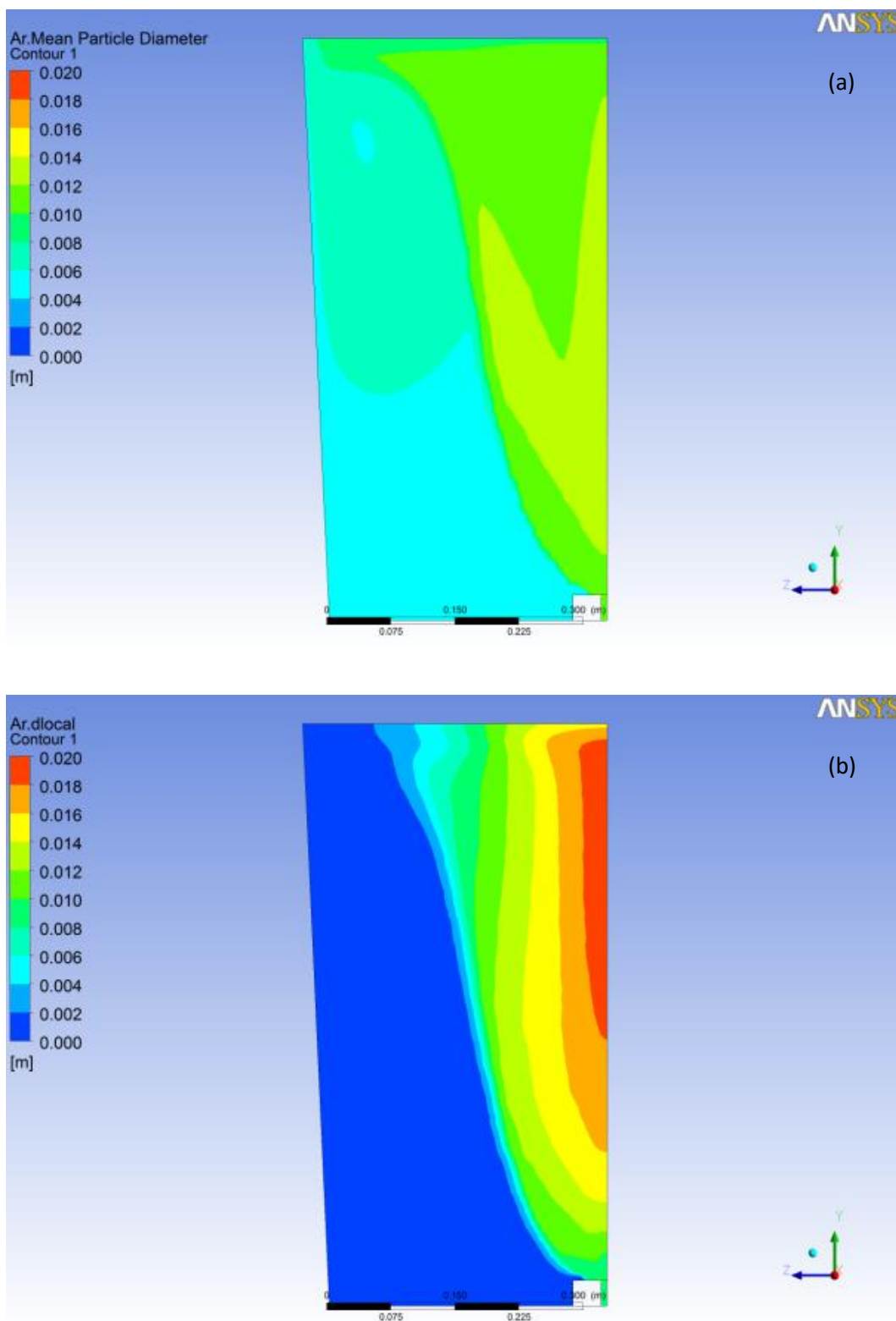


Figura 5.11: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas da panela de aciaria, para uma vazão de 20l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

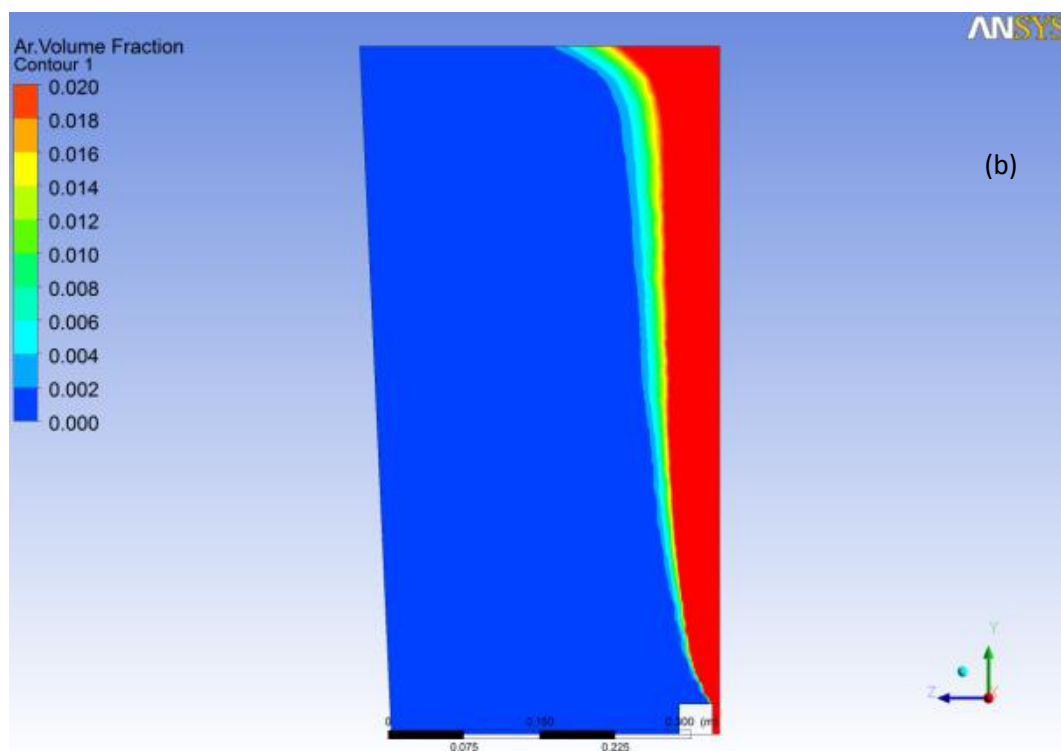
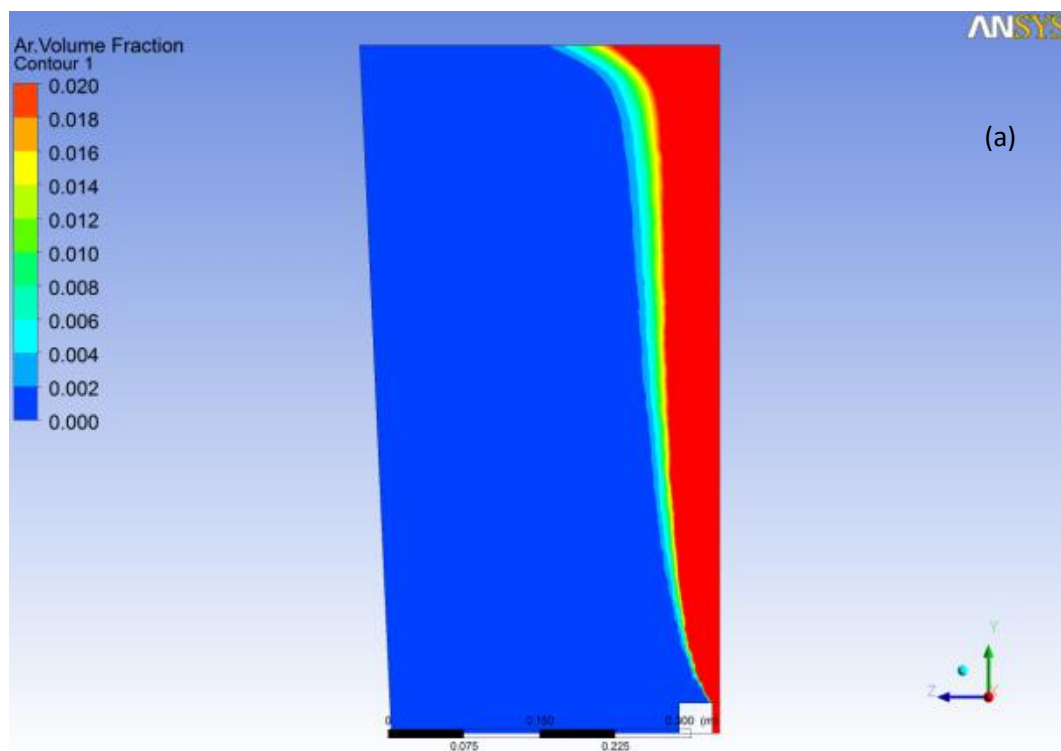


Figura 5.12: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás na panela de aciaria, para uma vazão de 20l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

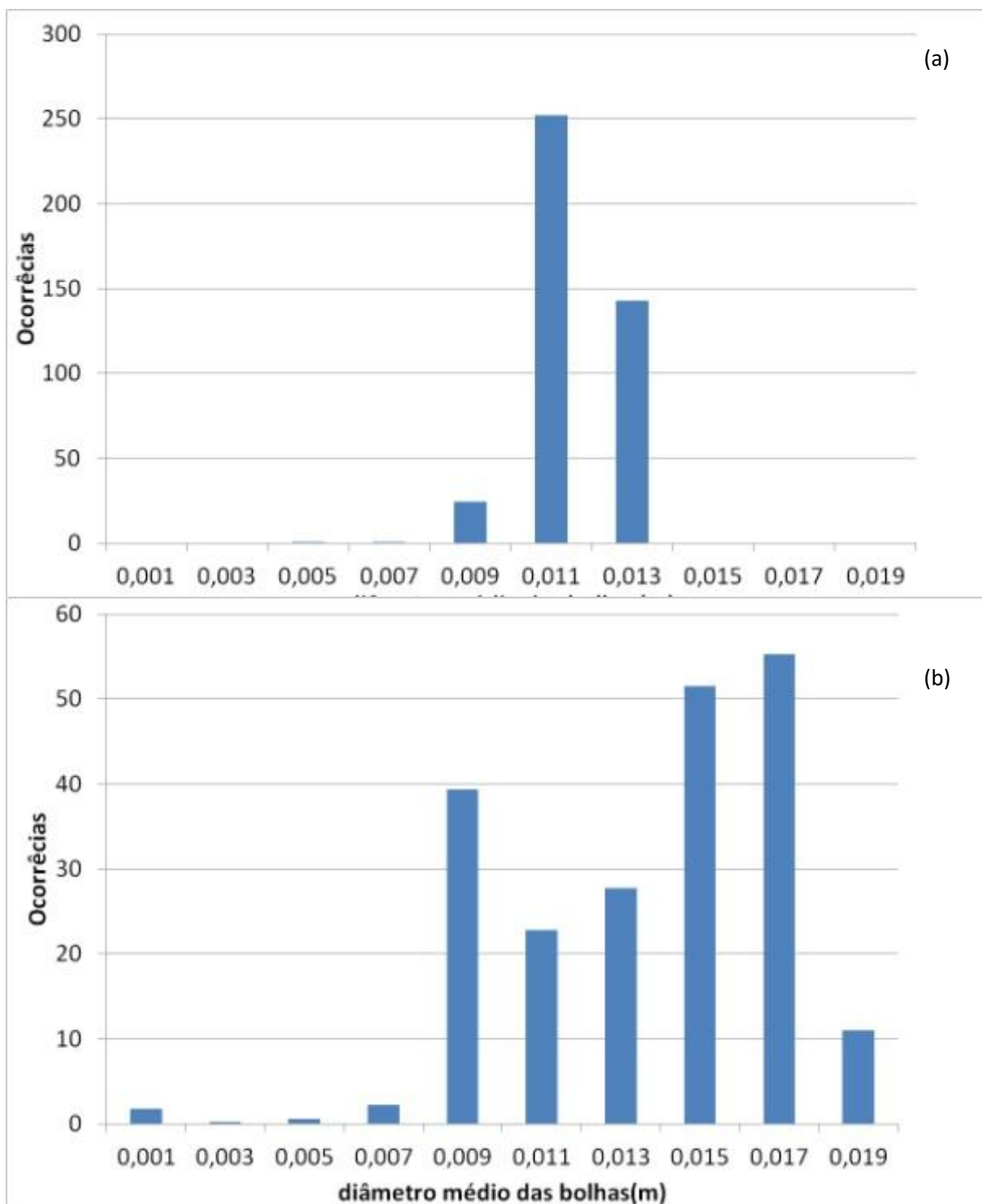


Figura 5.13: Histograma do tamanho de bolhas na panela para vazão de 20 l/min MUSIG e DDM

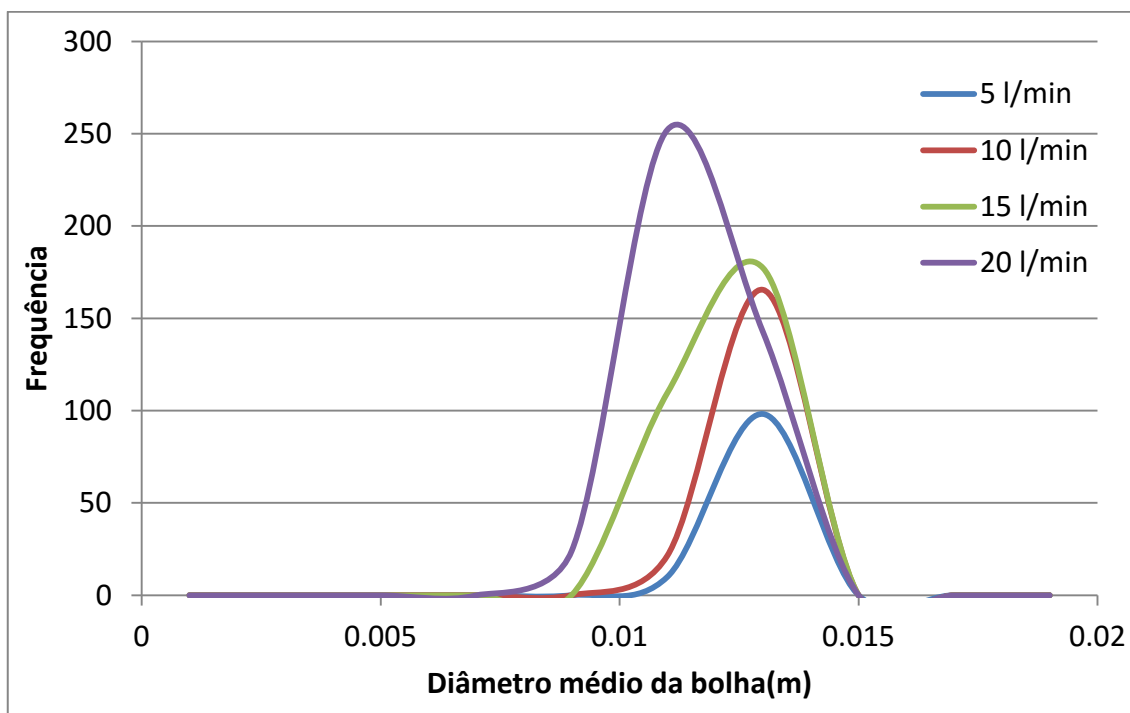


Figura 5.14: Histograma do tamanho de bolhas na panela para diferentes vazões MUSIG

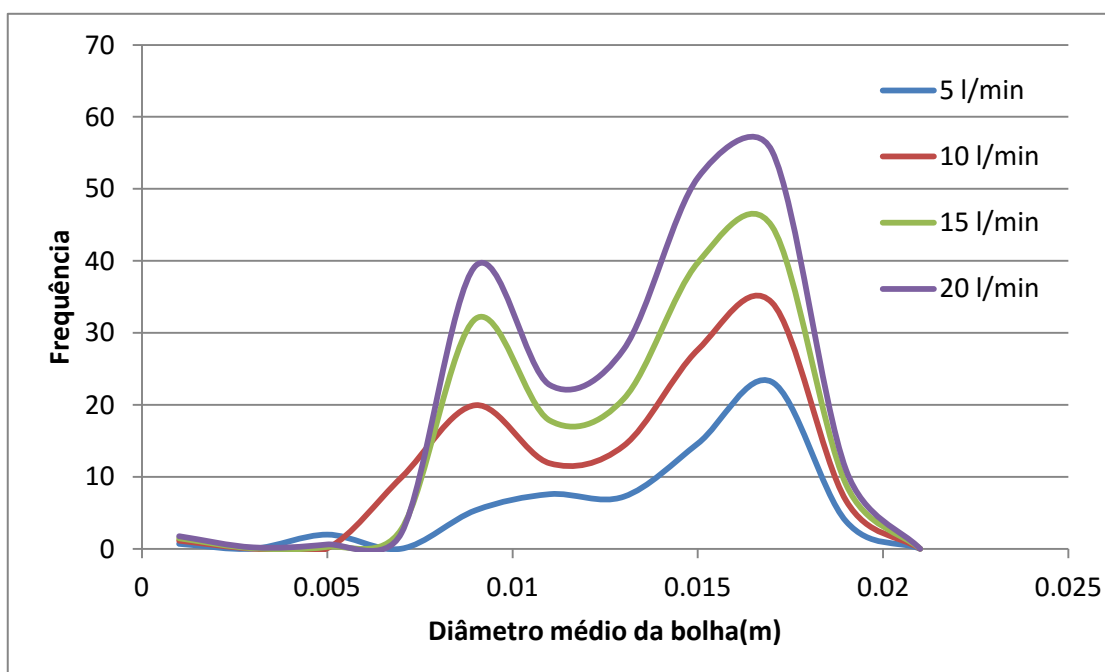


Figura 5.15: Histograma do tamanho de bolhas na panela para diferentes vazões DDM

Toda modelagem matemática deve ser validada por modelagem física ou por dados industriais. Neste caso, foram realizadas simulações utilizando modelagem física a frio, possibilitando a construção de histogramas que representam a distribuição do tamanho de bolhas em uma panela de aciaria, assim como aqueles obtidos por modelagem matemática. A distribuição dos tamanhos das bolhas no modelo físico não é exatamente o mesmo a todo momento. Existe um acúmulo da pressão, até que supere a tensão superficial do fluido, formando as bolhas, que se comportam em um equilíbrio dinâmico com o fluido. Desta forma, para cada vazão foram selecionadas três fotografias para análise de imagem, permitindo a obtenção do comportamento médio das bolhas no interior do reator. A figura 5.16 mostra as três fotografias utilizadas para a construção do histograma de distribuição de tamanho de bolhas utilizando uma vazão de 5 litros por minuto.

Utilizando o software autoCAD, cada uma das bolhas visualizadas nas fotografias foi realçada e medida, permitindo a construção do histograma mostrado na figura 5.17. Neste caso, o diâmetro médio encontrado para as bolhas foi de 12,6 milímetros. Este valor é próximo daquele encontrado nas modelagens matemáticas, tanto com o uso do MUSIG quanto do DDM, contudo, a variância obtida na análise das fotografias foi de 2,1 milímetros, valor bem mais próximo àquele encontrado na modelagem utilizando o modelo de quebra e coalescência DDM do que o obtido com o uso do MUSIG. Combinando os histogramas de distribuição do tamanho das bolhas utilizando as modelagens matemáticas e a física, foi obtido o histograma mostrado na figura 5.18.

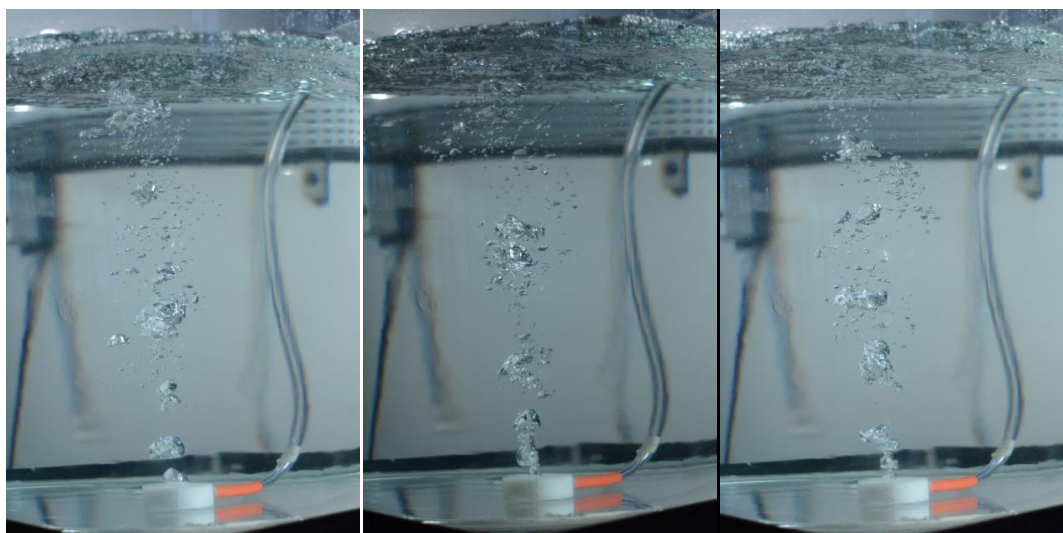


Figura 5.16: Fotografias do modelo físico da panela de aciaria durante ensaio com vazão de 5l/min

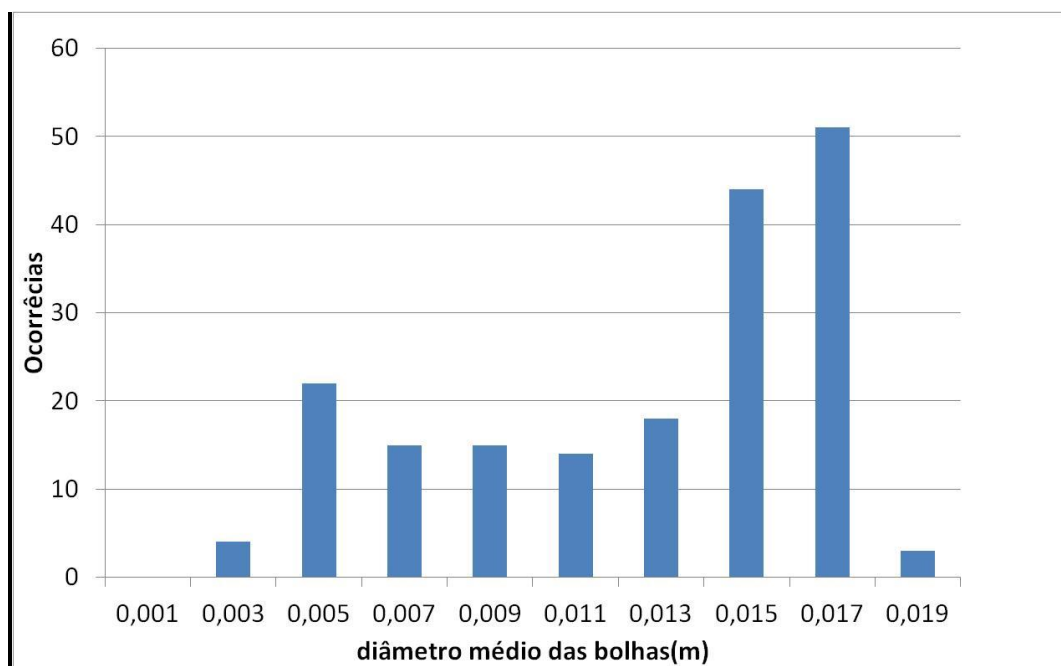


Figura 5.17: Histograma do tamanho de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 5l/min utilizando modelagem física

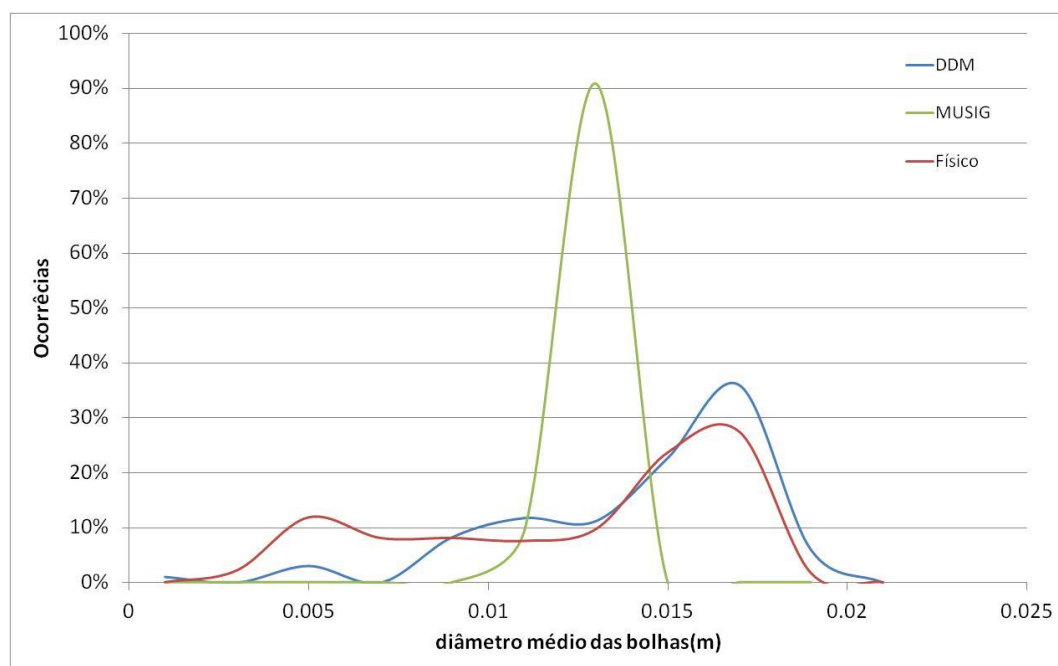


Figura 5.18: Histogramas da distribuição dos tamanhos de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 5l/min por modelagem física e matemática.

Este histograma comparando as três técnicas de modelagem mostra claramente que para a vazão de 5 litros por minuto o modelo de quebra e coalescência DDM se ajusta muito melhor aos resultados obtidos por modelagem física do que aqueles obtidos utilizando o MUSIG.

A figura 5.19 mostra as fotografias obtidas para uma vazão de 10 litros por minuto durante a injeção de gás no reator.

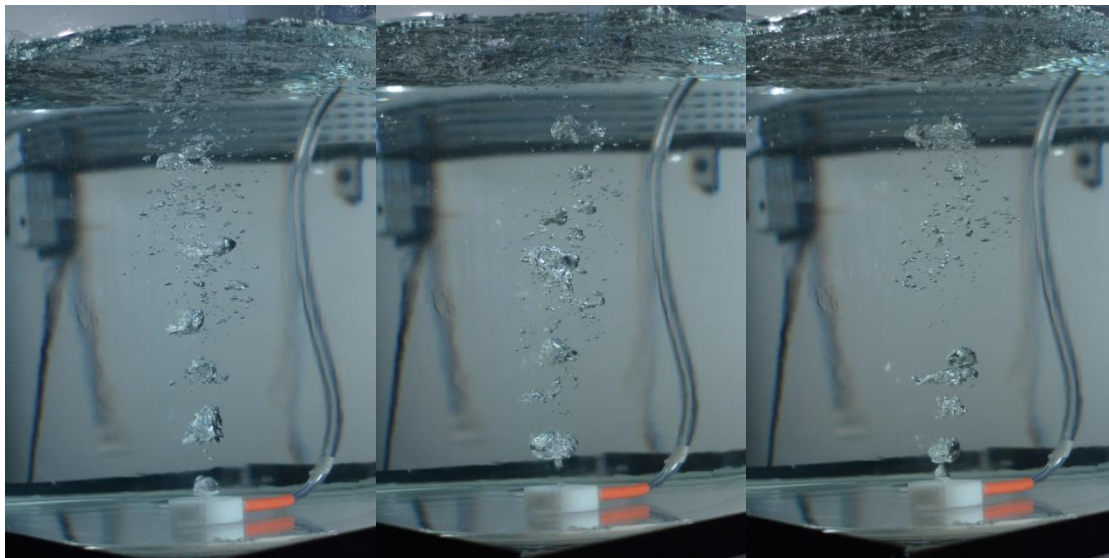


Figura 5.19: Fotografias do modelo físico da panela de aciaria durante ensaio com vazão de 10l/min

Estas fotografias permitiram a construção do histograma de distribuição de bolhas mostrado na figura 5.20, que representa a panela de aciaria durante a injeção de gás com uma vazão de 10 litros por minuto. Neste caso o diâmetro médio encontrado para as bolhas foi de 13,0 milímetros, enquanto a variância encontrada foi de 2,0 milímetros. Novamente estes valores se aproximam dos resultados obtidos por modelagem matemática utilizando o modelo de quebra e coalescência DDM.

Sobrepondo os histogramas obtidos por modelagem física e matemática, novamente é possível confirmar que os valores obtidos por modelagem matemática utilizando o modelo de quebra e coalescência DDM se aproximam mais dos resultados obtidos por modelagem física. A figura 5.21 mostra estes histogramas sobrepostos para a vazão de 10 litros por minuto.

Também foram tiradas fotografias das bolhas no modelo físico da panela de aciaria quando a vazão de gás injetado na panela era de 15 litros por minuto. As três fotografias selecionadas para análise são mostradas na figura 5.22, enquanto o histograma produzido por estas imagens é mostrado na figura 5.23.

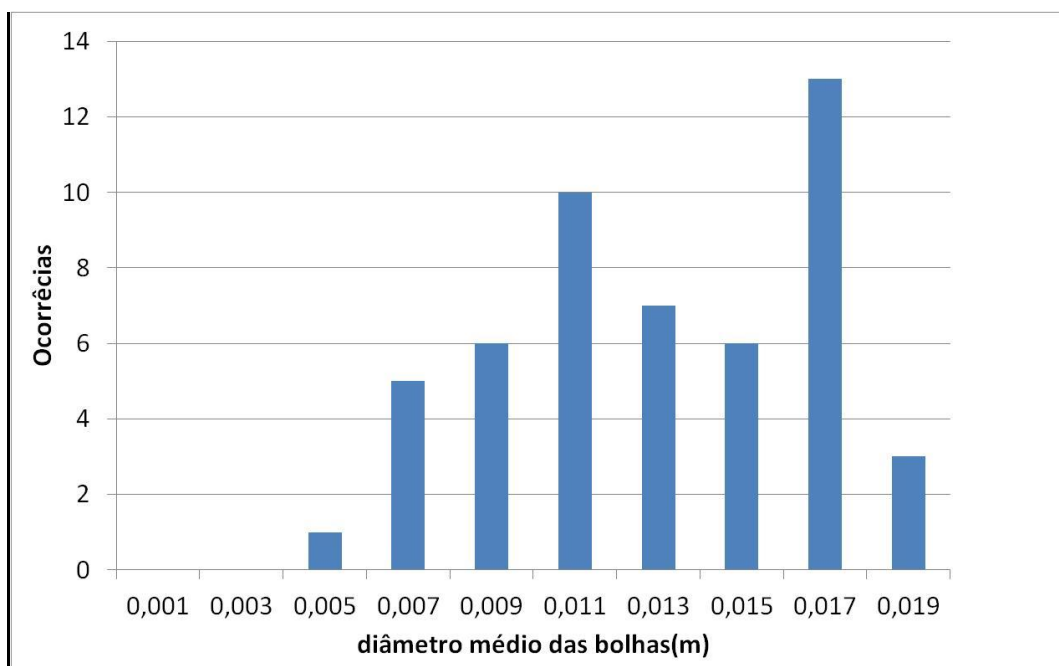


Figura 5.20: Histograma do tamanho de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 10l/min utilizando modelagem física.

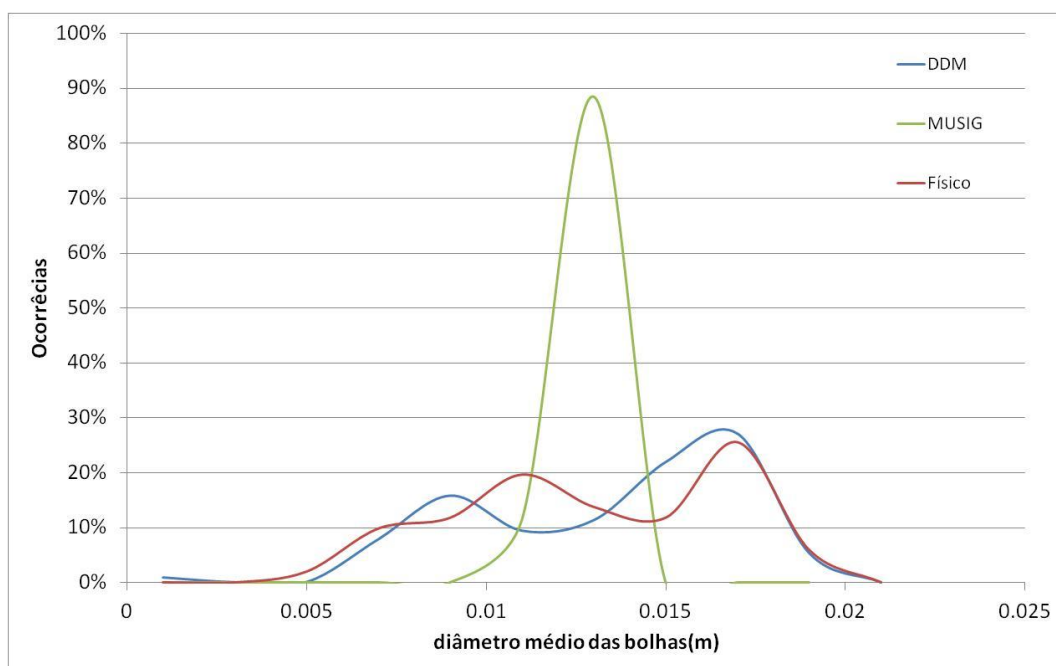


Figura 5.21: Histogramas da distribuição dos tamanhos de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 10l/min por modelagem física e matemática.

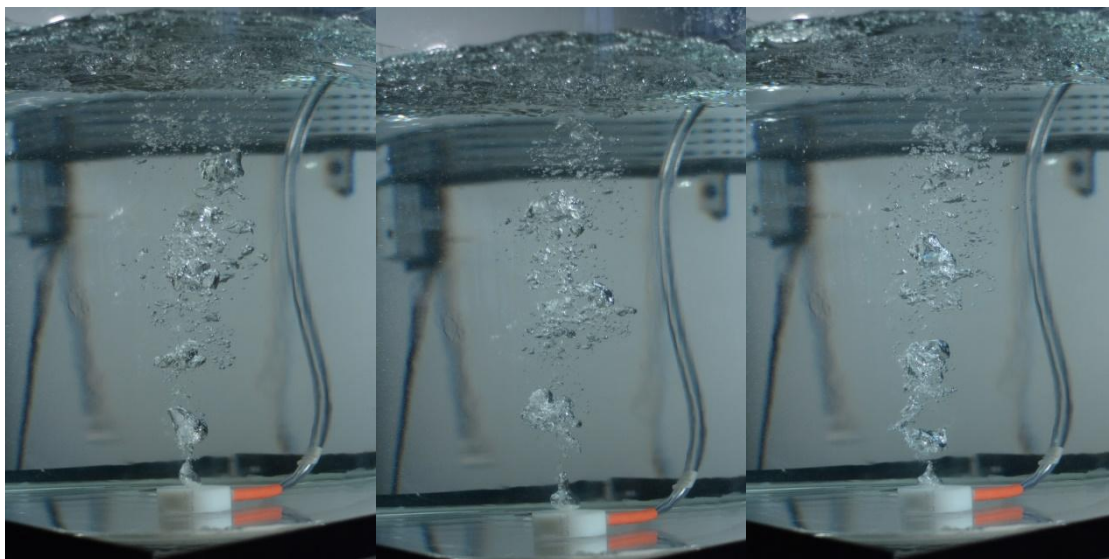


Figura 5.22: Fotografias do modelo físico da panela de aciaria durante ensaio com vazão de 15l/min

Nestas condições o diâmetro médio encontrado para as bolhas, por modelagem física foi de 11,6 milímetros e a variância foi de 2,0 milímetros. A sobreposição dos histogramas de distribuição de tamanho de bolhas obtidos por modelagem física e matemática para a vazão de 15 litros por minuto é mostrada na figura 5.24.

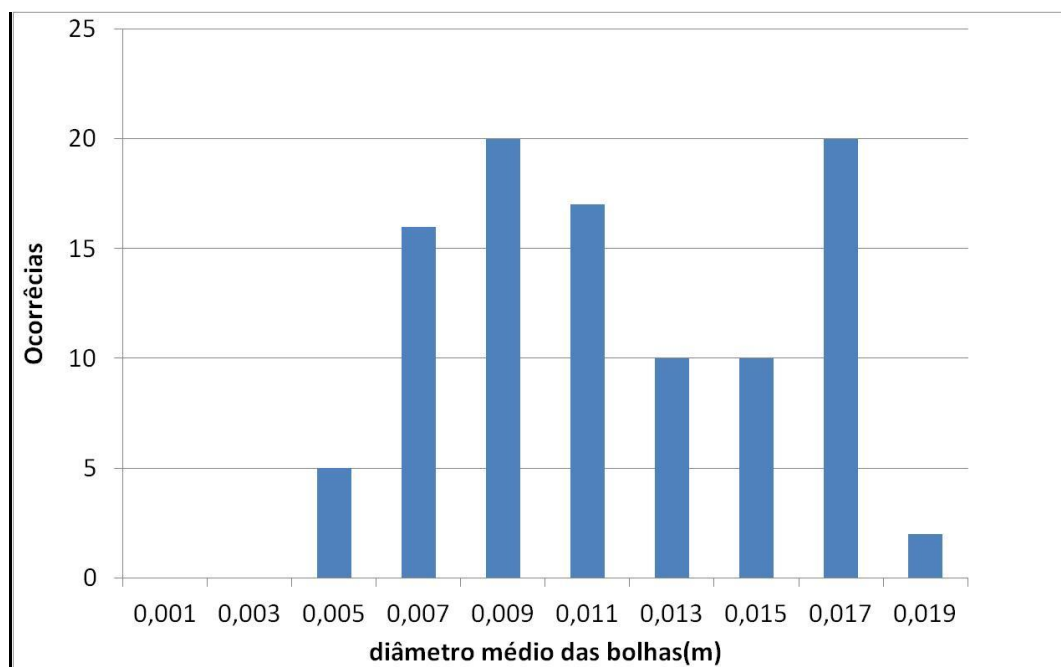


Figura 5.23: Histograma do tamanho de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 15l/min utilizando modelagem física

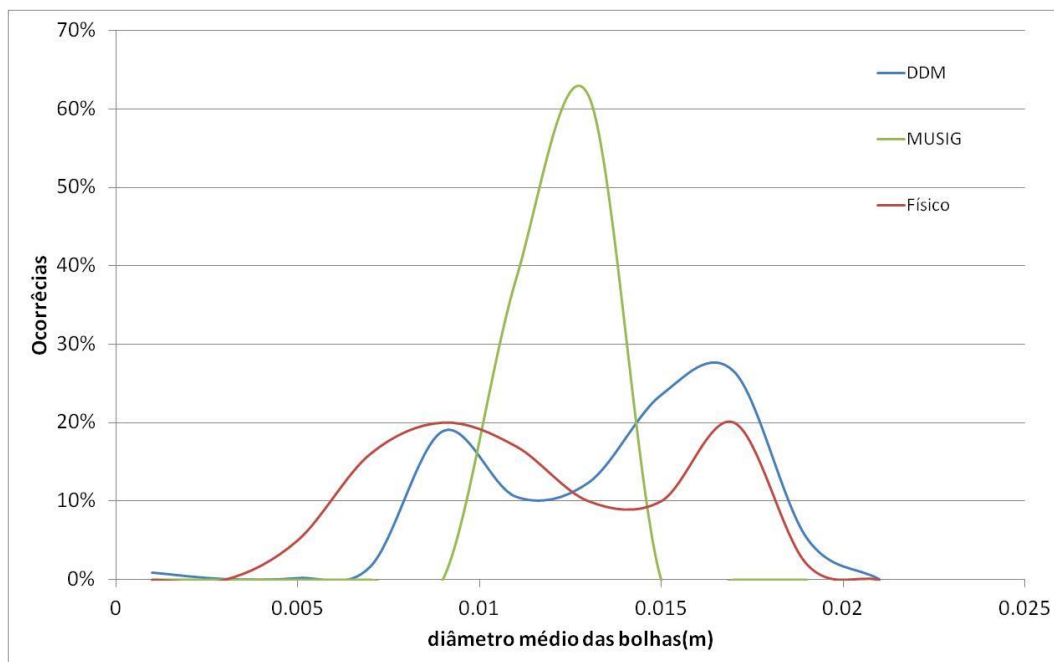


Figura 5.24: Histogramas da distribuição dos tamanhos de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 15l/min por modelagem física e matemática.

Finalmente são apresentadas na figura 5.25 as fotografias selecionadas para a avaliação do comportamento das bolhas para a vazão de 20,0 litros por minuto.

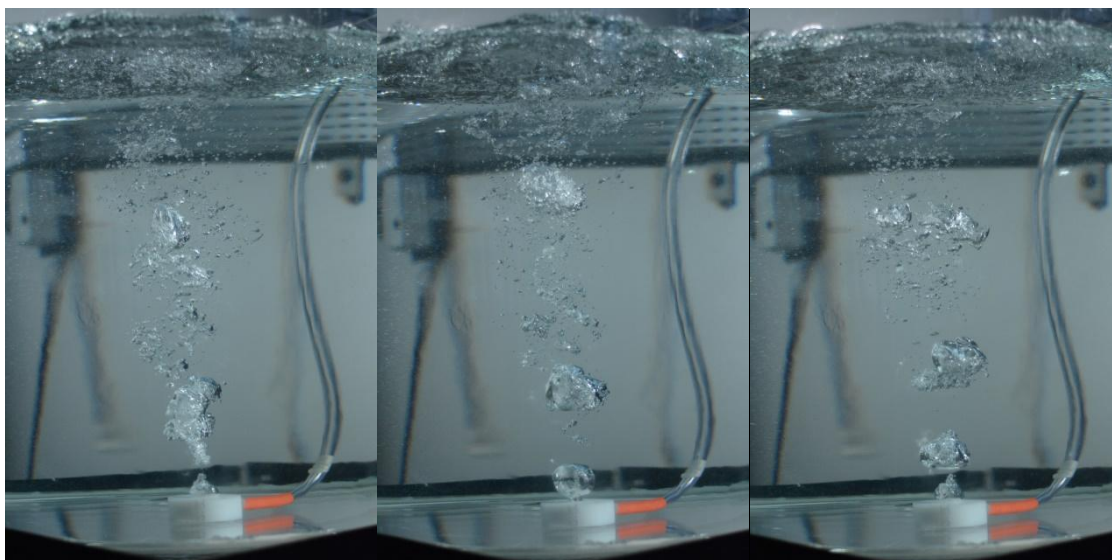


Figura 5.25: Fotografias do modelo físico da panela de aciaria durante ensaio com vazão de 20l/min

A análise destas imagens utilizando o software AutoCAD permitiu a construção do histograma de distribuição do tamanho de bolhas na panela de aciaria para a vazão de 20 litros por minuto. Este histograma é mostrado na figura 5.26.

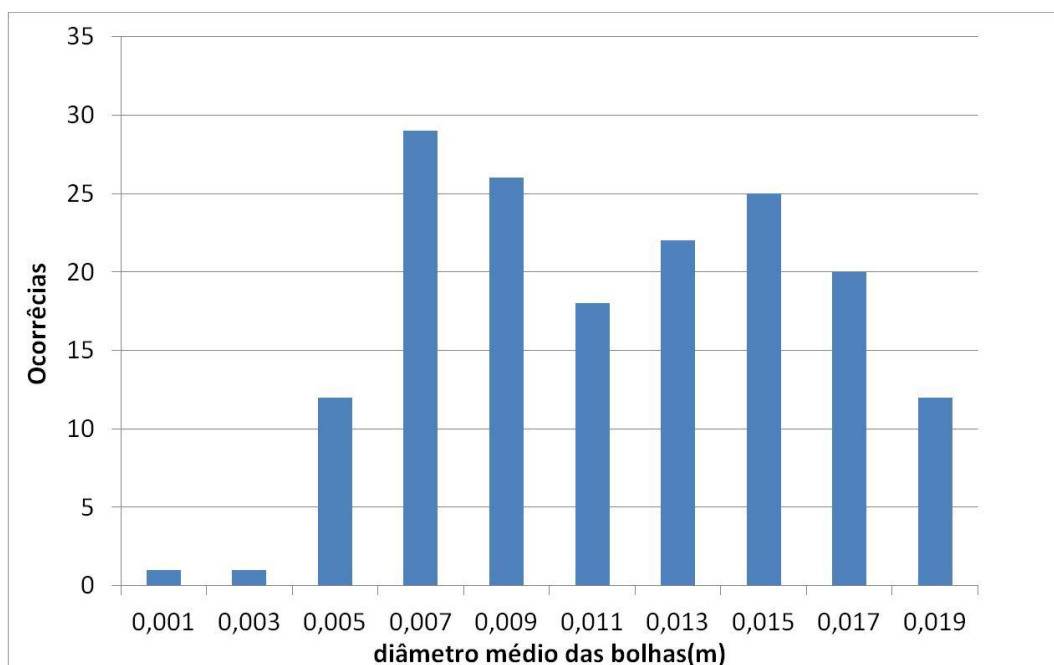


Figura 5.26: Histograma do tamanho de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 20l/min utilizando modelagem física

Este histograma apresentou um valor médio de diâmetro de bolha de 11,6 milímetros, com uma variância de 2,1 milímetros. A figura 5.27, mostra os histogramas de perfil de comportamento de bolhas sobrepostos para as simulações física e matemática.

A média e variância de cada um dos modelos, para cada uma das vazões estudadas (5, 10, 15 e 20 litros por minuto) são apresentadas na tabela V.2. Os valores contidos nesta tabela confirmam a análise realizada por meio dos histogramas, pois o tamanho médio das bolhas é aproximadamente o mesmo para todos os modelos, seja físico ou matemático, para cada uma das vazões avaliadas, mas a variância dos diâmetros para o modelo de quebra e coalescência DDM se aproximam mais dos resultados obtidos por modelagem física do que aqueles obtidos utilizando o modelo de quebra e coalescência MUSIG.

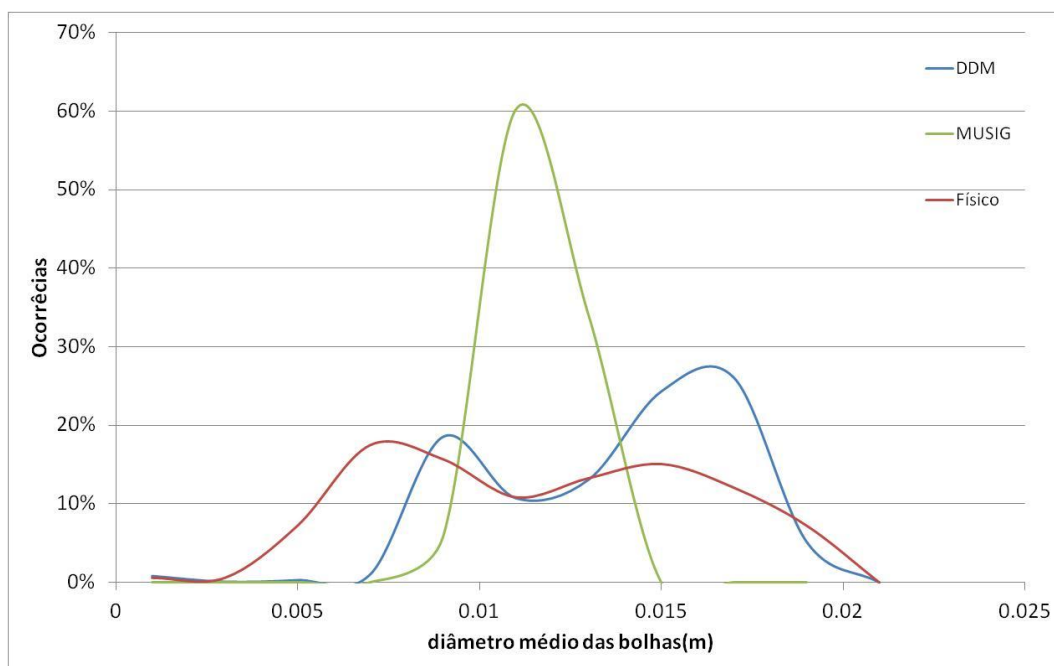


Figura 5.27: Histogramas da distribuição dos tamanhos de bolhas na panela de aciaria, obtido para uma vazão de 20l/min por modelagem física e matemática.

Tabela V.2: Grandezas estatísticas dos modelos estudados

Vazão (l/min)	Modelo	Tamanho médio da bolha (mm)	Variância do tamanho da bolha (mm)
5,0	MUSIG	13,7	1,5
	DDM	14,3	1,9
	Físico	12,6	2,1
10,0	MUSIG	12,8	0,8
	DDM	13,5	1,9
	Físico	13,0	2,0
15,0	MUSIG	12,2	1,0
	DDM	13,7	1,8
	Físico	11,6	2,0
20,0	MUSIG	11,6	1,1
	DDM	13,7	1,9
	Físico	11,6	2,1

A análise de todos estes resultados demonstra claramente que o modelo matemático de quebra e coalescência DDM é superior ao MUSIG para descrever a distribuição do tamanho das bolhas.

Foi realizada ainda uma análise dos vetores de velocidade das bolhas, tanto por modelagem física quanto por modelagem matemática, utilizando os modelos de quebra e coalescência MUSIG e DDM, utilizando uma vazão de injeção de gás de 20 litros por minuto. Para a

construção dos vetores de velocidade na modelagem matemática bastou o uso da função vetor, usando como variável a velocidade do gás. Para a construção dos vetores de velocidade usando modelagem física, foram utilizadas imagens quadro a quadro de uma filmagem do modelo físico em operação. A variação de tempo adotada na captura das imagens foi de 0,5 segundo. Cada uma das bolhas foi marcada e os vetores foram construídos com base na distância percorrida no decorrer deste tempo. A figura 5.28 mostra os vetores de velocidade obtidos por modelagem matemática utilizando os modelos de quebra e coalescência de bolhas MUSIG (a), DDM (b) e por modelagem física (c). Não foi possível perceber diferença significativa para os vetores obtidos pelos diferentes métodos.

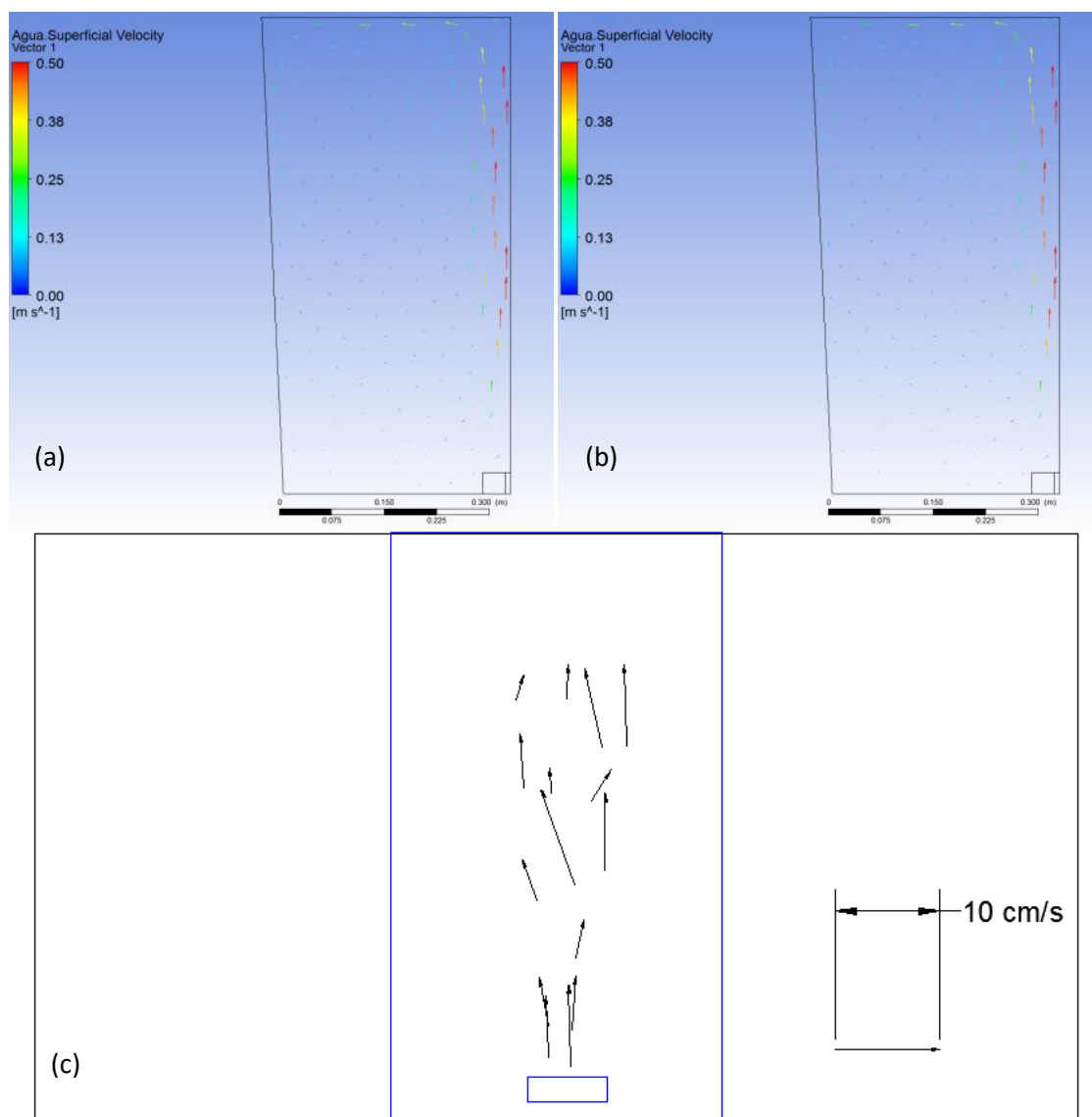


Figura 5.28: Vetores de velocidade das bolhas

Mazumdar e Guthrie (1995, p.3) explica que, em uma panela de aciaria, durante a subida das bolhas, a região bifásica água-ar pode ser dividida em quatro regiões distintas, mostradas esquematicamente na figura 5.29. Os modelos matemáticos adotados simulam o reator como a região 3 (coluna de bolhas), mas não simulam bem as regiões 1, 2 e 4, ocasionando uma diferença muito significativa entre os modelos físico e matemático. Com a alteração do coeficiente da força de arraste é possível que a modelagem matemática represente melhor os resultados obtidos com a modelagem física, mas a informação mais útil no momento é de que os dois modelos matemáticos se comportam de forma semelhante no que diz respeito à trajetória das bolhas formadas.

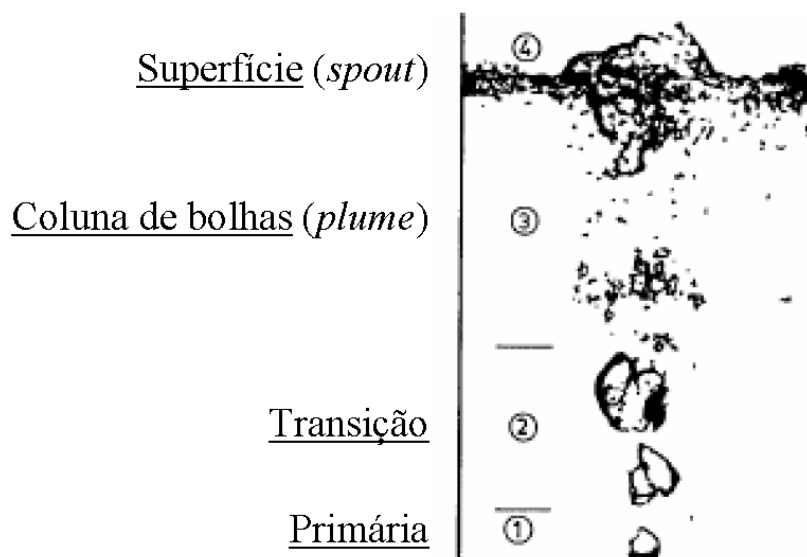


Figura 5.29: Distribuição de bolhas (Sicorski, 2006)

## 5.2 Desgaseificador a vácuo RH

Assim como na modelagem da panela de aciaria, foram realizadas simulações com o objetivo de verificar a distribuição dos tamanhos das bolhas no desgaseificador a vácuo RH. A figura 5.30 mostra os mapas de contorno do perfil dos diâmetros das bolhas no desgaseificador a vácuo RH, enquanto a figura 5.31 mostra os mapas de perfil da fração de volume do gás para o mesmo reator. Ambas as figuras representam o reator com uma vazão de injeção de gás de 100 litros por minuto.

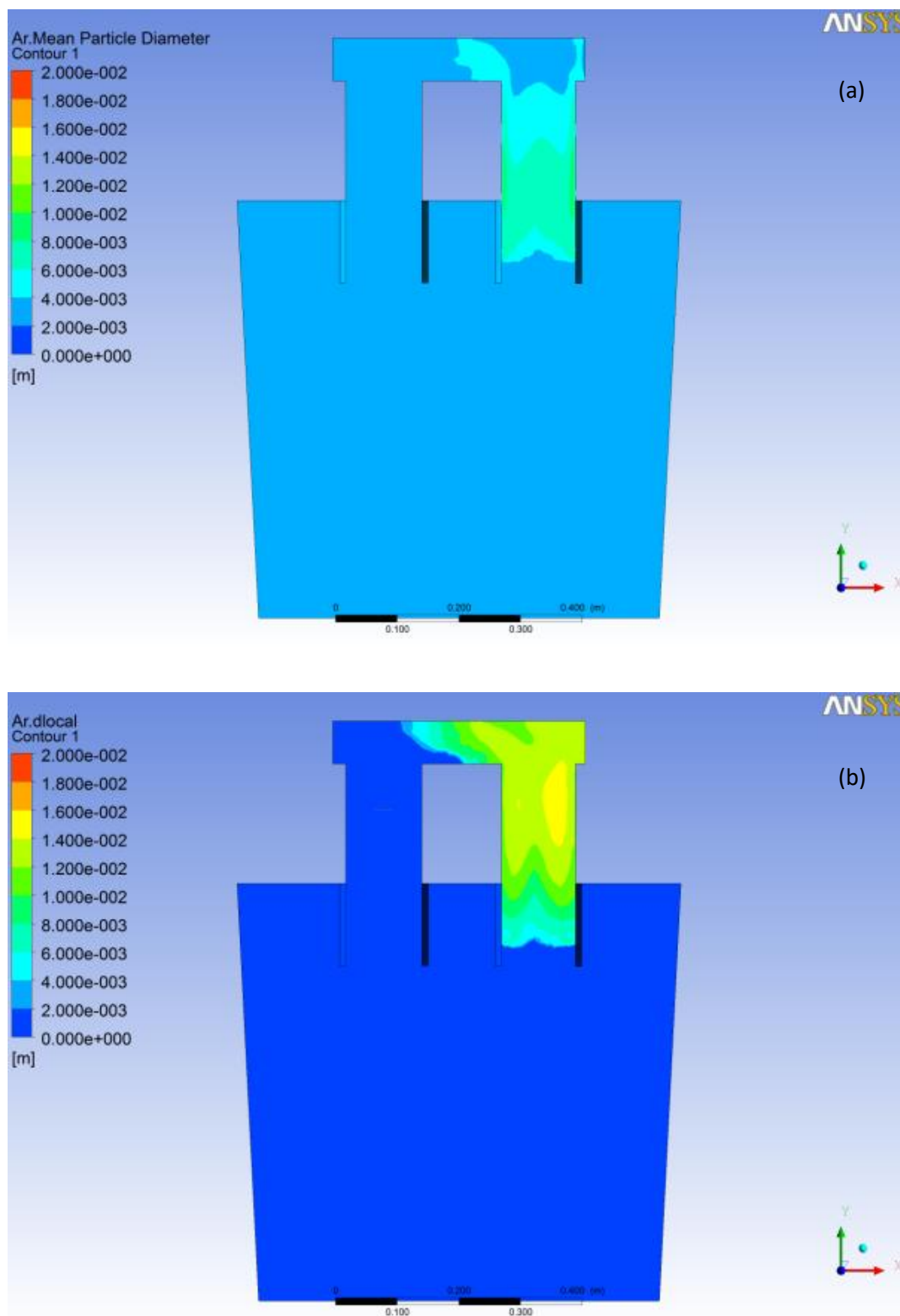


Figura 5.30: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas no desgaseificador a vácuo RH, para uma vazão de 100l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

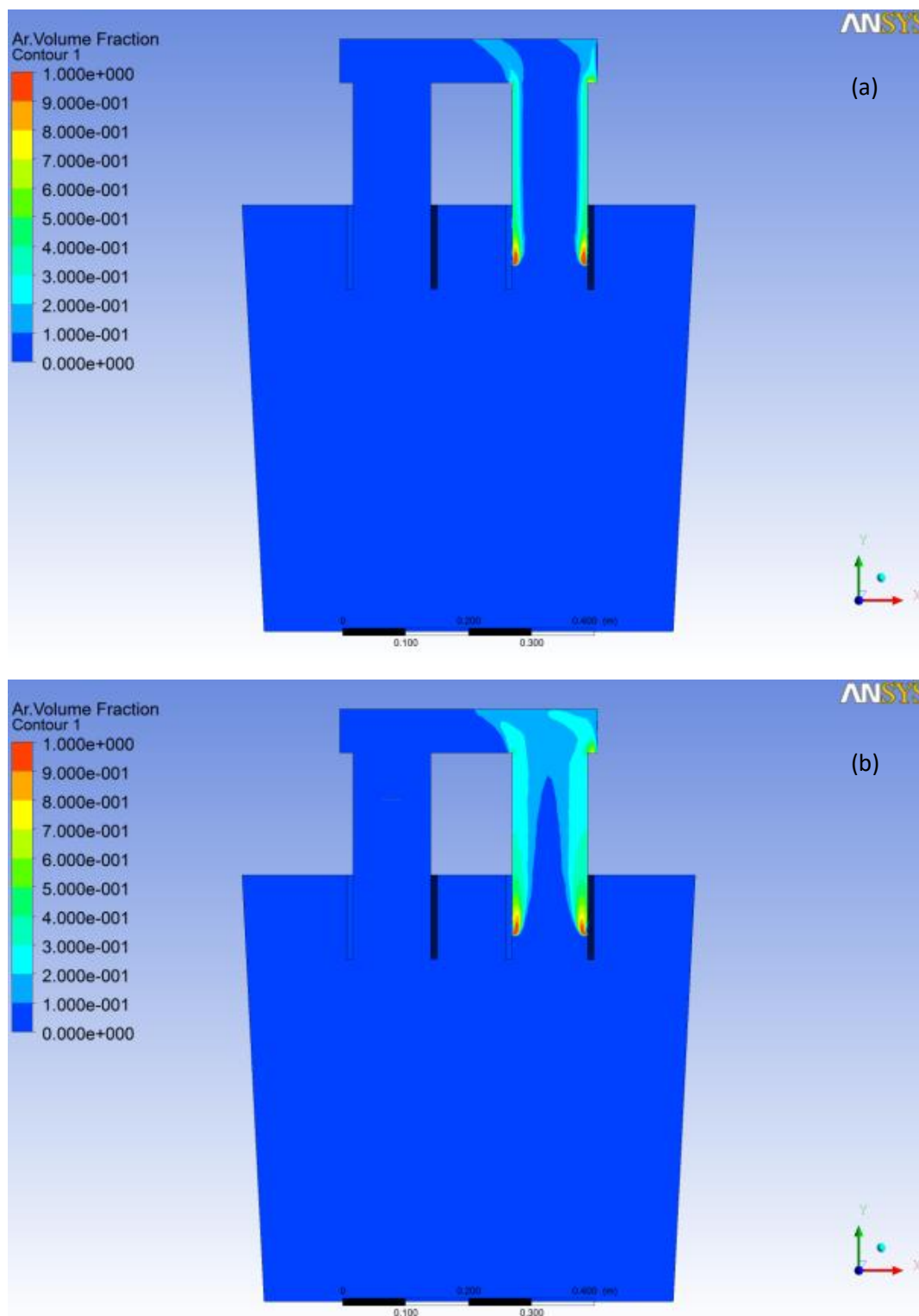


Figura 5.31: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás no desgaseificar a vácuo RH, para uma vazão de 100l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

Para esta vazão, os modelos matemáticos apresentaram o mesmo tipo de variação entre a variância dos resultados. Além disso, neste caso, houve também diferença significativa nos perfis de distribuição de fração de volume de gás no reator.

Usando novamente a mesma metodologia utilizada para a panela de aciaria, foram construídos histogramas de distribuição dos tamanhos das bolhas no reator para ambos os modelos de quebra e coalescência de bolhas, conforme mostrado na figura 5.32.

Os histogramas confirmam a análise qualitativa nos perfis de distribuição do tamanho das bolhas, mostrando que a variância obtida para o uso do DDM é maior que aquela obtida pelo MUSIG. Além disso, é possível perceber que o tamanho médio das bolhas previsto pelo MUSIG é menor do que aquele previsto pelo modelo DDM.

Também foram construídos perfis de distribuição de tamanho de bolhas, de fração volumétrica de gás e histogramas de distribuição de tamanho de bolhas para injeção de gás no desgaseificador a vácuo para vazões de 200, 300, 400 e 500 litros por minuto.

A figura 5.33 mostra o perfil de distribuição de tamanho de bolhas no reator para uma vazão de 200 litros por minuto, enquanto a figura 5.34 mostra o perfil de fração volumétrica de gás para esta mesma vazão. Os tamanhos de bolhas previstos seguem a tendência de apresentar maior variância para o modelo DDM, mas a diferença entre os perfis de fração volumétrica de gás diminuiu.

Com as informações contidas nestes modelos foram construídos ainda os histogramas de distribuição de tamanho de bolhas no desgaseificador quando a vazão de injeção de gás é de 200 litros por minuto, mostrado na figura 5.35.

Mais uma vez é possível notar que a variância obtida pelo modelo de quebra e coalescência DDM é maior. Além disso, o diâmetro médio das bolhas obtido nas simulações utilizando este modelo, para este reator, é maior.

A figura 5.36 mostra o perfil de distribuição de bolhas no RH quando a injeção de gases é feita com uma vazão de 300 litros por minuto, repetindo a tendência de uma maior dispersão no tamanho calculado das bolhas no interior do reator. A figura 5.37 mostra os perfis de fração volumétrica do gás no reator. A diferença entre os dois modelos de quebra e coalescência para

este caso permanece pequena, pelo menos no que diz respeito à análise qualitativa observando os mapas de contorno.

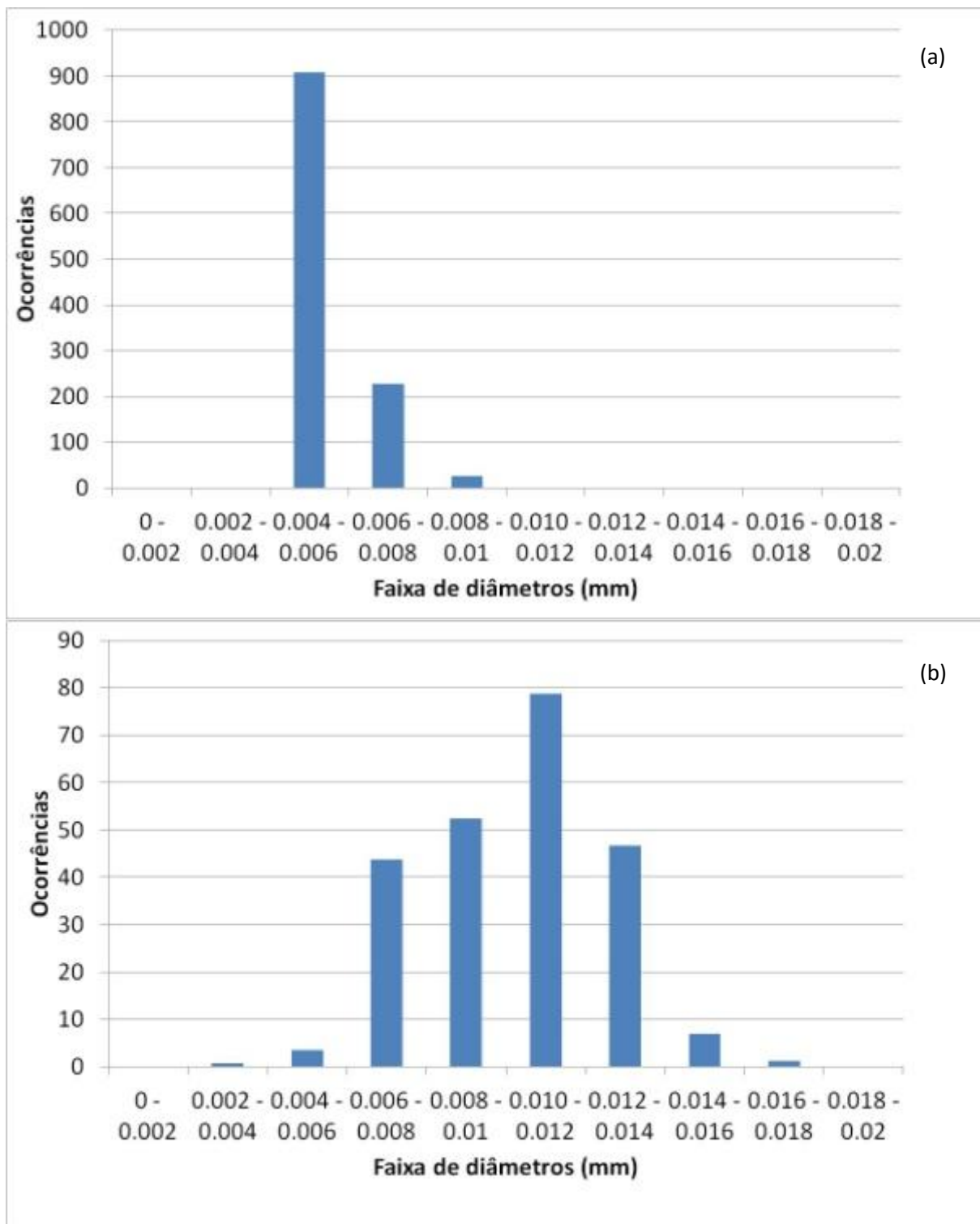


Figura 5.32: Histograma do tamanho de bolhas no desgaseificador a vácuo para vazão de 100 l/min MUSIG e DDM

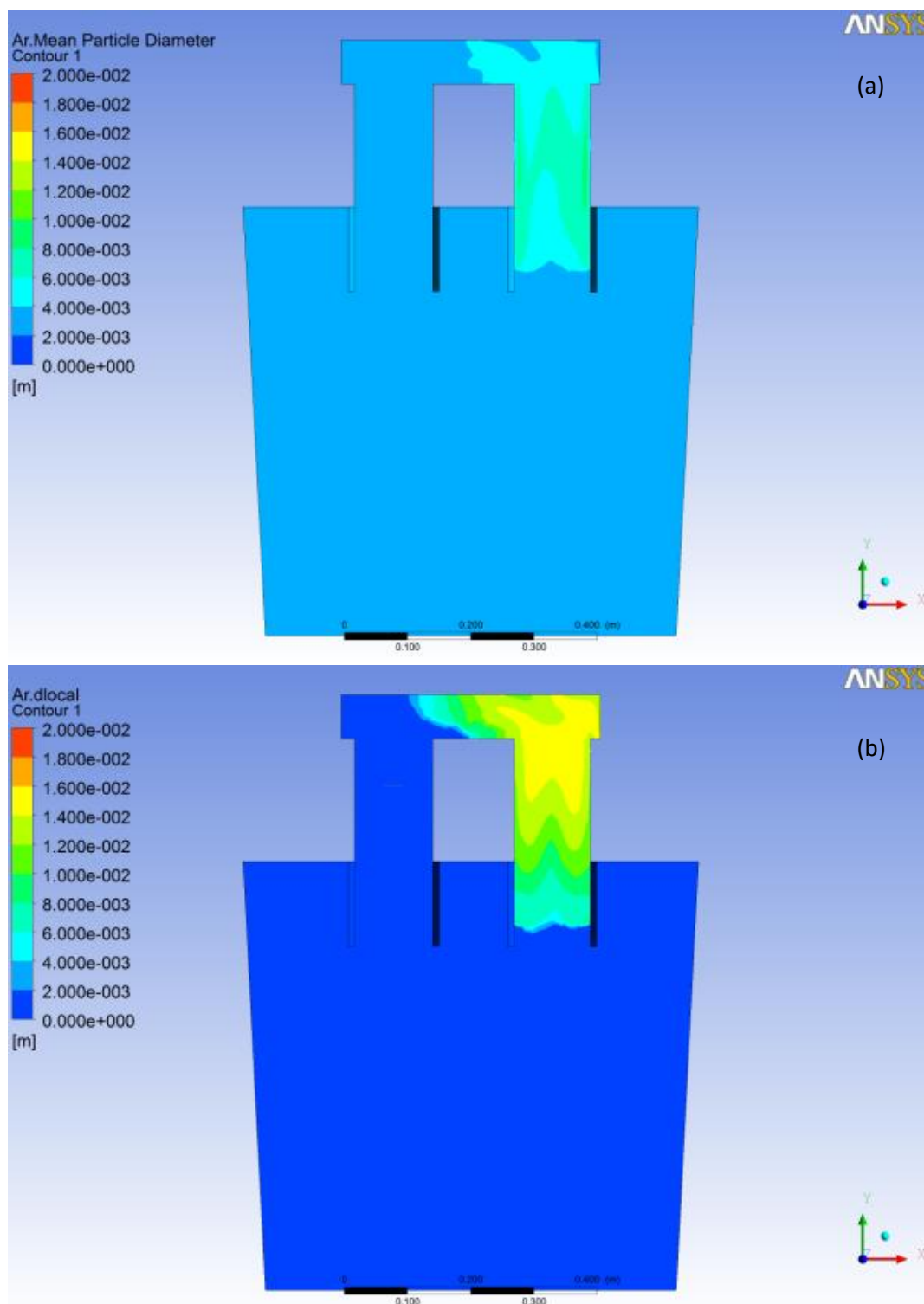


Figura 5.33: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas no desgaseificador a vácuo RH, para uma vazão de 200l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

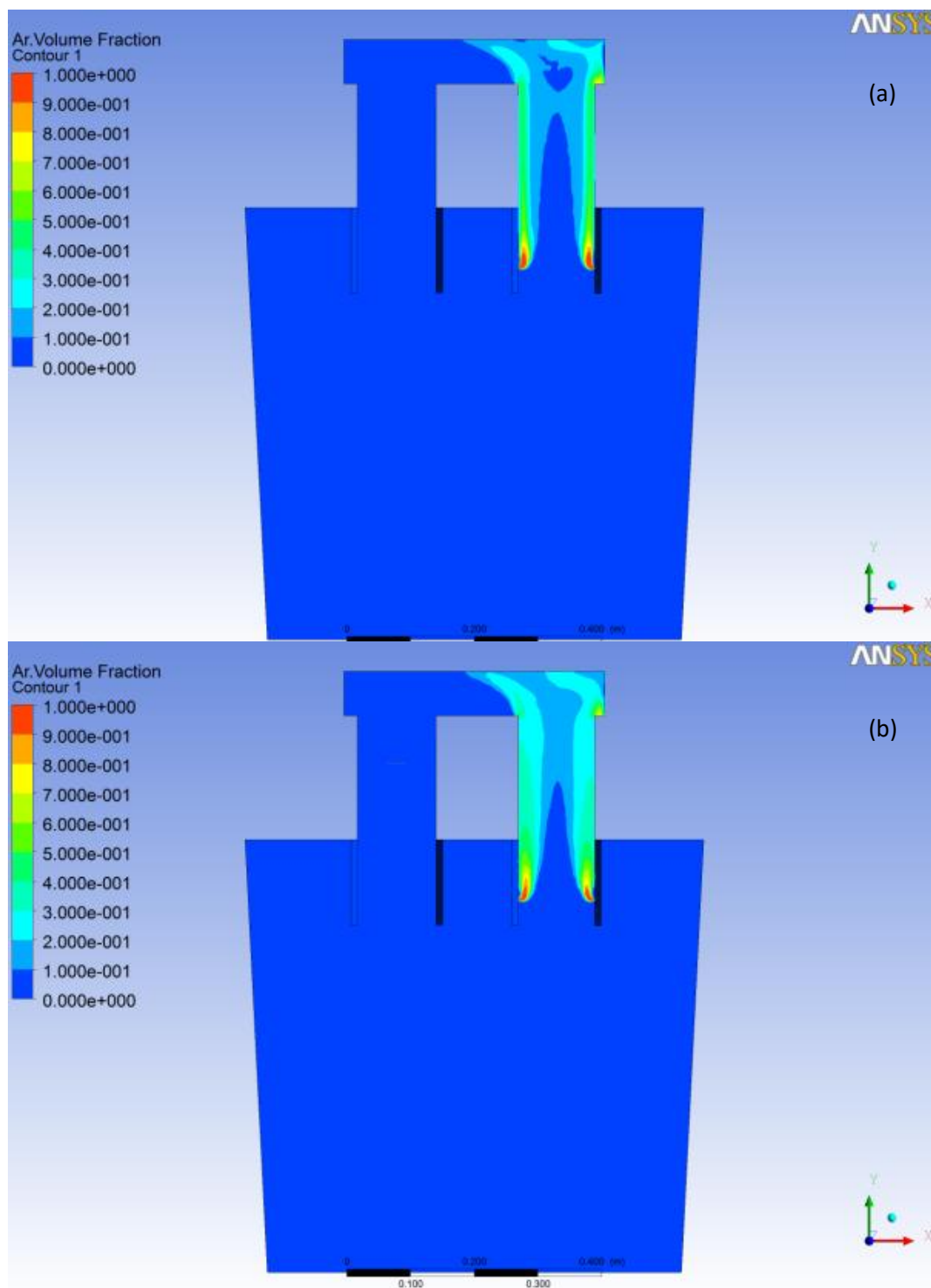


Figura 5.34: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás no desgaseificar a vácuo RH, para uma vazão de 200l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

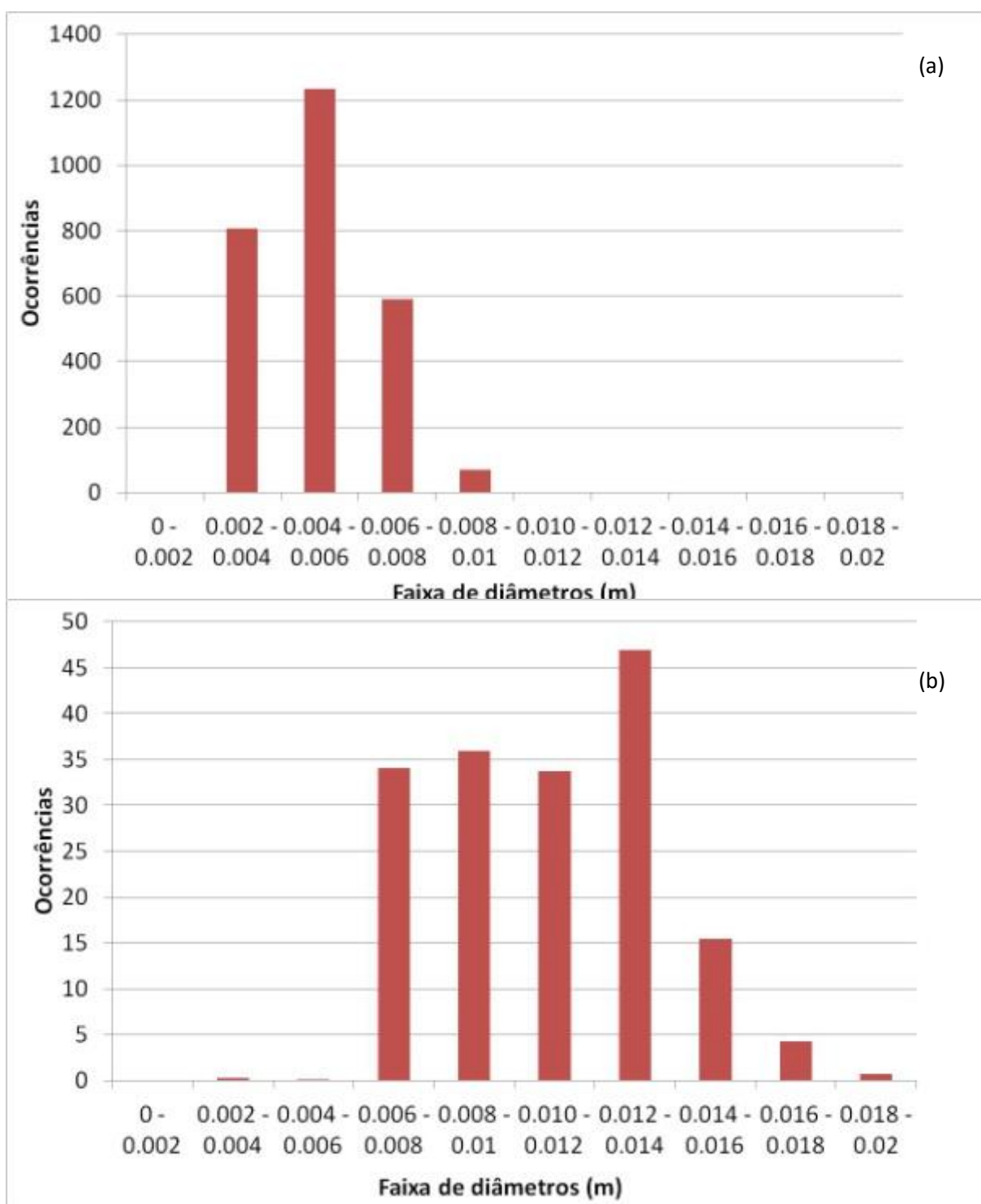


Figura 5.35: Histograma do tamanho de bolhas no desgaseificador a vácuo para vazão de 200 l/min MUSIG e DDM

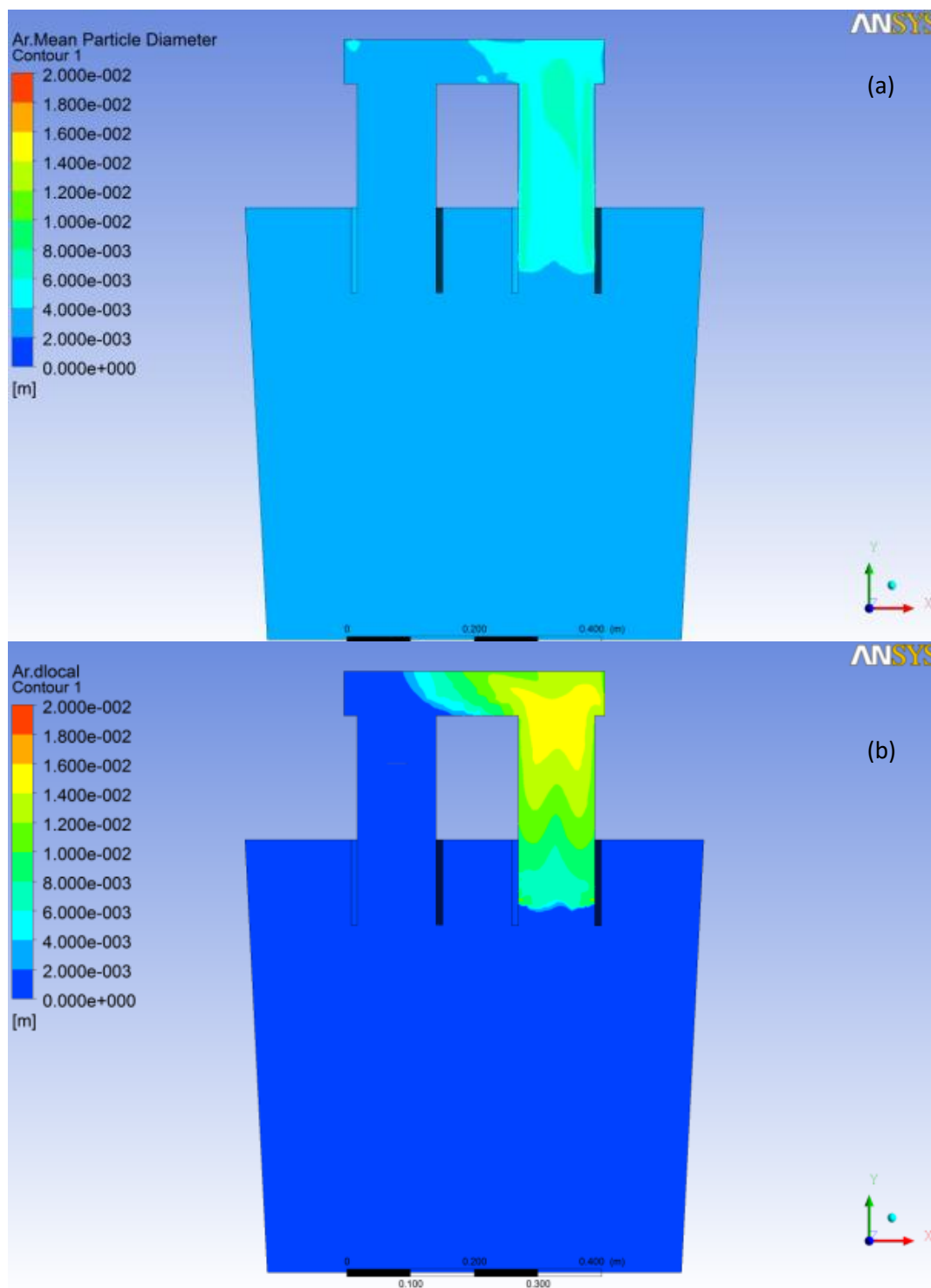


Figura 5.36: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas no desgaseificador a vácuo RH, para uma vazão de 300l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

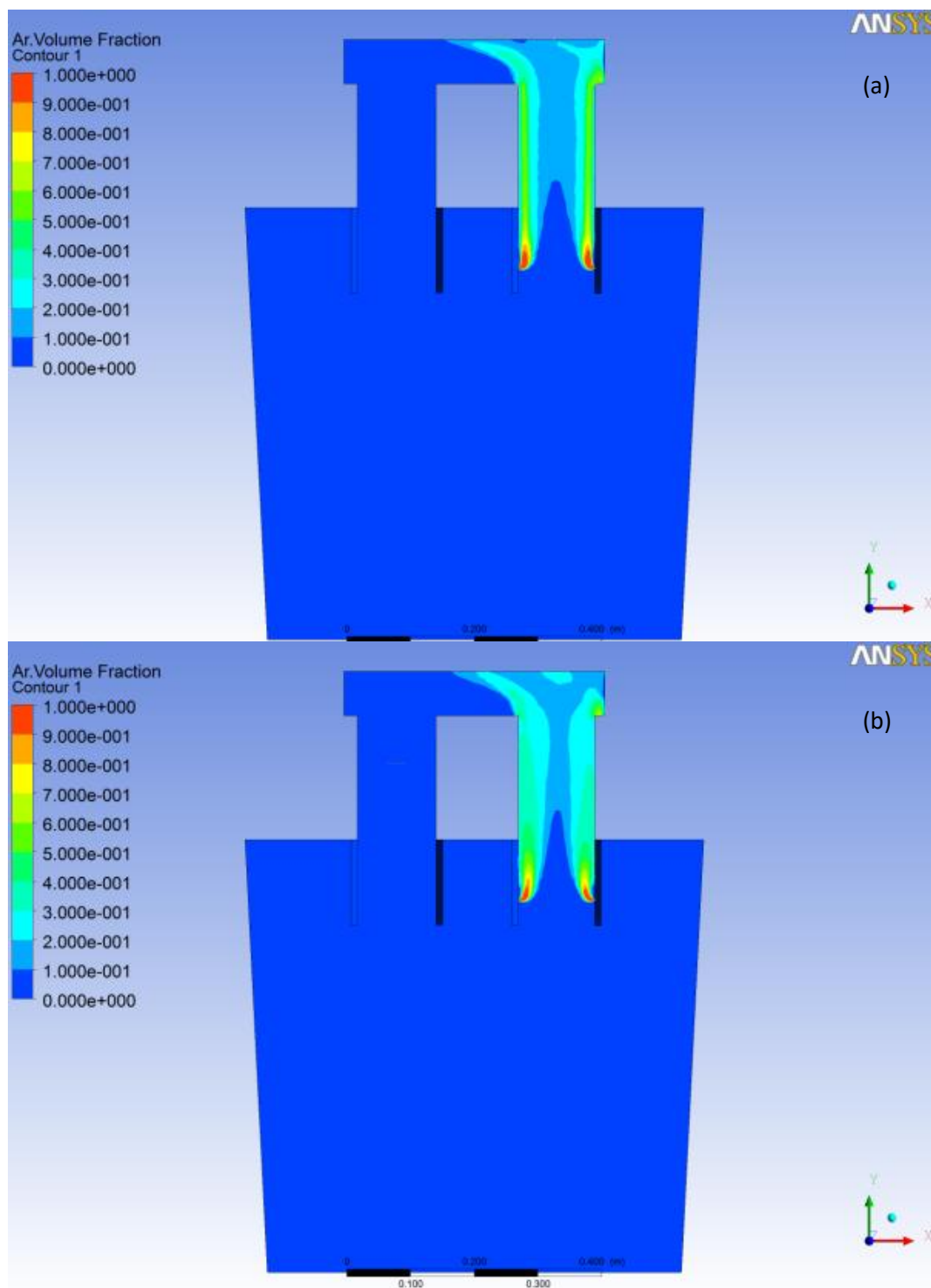


Figura 5.37: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás no desgaseificar a vácuo RH, para uma vazão de 300l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

O histograma de distribuição do tamanho das bolhas obtido para a vazão de 300 litros por minuto, mostrado na figura 5.38 volta a mostrar uma dispersão menor dos diâmetros de bolha

obtidos pela simulação utilizando o modelo MUSIG, assim como um diâmetro médio de bolha menor.

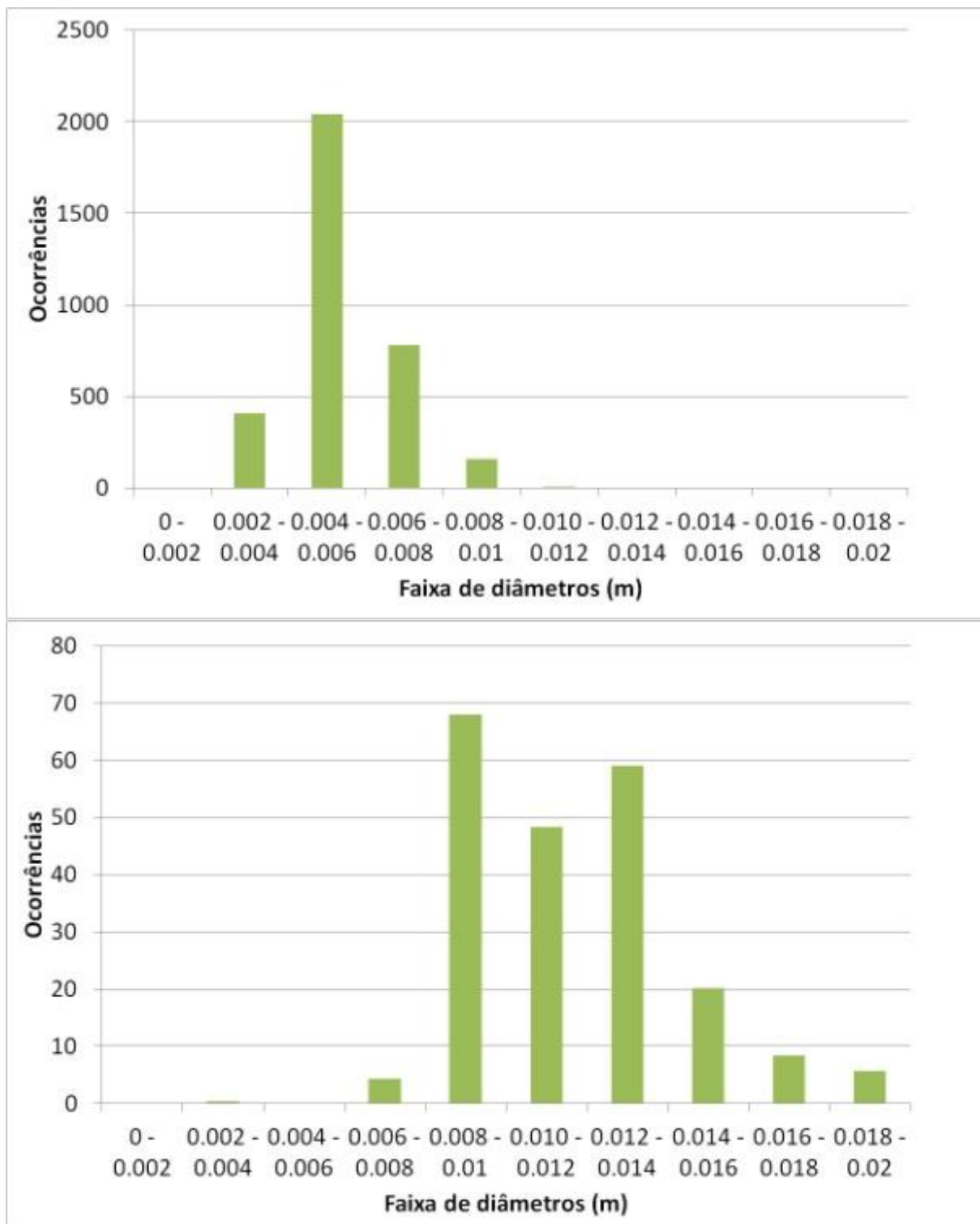


Figura 5.38: Histograma do tamanho de bolhas no desgaseificador a vácuo para vazão de 300 l/min MUSIG e DDM

Para injeção de gás no desgaseificador, com vazão de 400 litros por minuto, a figura 5.39 apresenta o perfil de distribuição de bolhas no desgaseificador em simulações utilizando os dois modelos de quebra e coalescência. Neste caso é interessante notar que, quando comparada com a figura 5.40, onde é mostrada a fração volumétrica do gás, os modelos preveem os tamanhos de bolhas mesmo em regiões onde não existe gás. Desta forma, estes perfis devem ser avaliados cuidadosamente. Ainda assim é claro que, novamente o modelo de quebra e coalescência MUSIG considera uma menor variação do tamanho das bolhas no reator, enquanto o perfil de fração volumétrica de gás apresenta resultados semelhantes para ambos os modelos.

Uma visão mais clara pode ser obtida por meio da observação dos histogramas de distribuição de tamanho das bolhas mostrado na figura 5.41.

A variância do diâmetro das bolhas, como nos casos anteriores, é menor para o modelo de quebra e coalescência MUSIG, que também prevê um diâmetro médio menor para as bolhas criadas.

Finalmente, são mostrados nas figuras 5.42 e 5.43 os perfis de distribuição de tamanho de bolhas e o perfil de fração de volume de gás no desgaseificador a vácuo, para uma vazão de injeção de gás de 500 litros por volume, utilizando os modelos de quebra e coalescência MUSIG e DDM, respectivamente.

Neste caso, a variância dos diâmetros permanece bem maior quando o modelo de quebra e coalescência DDM é utilizado, quando comparado ao MUSIG, assim como o diâmetro médio das bolhas, que é maior para o DDM. Além disso, para esta vazão, os modelos preveem que uma pequena quantidade de bolhas de pequeno diâmetro, será arrastada para a panela pela perna de descida. O histograma de distribuição de tamanho de bolhas, mostrado a seguir, na figura 5.44 reforça esta análise, exceto pela previsão do arraste das bolhas na perna de descida.

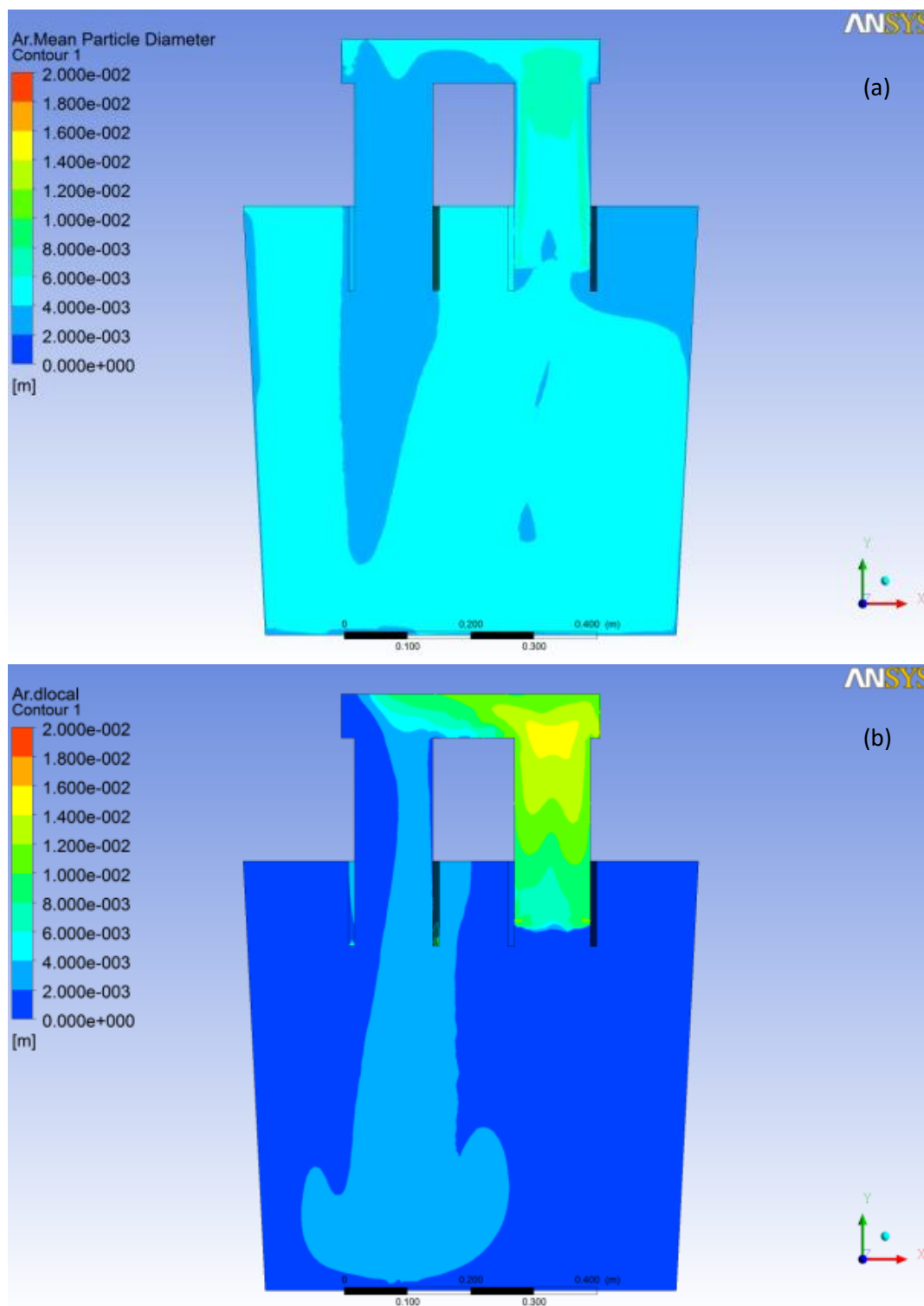


Figura 5.39: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas no degaseificador a vácuo RH, para uma vazão de 400l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

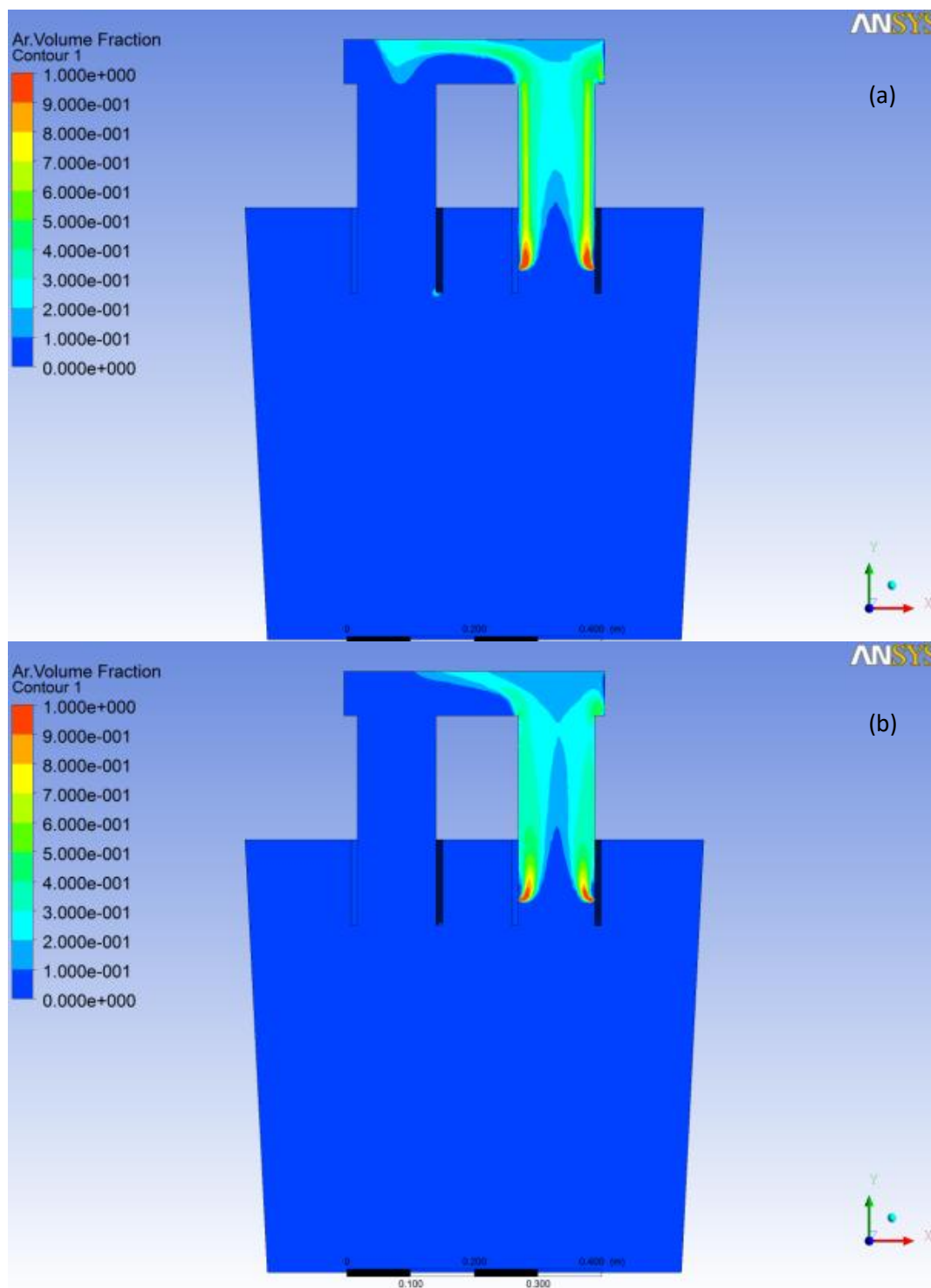


Figura 5.40: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás no desgaseificar a vácuo RH, para uma vazão de 400l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

(a)

(b)

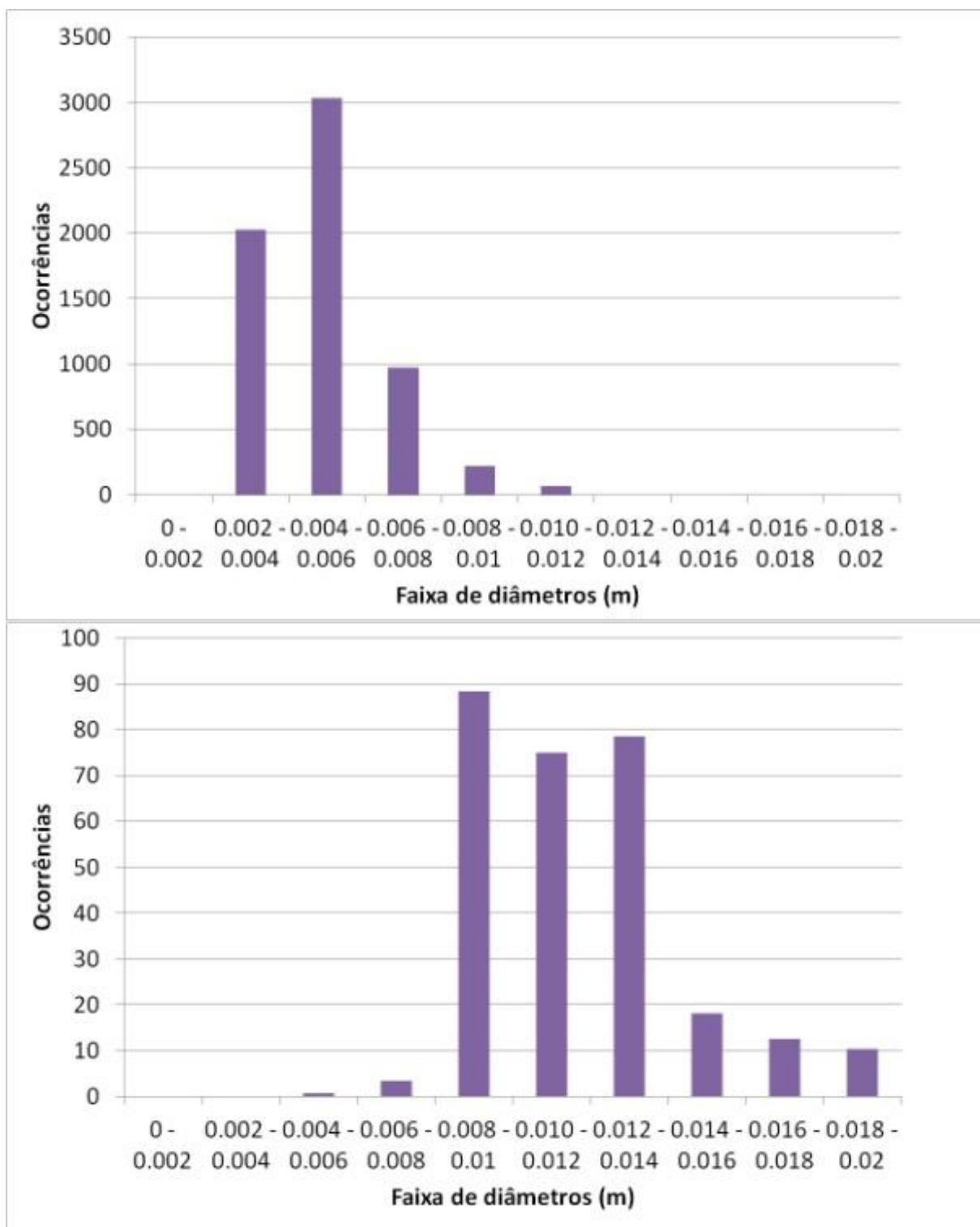


Figura 5.41: Histograma do tamanho de bolhas no desgaseificador a vácuo para vazão de 400 l/min MUSIG e DDM

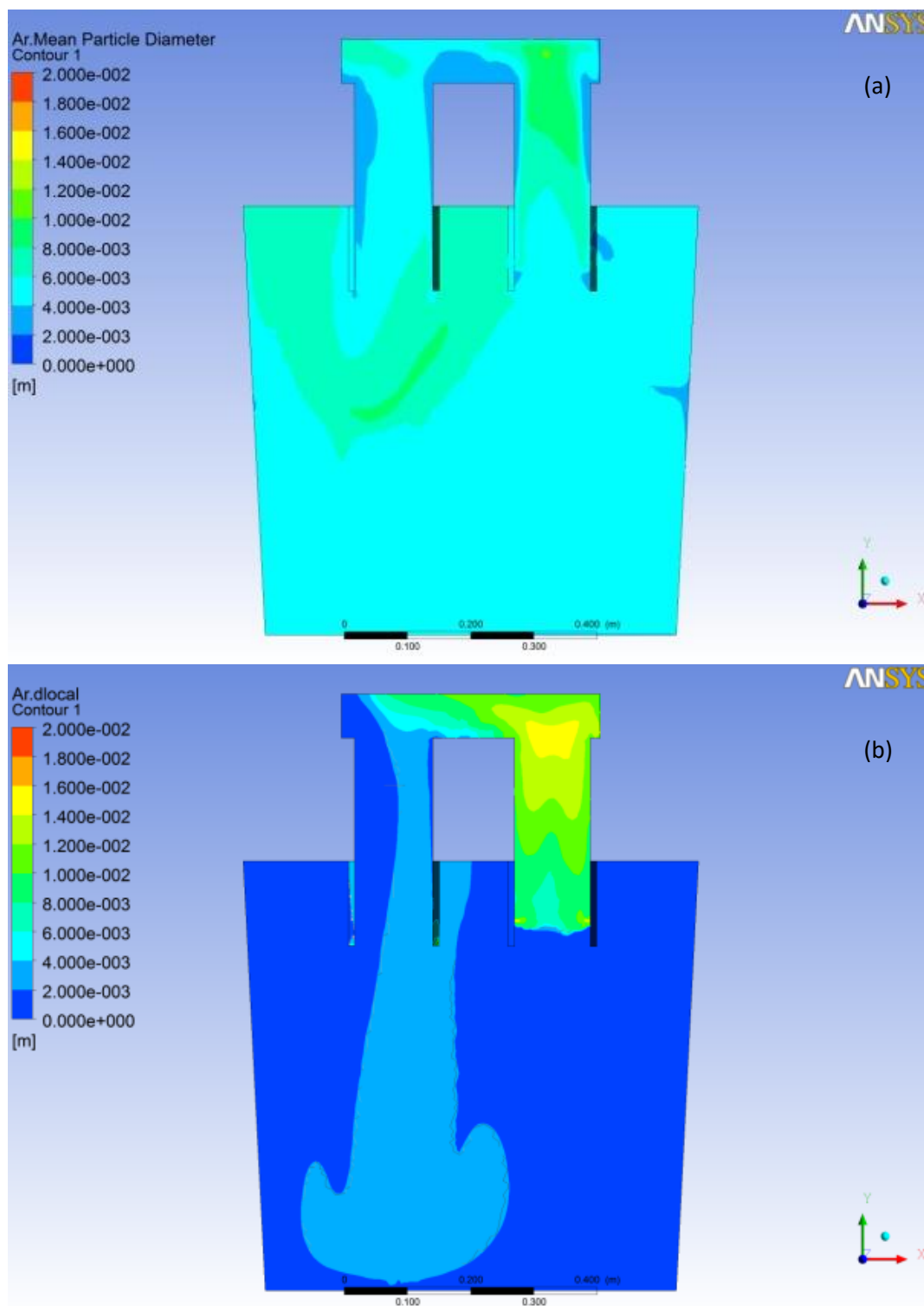


Figura 5.42: Mapas de contorno do perfil de diâmetros das bolhas no desgaseificador a vácuo RH, para uma vazão de 500l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

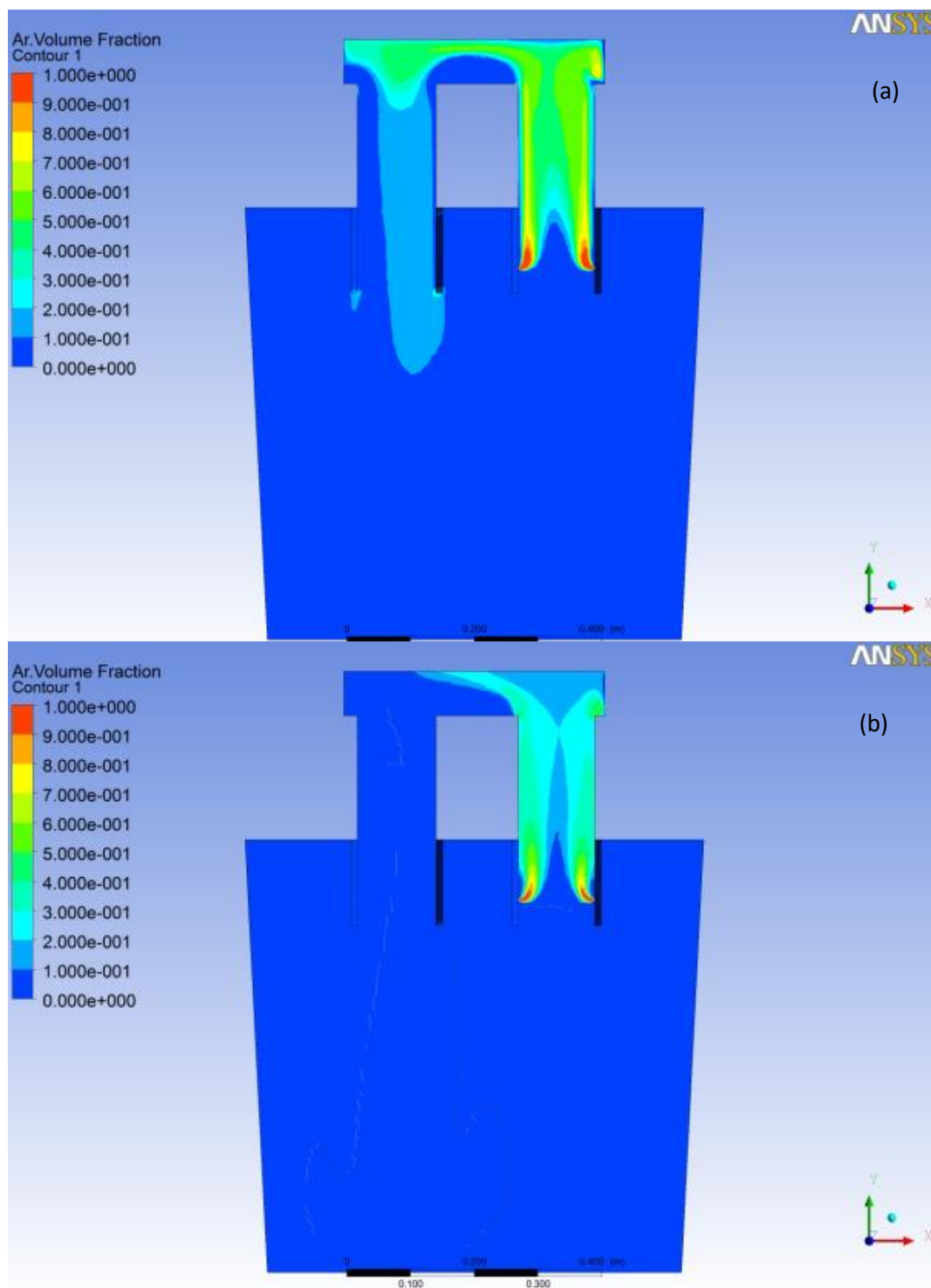


Figura 5.43: Mapas de contorno do perfil da fração de volume de gás no desgaseificar a vácuo RH, para uma vazão de 500l/min. a) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG; b) usando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM

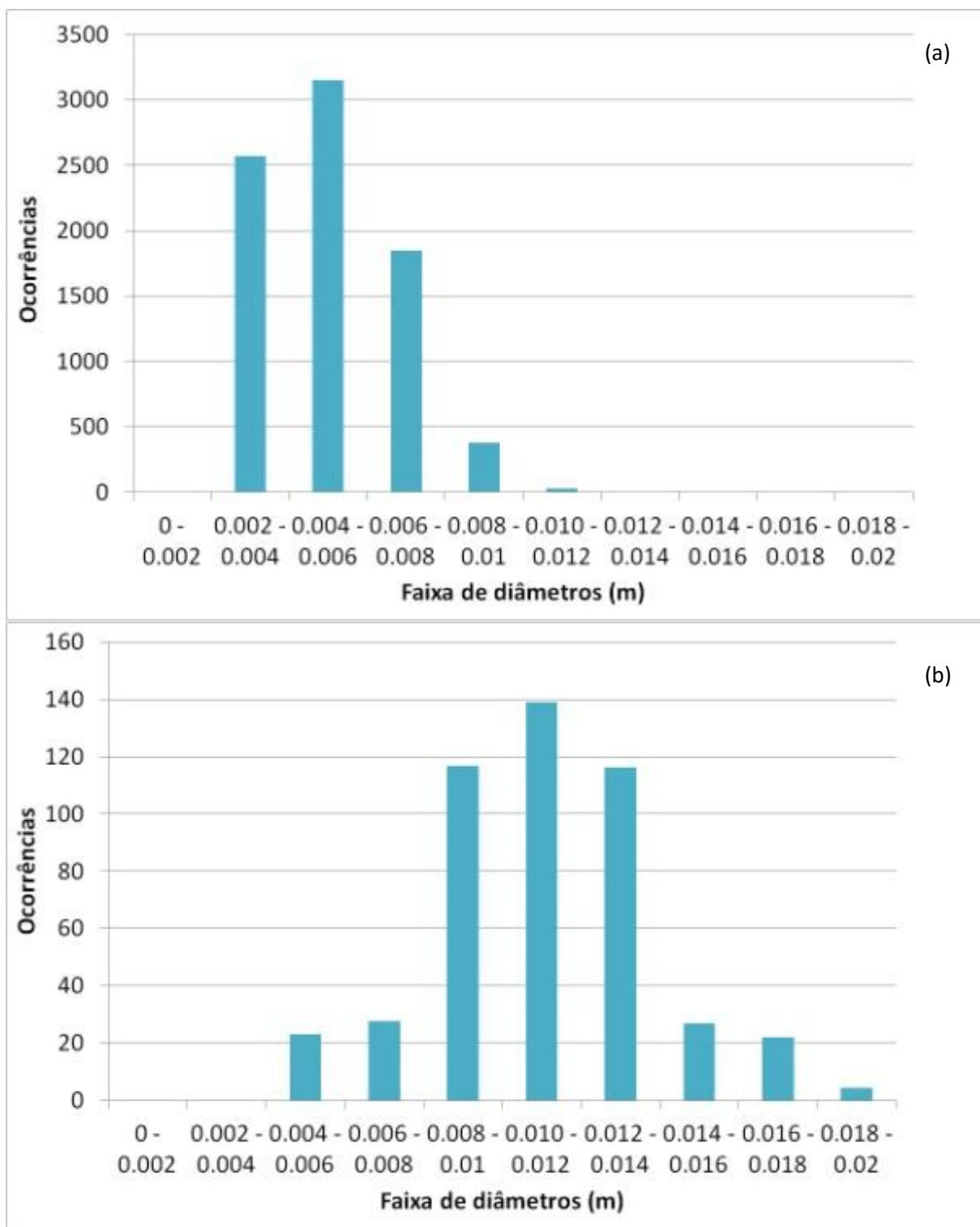


Figura 5.44: Histograma do tamanho de bolhas no desgaseificador a vácuo para vazão de 500 l/min MUSIG e DDM

Em função das altas vazões e grande quantidade de bolhas, além da própria geometria do reator, não foi possível a validação direta dos modelos de quebra e coalescência de bolhas

(MUSIG e DDM) com a modelagem física, como no caso da panela de aciaria. A princípio é razoável esperar que o modelo de quebra e coalescência DDM se aproxime mais da realidade do que o MUSIG, considerando os resultados obtidos pela modelagem da panela de aciaria, contudo, uma validação dos resultados é importante para a consolidação deste trabalho. Neste caso, adotou-se uma validação indireta, utilizando a taxa de circulação no reator como parâmetro de comparação. Existe no banco de dados do LaSiP uma grande quantidade de resultados de taxa de circulação para o modelo físico de um desgaseificador a vácuo RH com as mesmas características dos modelos matemáticos construídos. Utilizando estes dados, foi utilizada uma metodologia estatística para a validação dos resultados.

Em um primeiro momento foram calculadas as taxas de circulação em modelagem matemática para cada um dos modelos de quebra e coalescência estudados (MUSIG e DDM) e para uma condição adicional, onde as bolhas foram consideradas com tamanho fixo de 10mm de diâmetro, para vazões de 100, 200, 300, 400 e 500 litros por minuto e apresentadas gráficos na forma de curvas de taxa de circulação em função da vazão. Estes gráficos contam também com a faixa de intervalo de confiança (média  $\pm 2\sigma$ ), de resultados obtidos por modelagem física. As figuras 5.45, 5.46 e 5.47 mostram as curvas obtidas.

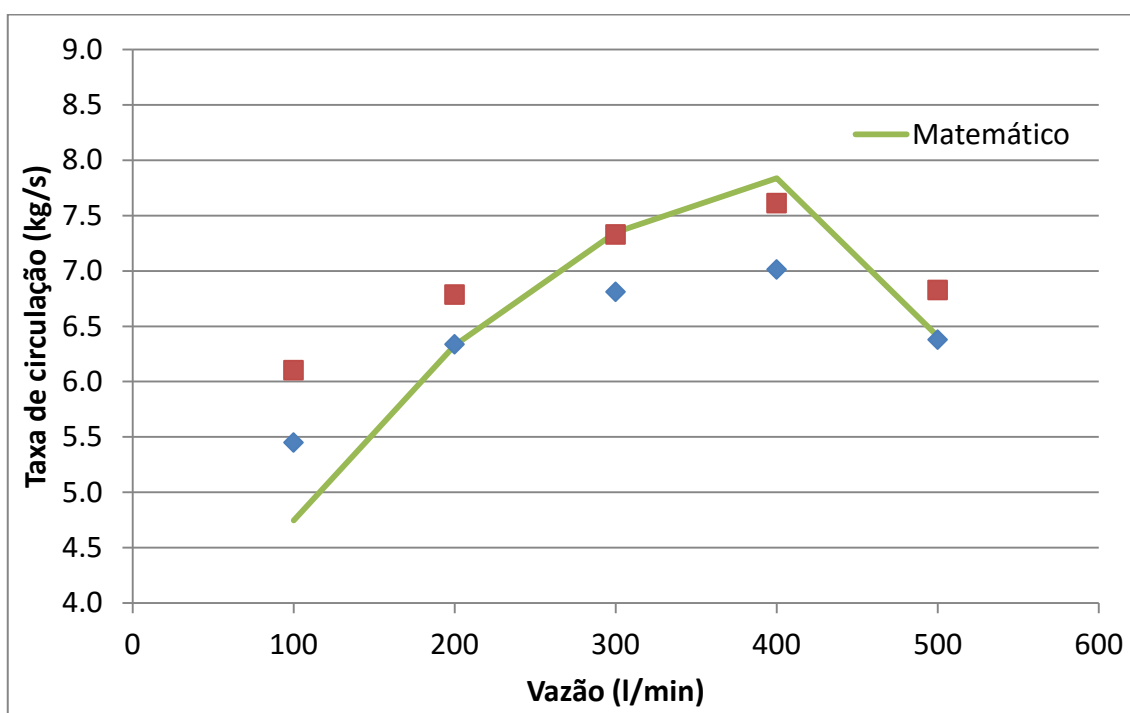


Figura 5.45: Taxa de circulação do aço em um desgaseificador a vácuo RH, considerando as bolhas injetadas com tamanho fixo de 10mm.

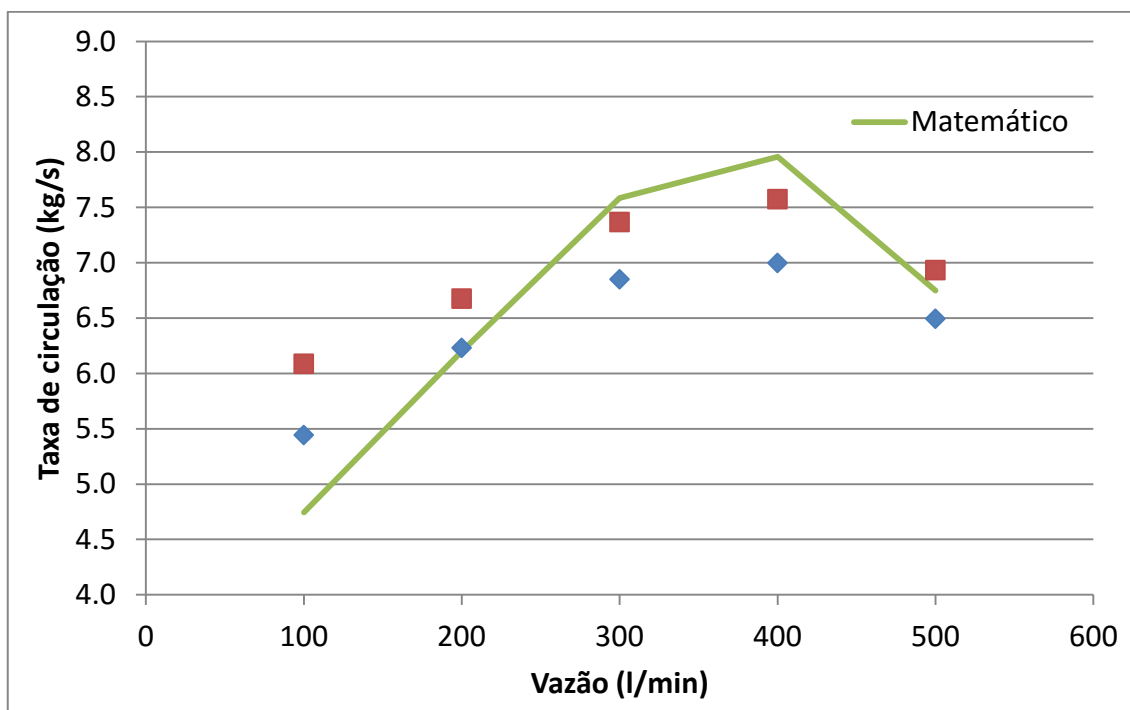


Figura 5.46: Taxa de circulação do aço em um desgaseificador a vácuo RH, considerando o modelo de quebra e coalescência de bolhas MUSIG.

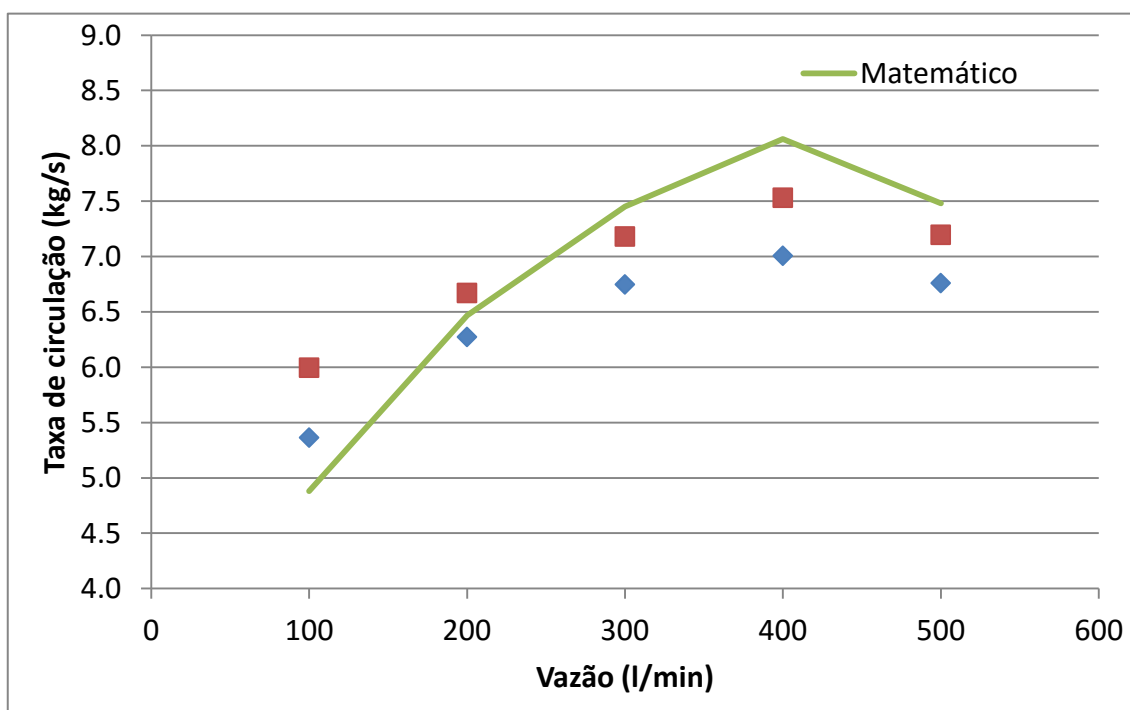


Figura 5.47: Taxa de circulação do aço em um desgaseificador a vácuo RH, considerando o modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM.

A análise das três figuras deixa claro que nenhum dos modelos matemáticos utilizados se ajusta perfeitamente aos resultados obtidos por modelagem física. É claro que os três casos apresentam uma mesma tendência, onde a taxa de circulação aumenta com o acréscimo da vazão até um certo limite, próximo aos 400 litros por minuto, quando passa a diminuir. Contudo, verificar qual modelo representa melhor a realidade exige uma análise mais profunda, realizada a seguir.

### 5.2.1 Análise estatística dos modelos matemáticos MUSIG e DDM

Passo 1: Nesta etapa é avaliado se o modelo matemático representa as tendências gerais do fenômeno estudado. Para tanto, são verificados os coeficientes angular ( $\hat{\beta}_1$ ) e linear ( $\hat{\beta}_0$ ) de uma regressão entre os modelos físico e matemático. Os valores obtidos são apresentados na tabela V.3.

Tabela V.3: Coeficientes lineares e angulares obtidas pela regressão dos modelos matemáticos estudados.

	Fixo (10mm)	MUSIG	DDM
$\hat{\beta}_0$	0.416	3.519	3.243
$\hat{\beta}_1$	0.497	0.473	0.499

Para todos os métodos avaliados, os valores obtidos para o coeficiente angular  $\hat{\beta}_1$  foram maiores que zero. A inclinação da curva foi verificada por um teste F unilateral. Os valores de  $F_0$  para o teste estatístico foram determinados e comparados com  $F_{\alpha,2,n-2}$ , usando um valor de 0,01 para  $\alpha$ . A variância estimada foi determinada e é apresentada na tabela V.4.

Tabela V.4: Valores de  $F_{(\alpha,2,n-2)}$ ,  $\sigma^2$  e  $F_0$  para as modelagens utilizando bolhas de tamanho fixo e os modelos de quebra e coalescência MUSIG e DDM

	Fixa	MUSIG	DDM
$F_{\alpha,2,n-2}$	5.229		
$\hat{\sigma}^2$	0.188	0.177	0.142
$F_0$	33.032	36.09	49,631

Como os valores de  $F_0$  são maiores que o valor de  $F_{\alpha,2,n-2}$  para os três modelos, a hipótese nula é rejeitada, logo os três casos representam o processo, pelo menos qualitativamente.

Passo 2: Toda análise estatística depende do comportamento dos resíduos. Se premissas básicas como a normalidade dos resíduos não forem satisfeitas, toda a análise é questionável.

Desta forma, neste segundo passo da validação estatística, o comportamento dos resíduos é verificado.

O primeiro teste realizado é relacionado à normalidade dos resíduos. A figura 5.48 mostra claramente que este pré-requisito da análise estatística é satisfeito para os três modelos.

O segundo e terceiro testes realizados sobre os resíduos tem como objetivo verificar a aleatoriedade dos mesmos. A figura 5.49 mostra os resíduos em função da ordem de coleta dos resultados, enquanto a figura 5.50 mostra os resíduos em função da vazão de injeção de gás no reator. Em ambos os casos, a aleatoriedade dos resíduos é óbvia. Caso contrário, seria possível imaginar um enviesamento dos resultados em função de alguma variável.

Passo 3: Neste passo é realizado o teste de hipótese para os coeficientes do modelo estatístico. Para que a hipótese seja rejeitada é necessário que o valor calculado de R esteja dentro da elipse definida por  $n(\hat{\beta}_0 - \beta_0)^2 + 2P(\hat{\beta}_0 - \beta_0)(\hat{\beta}_1 - \beta_1) + Q(\hat{\beta}_1 - \beta_1)^2$ .

A tabela V.5 mostra os valores obtidos para cada um dos modelos avaliados. Para todos os modelos o valor de R foi menor do que aquele obtido pela equação da elipse, então pode-se concluir que os três modelos apresentam desvios em relação aos resultados obtidos por modelagem física, para  $\alpha$  igual a 0,01. Esta conclusão está de acordo com a análise qualitativa realizada nas figuras 5.45, 5.46, e 5.47. O passo 4, mostrado a seguir, mostrará qual modelo se aproxima mais dos resultados reais.

Passo 4: Nesta etapa são determinados os intervalos de confiança para o valor real da quantidade de interesse, com base nas previsões dos modelos matemáticos. A figura 5.51 mostra gráficos onde os valores estimados por meio de modelagem matemática são plotados em função dos resultados obtidos por modelagem física. Além disso, são mostrados no gráfico o intervalo de confiança para os valores reais, com base nas previsões dos modelos matemáticos. Em um caso ideal, o coeficiente angular seria 1,0 e o coeficiente linear 0,0. Não é surpreendente que exista um desvio entre os valores obtidos por modelagem física e matemática, visto que isso foi mostrado no passo 3.

Contudo, esta análise permite afirmar que a curva obtida pelo modelo de quebra e coalescência DDM podem prover dados mais acurados, após uma calibração em um sistema de primeira ordem, pois o intervalo de confiança encontrado é mais estreito que os demais.

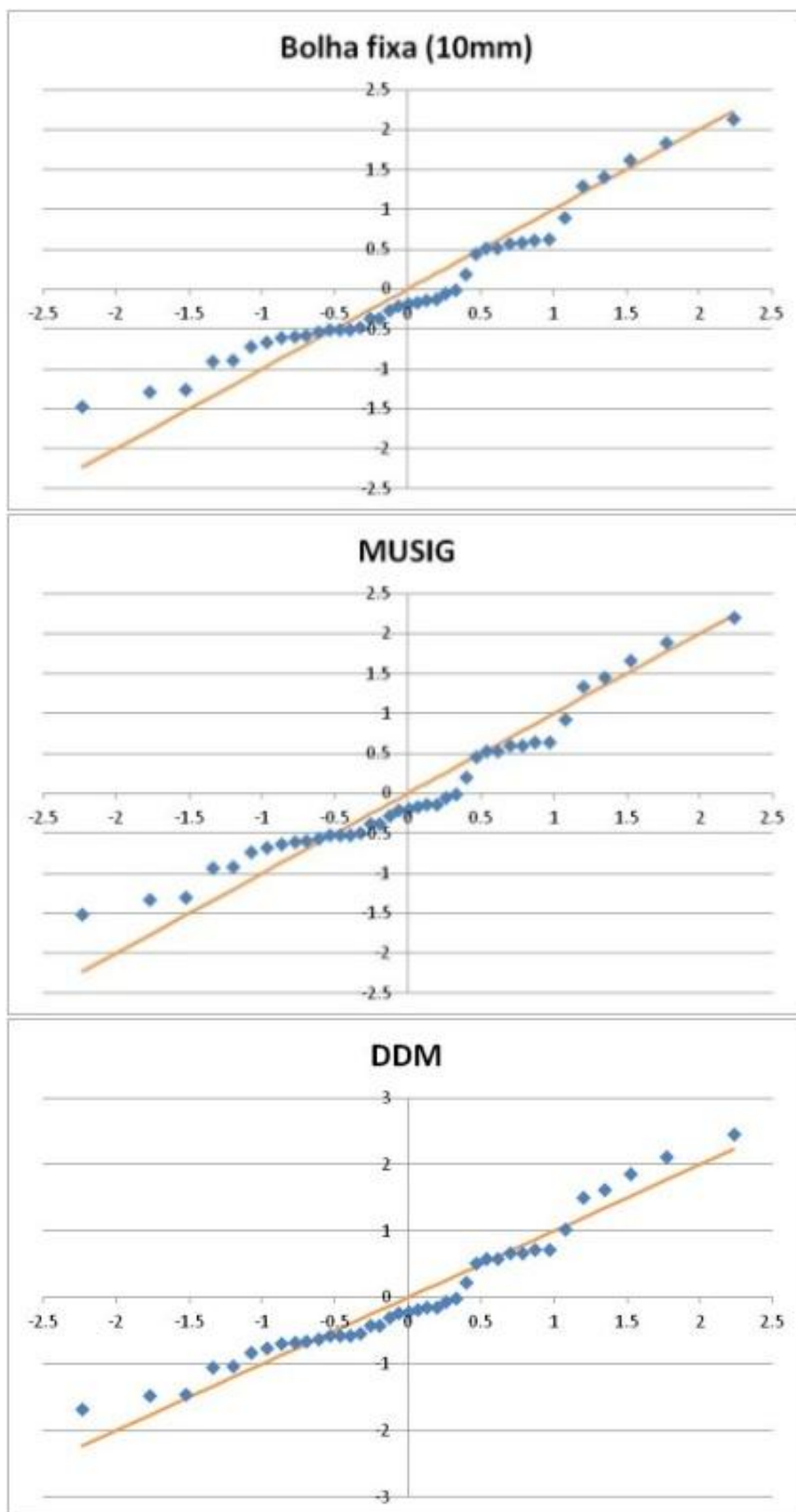


Figura 5.48: Gráfico de análise de normalidade para os modelos avaliados.

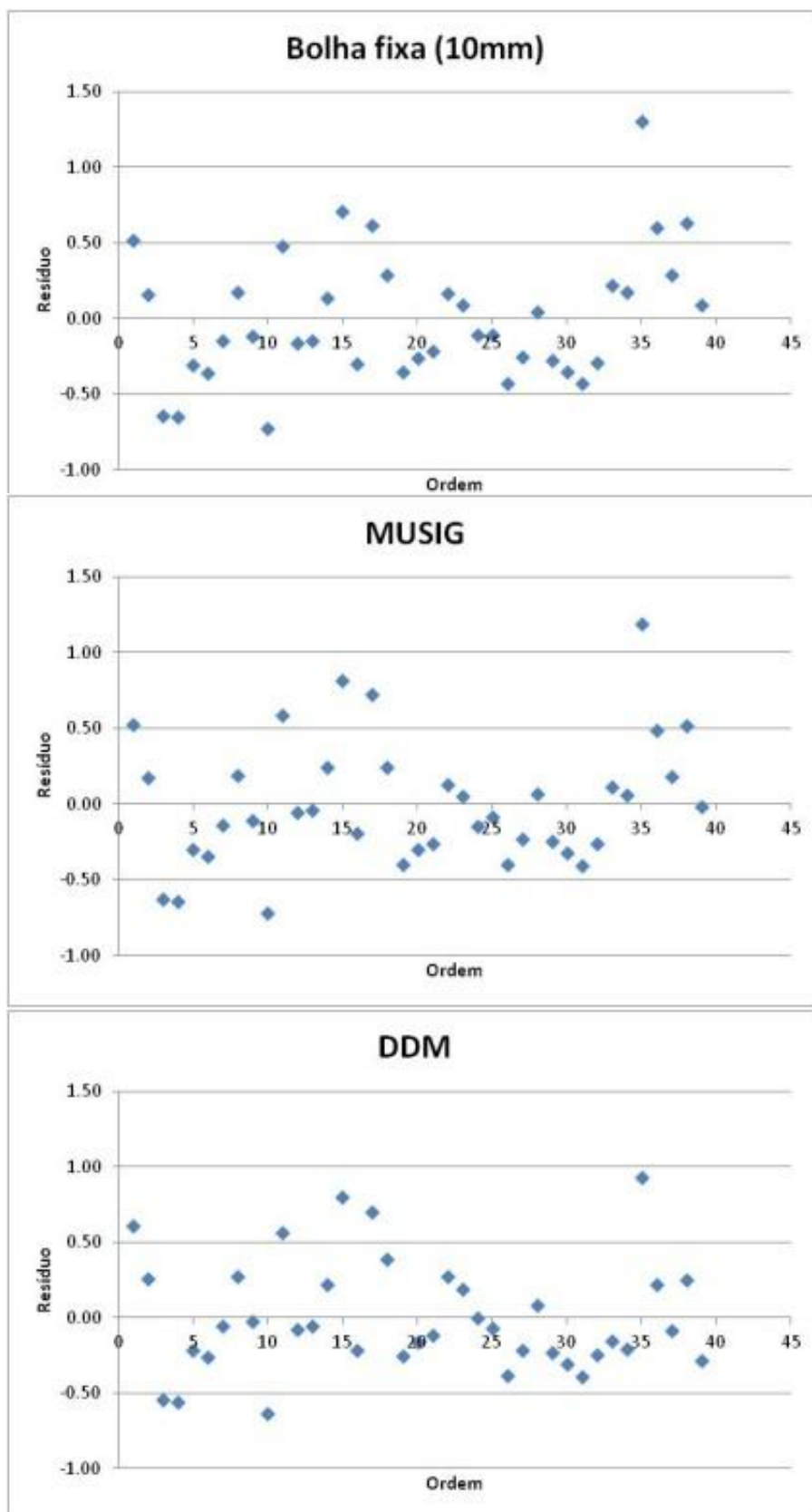


Figura 5.49: Gráfico de distribuição de resíduos versus ordem para os modelos avaliados.

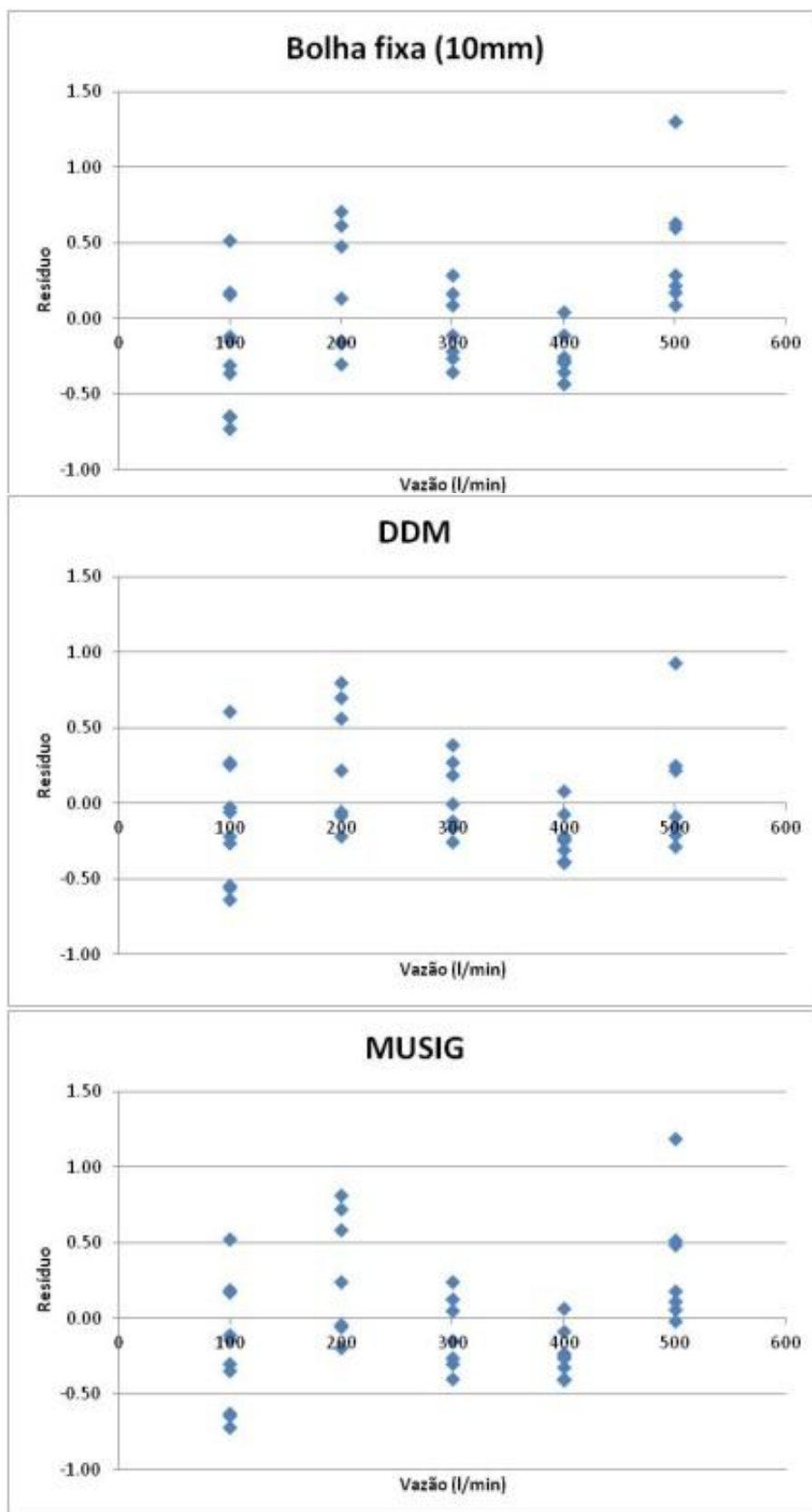


Figura 5.50: Gráfico de distribuição de resíduos versus vazão para os modelos avaliados.

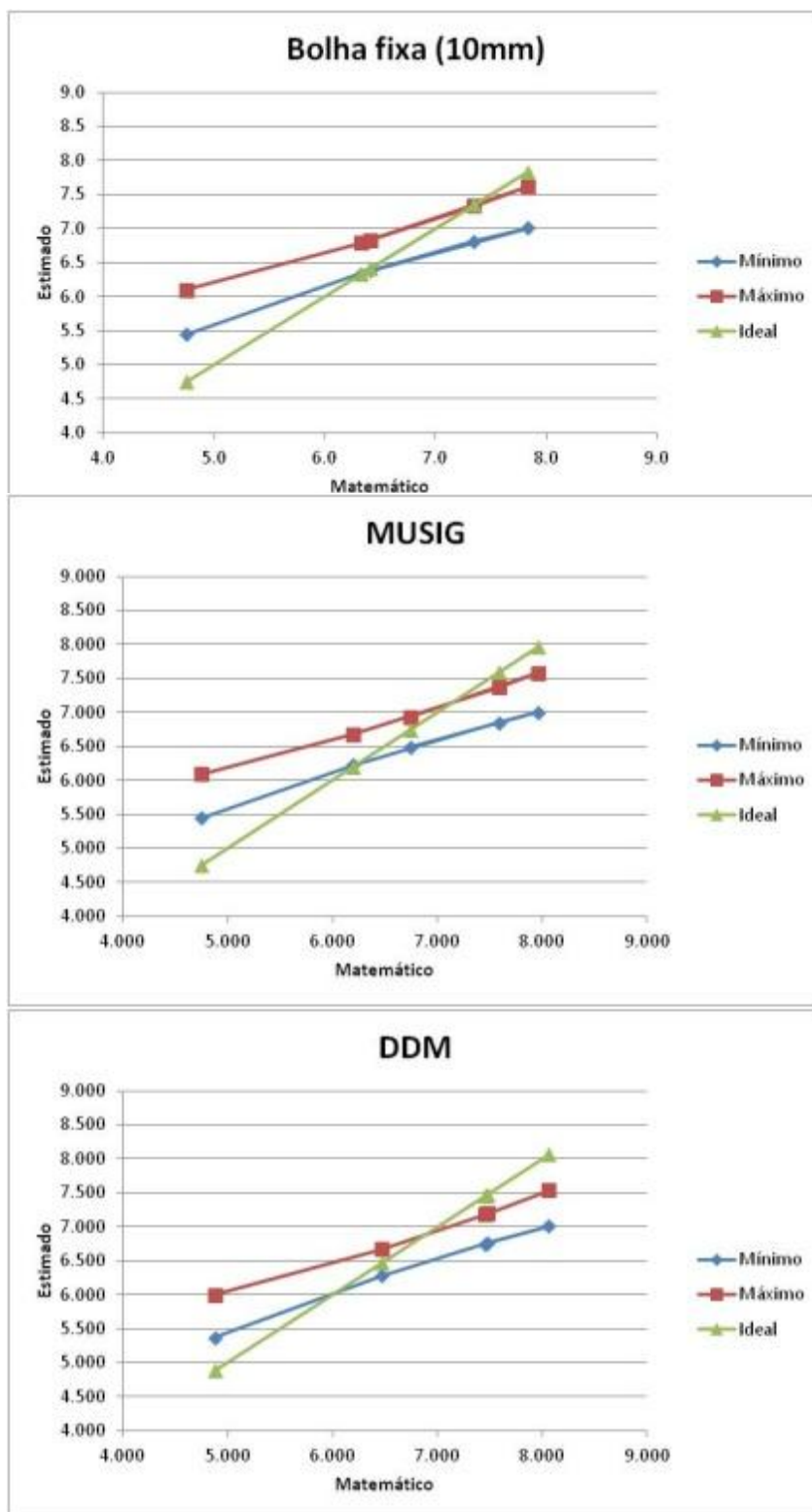


Figura 5.51: Gráfico de Y real versus Y estimado para os modelos Fixa com intervalo de confiança.

Tabela V.5: Valores de R e de  $n(\hat{\beta}_0 - \beta_0)^2 + 2P(\hat{\beta}_0 - \beta_0)(\hat{\beta}_1 - \beta_1) + Q(\hat{\beta}_1 - \beta_1)^2$  obtidos para cada um dos modelos avaliados.

	Fixa	MUSIG	DDM
R	1,961	1,852	1,484
$n(\hat{\beta}_0 - \beta_0)^2 + 2P(\hat{\beta}_0 - \beta_0)(\hat{\beta}_1 - \beta_1) + Q(\hat{\beta}_1 - \beta_1)^2$	13,993	16,059	14,845

## 6- CONCLUSÕES

Foram realizadas modelagens matemáticas em uma panela de aciaria agitada por gás e em um desgaseificador a vácuo RH considerando a interação entre as fases líquida e gasosa. O efeito do tamanho das bolhas foi avaliado na panela de aciaria, mostrando um efeito significativo. Bolhas menores foram capazes de promover a mistura do líquido em tempos consideravelmente menores do que as bolhas maiores, variando de 82 segundos para uma mistura de 95% para bolhas com 2 milímetros de diâmetro até 102 segundos para bolhas com diâmetro de 80 milímetros.

Foram implementados no software comercial CFX dois modelos de quebra e coalescência de bolhas. O MUSIG, padrão do programa e o DDM, implementado com base no trabalho publicado por Laux e Johansen (1999). Considerando estes modelos, o tempo de mistura foi praticamente o mesmo (88 segundos para uma mistura de 95% considerando o modelo MUSIG e 87 segundos para uma mistura de 95% considerando o modelo DDM).

Foram comparados os perfis de velocidade das bolhas obtidos por modelagem matemática utilizando os dois modelos de quebra e coalescência com o perfil de velocidades das bolhas obtidos por modelagem a frio da panela de aciaria, para as mesmas condições, contudo, não foi possível determinar diferenças significativas do comportamento das bolhas por meio desta técnica.

No entanto, a avaliação do perfil de distribuição de tamanho de bolhas na panela de aciaria agitada por gás, considerando os dois modelos de quebra e coalescência das bolhas apresentou resultados diversos. Para todas as vazões simuladas o tamanho médio previsto pelos modelos apresentou resultados próximos, contudo, a variância do tamanho das bolhas obtida pelo uso do modelo MUSIG foi sensivelmente inferior àquela obtida pelo uso do modelo DDM. A comparação destes resultados com os obtidos por modelagem física a frio demonstrou que o modelo de quebra e coalescência DDM representa melhor o comportamento das bolhas na panela de aciaria.

No desgaseificador a vácuo, o comportamento das bolhas, no que diz respeito à quebra e coalescência também foi comparado por modelagem matemática utilizando os modelos de quebra e coalescência MUSIG e DDM. Assim como na panela de aciaria, a dispersão do tamanho das bolhas foi menor para as previsões com o uso do modelo padrão de quebra e

coalescência de bolhas do CFX, MUSIG, do que para aquelas realizadas com o uso do modelo de quebra e coalescência de bolhas DDM. Uma validação direta por meio de modelagem física não foi possível neste reator em função do grande número de bolhas proveniente das vazões muito mais altas e da própria geometria do reator. Desta forma, foi realizada uma validação indireta do comportamento das bolhas, com base na análise das taxas de circulação obtidas neste reator por modelagem matemática, considerando os dois modelos de quebra e coalescência de bolhas e simulações utilizando bolhas com tamanho fixo de 10 milímetros de diâmetro, comparadas com resultados históricos obtidos por modelagem física neste mesmo reator.

A validação da previsão do escoamento do líquido utilizando a taxa de circulação no desgaseificador a vácuo RH foi realizada utilizando metodologia estatística. De acordo com esta metodologia todos os modelos representam qualitativamente o comportamento do desgaseificador a vácuo RH, mas todos apresentam também um enviesamento em relação aos resultados obtidos por modelagem física. Adicionalmente a metodologia estatística informou que a modelagem matemática utilizando o modelo de quebra e coalescência DDM é capaz de fornecer dados mais acurados do que os demais através de um ajuste de primeira ordem, pois o intervalo de confiança para os valores reais, calculados com base nas predições dos modelos matemáticos encontrado para este modelo é mais estreito que para os demais modelos.

Desta forma é possível afirmar que tanto para a panela de aciaria quanto para o desgaseificador a vácuo RH o modelo de quebra e coalescência DDM se comportou melhor, mesmo que no caso do desgaseificador a validação tenha sido indireta e os resultados tenham apresentado um certo desvio em relação ao modelo físico.

## 7- CONTRIBUIÇÕES ORIGINAIS AO CONHECIMENTO

Os seguintes itens constituem contribuições originais do presente trabalho.

- simulação matemática de uma panela de aciaria agitada por gás, considerando o modelo de quebra e coalescimento de bolhas MUSIG;
- simulação matemática de uma panela de aciaria agitada por gás, considerando o modelo de quebra e coalescimento de bolhas DDM;
- comparação do perfil de distribuição de tamanho de bolhas obtido pelos modelos de quebra e coalescência MUSIG e DDM com o obtido por simulação física em uma panela de aciaria agitada por gás;
- simulação matemática de um desgaseificador a vácuo RH, considerando o modelo de quebra e coalescimento de bolhas MUSIG;
- simulação matemática de um desgaseificador a vácuo RH, considerando o modelo de quebra e coalescimento de bolhas DDM;
- comparação do perfil de distribuição de tamanho de bolhas obtido pelos modelos de quebra e coalescência MUSIG e DDM em um desgaseificador a vácuo RH;
- uso de uma metodologia estatística para validação dos modelos matemáticos em um desgaseificador a vácuo RH usando a taxa de circulação como parâmetro de validação.

## 8- SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Para um aperfeiçoamento dos métodos de simulação matemática e física de reatores metalúrgicos, visando a melhora na produtividade, é importante o avanço de novos estudos que não foram contemplados neste trabalho. Desta forma são sugeridos os seguintes trabalhos futuros:

- Utilização de técnicas de visualização de bolhas utilizando plano de laser para estudo aprofundado do comportamento das bolhas na modelagem física de uma panela de aciaria;
- Utilização de técnicas de PIV na modelagem física de uma panela de aciaria;
- Elaboração de um modelo matemático considerando as quatro fases distintas de distribuição de bolhas mostrada por Sicorski, 2006, visando aprimorar o modelo de arraste das bolhas em uma panela de aciaria;
- Elaboração de modelos matemáticos de um desgaseificador a vácuo RH, considerando o modelo de quebra e coalescimento de bolhas MUSIG e superfície livre na câmara de vácuo;
- Elaboração de modelos matemáticos de um desgaseificador a vácuo RH, considerando o modelo de quebra e coalescimento de bolhas DDM e superfície livre na câmara de vácuo.

## 9- REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AIAA: Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Reston, (1998), 29.

ALIHOSSEINI, H.; DEGHANI, K. Bake hardening of ultra-fine grained low carbon steel produced by constrained. *Materials Science and Engineering A*. 2012

ANAGBO, P. E; BRIMACOMBE, J. K. Plume characteristics and liquid circulation in gas injection through a porous plug. *Metallurgical Transactions B*, Warrendale, v.21 B, p.637-648, Aug. 1990.

ARAÚJO, Luiz Antônio de. Manual de Siderurgia. São Paulo : Arte & Ciência, 1997. ISBN: 85-86127-11-6.

AZEVEDO, V. C.,; MARTINS, A. A.; SILVA, A. C. S. A.; PINTO, F. R. V.; ARRUDA, M. D. S.: *Tecnol. Metal. Mater. Miner.*, São Paulo, v. 6, n. 3, p. 174-178, jan.-mar. 2010

BAYARRI, M. J.; BERGER, J. O.; PAULO, R.; SACKS, J.; Cafeo, J. A.; CAVENDISH, J.; LIN, C. H.; TU, J.: *Technometrics*, 49(2007), 138.

BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N.: *Transport phenomena*. New York: John Wiley & Sons., 1960. 780p.

BRUCE, S. CHEETHAM, V. LEGGE, G. Recent Operating Experience wiht Dry Running Vacuum Pumps on Vacuum Degassing and Vacuum Oxigen Decarburisin systems. *ISSTech 2003: Conference Proceedings: Electric Furnace, Steelmaking*, 2003. 895- 909p.

COSTA, L. T.: *Simulação fluidodinâmica computacional para estudo do tratamento de dessulfuração do aço*. Dissertação de Mestrado em Metalurgia Extrativa; Escola de Engenharia; Universidade Federal de Minas Gerais; Belo Horizonte; 2012.

CREECH, D. T. *Computational modeling of multiphase turbulent fluid flow and heat transfer in the continuous slab casting mold*. Thesis; University of Illinois, Urbana, 1997.

ELIAS, R. C. A. *Modelamento físico e matemático da formação de placa de mistura no lingotamento contínuo- Efeitos de modificadores de fluxo no molde*. Dissertação de Mestrado

em Metalurgia Extrativa; Escola de Engenharia; Universidade Federal de Minas Gerais; Belo Horizonte; 2010.

FRUEHAN, R. J. The making, shaping and treating of steel. 11<sup>th</sup> Edition, Steelmaking and Refining Volume, The AISE Steel Foundation, Cap. 4, p. 265-266, 1998.

GENG, D. Q.; ZHENG, J. X.; WANG, K.; WANG, P.; LIANG, R. Q.; LIU, H. T.; LEI, H.; HE, J. C.; Simulation on Decarburation and Inclusion Removal Process in the Ruhrstahl-Heraus (RH) Process with Ladle Bottom Blowing. Metallurgical and Materials Transactions B, v.46 B, p.1484-1493, June. 2015.

KAMATA, C.; MATSUMURA, H.; MIYASAKA, H.; HAYASHI, S.; ITO, K. Cold Model Experiments on the Circulation Flow in RH Reactor using a Laser Doppler Velocimeter, Steelmaking Conference Proceedings, p. 609-616, 1998.

KATO, Y.; KIRIHARA, T.; FUJII, T. Analysis of decarburization reaction in RH degasser and its application to ultra-low carbon steel production. Kawasaki steel technical report, n° 32, 1995

KATO, Y.; NAKATO, H.; FUJII, T.; OHMIYA, S.; TAKATORI, S.; Fluid flow in ladle and its effect on decarburization rate in RH degasser. ISIJ International, 1993, Vol. 33, N° 10, p.1088

KIM, J. S.; KIM, S. M.; KIM, H. D.; JI, S. J.; KIM, K. C.: Dynamic structures of bubble-driven liquid flows in a cylindrical tank. Exp Fluids, 2012. DOI 10.1007/s003480-011-1224-x

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B; Mathematical models of turbulence. Academic Press, 1972.

LI, L; LIU, Z; CAO, M; LI, B. Large Eddy Simulation of Bubbly Flow and Slag Layer Behavior in Ladle with Discrete Phase Model (DPM)- Volume of Fluid (VOF) Coupled Model. JOM, Vol.67, N. 7, 2015, p. 1459.

LIU, B. S.; ZHU, G. S.; LI, H. X., LI, H. X.; LI, B. H.; CUI, Y.; CUI, A. M. Decarburization rate of RH refining for ultra low carbon steel. International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials, Vol. 17, N. 1, 2010, p. 22.

LIU, Z.; QI, F.; LI, B.; JIANG, M. Multiple Size Group Modeling of Polydisperse Bubbly Flow in the Mold: An Analysis of Turbulence and Interfacial Force Models. Metallurgical and Materials Transactions B, v.46 B, p.933-952, April. 2015.

MANDEL, J.; LINNIG F. J. Study of Accuracy in Chemical Analysis Using Linear Calibration Curves. *Anal. Chem.*, v.29, p.743-749, 1957.

MONTGOMERY, D. C. *Design and Analysis of Experiments*, Wiley, Hoboken, NJ, 8th ed., 2012.

MONTGOMERY, D. C.; PECK, E. A.; Vining, G. G.: *Introducción al Análisis de Regresión Lineal*, 3rd ed., CECSA, Mexico City, Mexico, 2006.

MUNKEJORD, S. T. *Analysis of the Two-fluid Model and the Drift-flux Model for Numerical Calculation of Two-Phase Flow*, Tese de Doutorado, Norwegian University of Science and Technology, Janeiro, 2006.

NEVES, L. *Modelagem do escoamento multifásico no desgaseificador RH e no distribuidor de lingotamento contínuo*. Tese de Doutorado em Metalurgia Extrativa; Escola de Engenharia; Universidade Federal de Minas Gerais; Belo Horizonte; 2012

OBERKAMPF, W. L., TRUCANO, T. G. e HIRSCH, C. Verification, validation and predictive capability in computational engineering and physics. *Foundations for verification and validation in the 21st century workshop*. 2002, p. 20 p.

ONO, K.; YANAGIDA, M.; KATOH; OKAMOTO: *Electr. Furnace Steel*, 52, vol.3, p.149-157, 1981.

ORESKEs, N.; SHRADER-FRECHETE, K.; BELITZ, K. Verification, Validation, and Confirmation of Numerical Models in the Earth Sciences. *Science*, **263**(1994), 641

PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Minnesota :Taylor&Francis, 1980.

PEREIRA, J. A. M. *Modelamento Físico de uma Panela Siderúrgica não Cilíndrica Agitada com Gás*. Tese de Doutorado em Metalurgia Extrativa; Escola de Engenharia; Universidade Federal do Rio Grande do Sul; Porto Alegre; 2011.

PÉREZ, C. A. A.: *Measurement Techniques to characterize bubble motion in swarms*. Thesis; Department of Mining and Materials Engineering; Mc Gill University; Montreal; Canada; 2007

RAFFEL, M., WILLBERT, C.E., WERELEY, S.T., KOMPENHANS, J. *Particle image velocimetry: a practical guide*. 2a ed., New York: Ed. Springer Verlag, 448 p., 2007.

RIZZO, E. Introdução aos processos siderúrgicos. Associação Brasileira de Metalurgia, Materiais e Mineração: São Paulo, 2005.

SAKAGUCHI, K.; ITO, K.: Measurement of the volumetric mass transfer coefficient of gas-stirred vessel under reduced pressure. ISIJ International, 1995, Vol 35, N° 11, p. 1348.

SASSAKI, R. A.: Distribuição de tempos de residência em sistemas alimentados com vazão variável. Dissertação de Mestrado em Engenharia Civil; Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2005

SESHADRI, V.; COSTA, S. L. S. Cold Model of RH Degassing, Transactions of ISIJ, Vol.26, p.133-138, 1986.

SICORSKI, R. S.: Modelagem Numérica Aplicada aos Fenômenos de Escoamento e Mistura em Modelos Físicos de Panelas de Aciaria. Dissertação de Mestrado em Metalurgia Extrativa; Escola de Engenharia; Universidade Federal do Rio Grande do Sul; Porto Alegre; 2006

SILVA, M. J. A. Variação da taxa de descarburização para vários padrões de injeção de argônio na perna de subida do desgaseificador a vácuo RH. Dissertação de Mestrado em Metalurgia Extrativa; Escola de Engenharia; Universidade Federal de Minas Gerais; Belo Horizonte; 2010

SILVEIRA, W. J. Fluidos no processo RH para previsão da taxa de circulação do aço. Dissertação de Mestrado em Metalurgia Extrativa; Escola de Engenharia; Universidade Federal de Minas Gerais; Belo Horizonte; 2011.

SOARES, J. H. P. Uso de Traçadores na Modelagem de unidades de aeração e decantação em estação de tratamento de esgotos. 100f. Tese de doutorado - Coordenação dos Programas de Pós-Graduação de Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 1985.

SOUZA, J. N. M. Modelagem e simulação de escoamento multifásico em dutos de produção de óleo e gás natural. Tese de Doutorado em Ciências; Escola de Química; Universidade Federal do Rio de Janeiro; Rio de Janeiro; 2010.

TURKDOGAN, E. T. Fundamentals of steelmaking. The Institute of Materials, 1996. Cap. 9, p.245-253.

VIENA, U. A. Modelo físico para simulação do sistema de injeção de gás e pós através de lança em panela de aciaria. Belo Horizonte: Escola de Engenharia da UFMG, 1989. 234p (Dissertação, Mestrado em Engenharia Metalúrgica e de Minas).

WOLLMANN, A. M. Estudos de fluxo em um distribuidor de lingotamento contínuo. Porto Alegre: Escola de Engenharia da UFRGS, 1999. 95p (Dissertação, Mestrado em Engenharia Metalúrgica e de Minas).

YAMAGUCHI, K.; KISHIMOTO, Y.; SAKURAI, T.; FUJII, T.; ARATANI, M.; NISHIKAWA, H. Effect of Refining Conditions for Ultra Low Carbon Steel on Decarburization Reaction in RH Degasser. ISIJ International, Vol. 32, N° 1, p. 126 – 135, 1992.

YAMAGUCHI, K.; SAKURAYA, T.; HAMAGAMI, K. Development of hydrogen gas injection method for promoting decarburization of ultra-low carbon steel in RH degasser. Kawasaki steel technical report, N° 32, 1995

ZHANG, L.; LI, F. Investigation on the Fluid Flow and Mixing Phenomena in a Ruhrstahl-Heraeus (RH) Steel Degasser Using Physical Modeling. Materials. JOM, Vol. 66, N° 7, 2014.

ZHANG, Z.; LIN, Q.; YU, Z.; Grain boundary segregation in ultra-low carbon steel. Materials Science and Engineering A. 2000.