

FABIA BOCAYUVA CARVALHO

**DESENVOLVIMENTO DE MODELO FLUIDODINÂMICO PARA REATORES DE
COLUNA DE BOLHAS: APLICAÇÃO EM SISTEMA DE DESGASEIFICAÇÃO A
VÁCUO PARA TRATAMENTO DE METAL LÍQUIDO**

São Paulo

2022

FABIA BOCAYUVA CARVALHO

**DESENVOLVIMENTO DE MODELO FLUIDODINÂMICO PARA REATORES DE
COLUNA DE BOLHAS: APLICAÇÃO EM SISTEMA DE DESGASEIFICAÇÃO A
VÁCUO PARA TRATAMENTO DE METAL LÍQUIDO**

Versão Original

Dissertação apresentada a Escola
Politécnica da Universidade de São
Paulo para obtenção do título de
Mestre em Ciências

Área de concentração:
Engenharia Química

Orientação:
Prof. Dr. Roberto Guardani

São Paulo

2022

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à sua versão original, sob responsabilidade única do autor e com anuência de seu orientador.

São Paulo, 19 de janeiro de 2022

Assinatura do autor:



Assinatura do orientador:



Catlogação na publicação

Bocayuva Carvalho, Fabia

Desenvolvimento de um modelo fluidodinâmico para reatores de coluna de bolhas: aplicação em um sistema de desgaseificação a vácuo para o tratamento de metal líquido / F. Bocayuva – versão original – São Paulo, 2022. 90 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.
Departamento de Engenharia Química

1. Desgaseificação a vácuo
2. Hidrogênio
3. Metal
4. Fluidodinâmica computacional
5. Coluna de bolhas
6. Área interfacial de troca. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Química II.t.

Nome: BOCAYUVA, Fabia

Título: Desenvolvimento de um modelo fluidodinâmico para reatores de coluna de bolhas: aplicação em um sistema de desgaseificação a vácuo para o tratamento de metal líquido

Dissertação apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Aprovado em:

Banca Examinadora

Prof. Dr. Roberto Guardani

Instituição Universidade de São Paulo

Julgamento **Aprovado**

Prof. Dr. Dirceu Noriler

Instituição Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Julgamento **Aprovado**

Prof. Dr. Tiago Ramos Ribeiro

Instituição LKAB

Julgamento **Aprovado**

AGRADECIMENTOS

Às pessoas mais importantes da minha vida, minha família, Regina, Octacilio, Nathalia, Manuela e Lili, por me proporcionarem uma rede de apoio sólida e nunca me deixarem desamparada em momentos de fraqueza.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Roberto Guardani, por ser muito mais que um mentor, mas também um amigo que sabe a importância de dedicar uns minutos do dia à fofoca e café. A ele, a Alexander Zerwas, e aos pesquisadores do IPT, André Nunis, Denir Paganini e Tiago Ramos, agradeço a orientação especializada para o desenvolvimento desse projeto, além de confiarem na minha capacidade.

Aos meus colegas de laboratório, Stefania, Rinata, Paty e Zerwitas, que viraram a certeza de uma alegria diária, por me acolherem e dividirem comigo os momentos de aflição e balbúrdia. Um agradecimento especial à minha família do apartamento 72, Carol e Diego, por sempre me receberem em casa com muito amor, disfarçado, porém sincero, e por cuidarem tão bem de mim até quando eu não estava no meu melhor humor. As minhas amigas e parceiras de toda vida, Moana, Bruna, Mila, Carol, Virla, Mary, Mands, Gui e Clara, por serem a certeza de um porto seguro e não me deixarem sozinha em nenhum momento independente do lugar que eu esteja.

E, por fim, a todos meus professores do programa do Departamento de Engenharia Química da Poli-USP pelos ensinamentos e atenção nas disciplinas administradas. A toda a equipe de funcionários do PQI pela gentileza e apoio no setor.

Esta pesquisa constitui parte do projeto “Plano de Desenvolvimento Institucional na Área de Transformação Digital: Manufatura Avançada e Cidades Inteligentes e Sustentáveis (PDIP)” do Instituto de Pesquisas Tecnológicas de São Paulo (Processo Fapesp 2017/50348-2), na linha de pesquisa Modelagem de Processos Bio-Físico-Químicos, que conta com apoio da FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo. Portanto, agradeço à FAPESP por financiar e acreditar nessa pesquisa através da bolsa de mestrado concedida pelo processo de nº 2019/08850-0.

RESUMO

Os sistemas agitados a gás são de grande importância para a indústria em geral, com uma série de aplicações de relevância industrial dentre as quais está o processamento de metais, em sistemas envolvendo o ajuste de composição pela interação entre gás e metal fundido. Além de promover a homogeneização da temperatura e da composição do metal fundido, a injeção de gás é utilizada para reações químicas e eliminação de compostos químicos indesejados. Na desgaseificação a vácuo do aço fundido, o gás argônio inserido ao sistema é responsável pela remoção de hidrogênio e nitrogênio presentes no metal. Tais gases provocam efeitos prejudiciais à qualidade do produto final, afetando sua resistência e vida útil. Apesar de serem reatores de simples operação, as colunas de bolhas apresentam escoamento muito complexo e pouco compreendido. Sendo o líquido um metal fundido a altas temperaturas, outras limitações são agregadas ao estudo do processo, como condições de temperatura e dificuldades relacionadas à coleta de amostras e visualização do escoamento. Dito isto, a modelagem por Fluidodinâmica Computacional (CFD) se mostra um recurso de grande potencial para simular o escoamento multifásico envolvido no processo. O presente trabalho tem por finalidade desenvolver um modelo numérico por Fluidodinâmica Computacional para o tratamento do aço fundido por desgaseificação a vácuo, usado como meio de estudo da distribuição da área interfacial de troca de massa e concentração de gases indesejados no aço. Foram investigados os efeitos sobre a eficiência do processo e os perfis de velocidade e pressão do escoamento através da implementação do modelo multifásico Euler-Euler, modelo de turbulência κ - ϵ , com contribuição de modelos BIT de Troshko-Hassan e Simonin-Viollet, e modelo de transferência de massa com adição da correlação de Besagni et. al (2018) para a área interfacial. O campo de velocidade foi previsto com precisão, em regiões longe do injetor de gás, para ambos os modelos BIT, entretanto, nenhum dos modelos apresentou melhoria significativa na acurácia em relação ao modelo κ - ϵ padrão. O modelo Simonin-Viollet mostrou ser altamente dependente dos valores do seu coeficiente. A correlação de Besagni et. al (2018) no modelo de transferência de massa mostrou ter efeito positivo na acurácia do modelo, 98,86% comparado a 93,65% do modelo inicial.

Palavras-chave: Fluidodinâmica Computacional (CFD). Desgaseificação a vácuo. Metal. Hidrogênio. Coluna de bolhas. Modelo numérico. Área interfacial de troca.

ABSTRACT

Gas agitated systems are of great importance for industry in general, with a number of relevant industrial applications among which is metal refining, in systems involving the adjustment of composition through the interaction between gas and molten metal. Besides promoting homogenization of the temperature and composition of the molten metal, gas injection is also used for chemical reactions and the elimination of unwanted chemical compounds. In vacuum degassing of molten steel, the argon gas injected into the system is responsible for removing hydrogen and nitrogen present in the metal. These gases cause harmful effects to the quality of the final product, affecting its resistance and product life. Despite their relatively simple operation, bubble columns present complex and not fully understood flow patterns. In the present case, where the liquid phase consists of a molten metal at high temperatures, other limitations exist to the study of the process, such as temperature conditions and difficulties related to sample collection and flow visualization. In this case, Computational Fluid Dynamics (CFD) modeling is a powerful tool to simulate the multiphase flow involved in the process. The present study aims to develop a numerical model for the treatment of molten steel by vacuum degassing using CFD technique as a means for studying the distribution of the interfacial area and the concentration of gases in the steel. The effects of different process conditions on process efficiency, velocity and pressure profiles were investigated by implementing the Euler-Euler multiphase model, κ - ϵ turbulence model with BIT contributions from Troshko-Hassan and Simonin-Viollet models, and mass transfer model with adding correlation of Besagni et. al (2018) for the exchange interfacial area. The velocity field was accurately predicted in regions far from the gas injector for both BIT models, however, neither model showed significant improvement in accuracy over the standard κ - ϵ model. The Simonin-Viollet model was shown to be highly dependent on the values of its coefficient. The Besagni et. al (2018) correlation in the mass transfer model was shown to have a positive effect on the accuracy of the model, 98.86% compared to 93.65% for the initial model.

Key-words: Computational Fluid Dynamics (CFD). Vacuum degassing. Metal. Hydrogen. Bubble columns. Numerical modeling. Interfacial area distribution.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Etapas de fabricação de aço. Referência: Prof. Roberto Parreiras Tavares, UFMG. Ansys Talks Online, 18/08/2020.....	19
Figura 2. Esquema de isotermas pressão-composição para sistemas Zr-ZrH ₂ (BAMBAKIDIS; 1980).....	26
Figura 3. Equações governantes de escoamentos multifásicos para regimes homogêneos e pseudo-homogêneos (STENMARK; 2013).....	33
Figura 4. Equações de transporte do modelo κ - ϵ (Ansys Fluent Theory Guide).	35
Figura 5. Equações de transporte do modelo κ - ω	35
Figura 6. Equação de transporte de espécies (Ansys Fluent Theory Guide).....	38
Figura 7. Condições de contorno do domínio em 2D e axisimétrico.	55
Figura 8. Partições de coleta de respostas na configuração 2D.....	56
Figura 9. Contornos da pluma de gás em termos da velocidade do gás (a) e da pressão estática (b) para cada malha após 1 segundo de injeção.....	57
Figura 10. Comparação dos diâmetros de bolha com os dados experimentais de Sheng e Irons (1993) através da energia cinética de turbulência (a), velocidade axial da fase líquida (b) e fração volumétrica do gás (c) em função da distância axial do injetor de gás.....	59
Figura 11. Comparação dos modelos BIT com os dados de Sheng e Irons (1993) através da energia cinética de turbulência (a), velocidade axial da fase líquida (b) e fração volumétrica do gás (c) em função da distância axial do injetor de gás na linha central da coluna.	60
Figura 12. Comparação do coeficiente C_s do modelo de Simonin-Violet (1990) através da energia cinética de turbulência (a), velocidade axial da fase líquida (b) e fração volumétrica do gás (c) em função da distância axial do injetor de gás na linha central da coluna.	61
Figura 13. Comparação dos coeficientes C_{ke} e C_{td} do modelo de Troshko-Hassan (2001) através da energia cinética de turbulência (a) e velocidade axial da fase líquida (b) em função da distância axial do injetor de gás na linha central da coluna.	61
Figura 14. Resultados numéricos da energia cinética em função da distância radial da coluna à uma altura de 0,21m.....	62

Figura 15. Vetores da magnitude da velocidade da fase líquida.	63
Figura 16. (esquerda) perfil de velocidade da fase líquida em vetores e em coloração de intensidade. (direita) perfil de velocidade da fase líquida em vetores e da fração volumétrica em coloração.....	66
Figura 17. Perfil em contornos da fração mássica de hidrogênio molecular dissolvido no metal após 16 minutos de processo.	66
Figura 18. Média da fração mássica de hidrogênio molecular dissolvido no metal em função do tempo.	66
Figura 19. Malha numérica da metade da geometria em elementos polyhedricos (acima) e polyhexcore (abaixo).	67
Figura 20. Perfil da fração volumétrica da fase líquida após atingir regime próximo a estacionário (após 30 segundos de injeção).....	69
Figura 21. Perfil da velocidade da fase líquida em vetores e da fração volumétrica em coloração (após 30 segundos de processo).....	69
Figura 22. Resultados numéricos da média volumétrica da concentração de hidrogênio no banho de metal em função do tempo decorrido de processo.....	71
Figura 23. Contorno da distribuição do tamanho das bolhas de acordo com o modelo de Bannenberg (1992).	72
Figura 24. Perfis de concentração de hidrogênio predito pelo modelo Karouni (esquerda) e Bannenberg (direita), após 20 minutos de tratamento.	72
Figura 25. Ampliação da Figura 21 ao final do processo de desgaseificação.	73
Figura 26. Contorno da área interfacial calculada pela correlação de Besagni (2018). .	74
Figura 27. Perfil da concentração de hidrogênio para diferentes $[H]_{inicial}$	74
Figura 28. Perfil da taxa de remoção de hidrogênio para diferentes $[H]_{inicial}$	75

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Modelos de termos fontes para turbulência induzida pelas bolhas (Ansys Fluent Theory Guide).	37
Tabela 2. Correlações empíricas para o tamanho das bolhas em sistema metal-gás.....	42
Tabela 3. Equações dos modelos para os termos fontes de BIT na formulação κ - ϵ para cada fase.	45
Tabela 4. Modelo geral de transporte de hidrogênio – utilizado por Karouni (2018) e Bannenberg (1992) - sem incluir modelagem de A e db.	48
Tabela 5. Variações do modelo Karouni (2018) adicionando a modelagem de A.....	48
Tabela 6. Variações do modelo de Bannenberg (1992), adicionando a modelagem de A.	48
Tabela 7. Características do sistema gás/água dos casos de validação.	49
Tabela 8. Características do sistema argônio/metál do caso de validação.	49
Tabela 9. Propriedade dos fluidos.	54
Tabela 10. Característica e métricas das malhas para o caso Sheng e Irons (1993).....	56
Tabela 11. Variação dos parâmetros para avaliação da qualidade de malhas no caso Sheng (1993).	57
Tabela 12. Composição da liga metálica e coeficientes de interação Z-H.	64
Tabela 13. Propriedades das fases do sistema metal/argônio.	65
Tabela 14. Condições de operação e concentrações de H durante processo de degaseificação da empresa Gerdau.	65
Tabela 15. Resultados da avaliação de malha somputacional em 3D.	68
Tabela 16. Dados de uma corrida de uma planta industrial da Gerdau fornecidos em Nunis et. al (2015).	68
Tabela 17. Nomenclatura das variações do modelo de Karouni (2018).....	70
Tabela 18. Nomenclatura das variações do modelo de Bannenberg (1992).	70
Tabela 19. Erro e acurácia dos modelos com base na taxa de remoção de hidrogênio..	70

NOMENCLATURAS

C_d e C_D : coeficiente de arraste (-)

C_{exp} : expoente de correção de fração de volume (-)

C_l : coeficiente de sustentação (-)

d_o : diâmetro da abertura do injetor (m)

d_b : diâmetro de bolha (m)

D : diâmetro da coluna (m)

D_H : difusividade do hidrogênio dissolvido no metal (m^2/s)

E_O : Eötvös number (-)

F : força por unidade de volume (N/m^3)

g : gravidade (m/s^2)

H : altura de banho (m)

k : coeficiente de transferência de massa (m/s)

κ : energia cinética de turbulência (m^2/s^2)

K_{gl} : coeficiente de transferência interfacial ($kg/m^3.s$)

K_{gl} : constante de equilíbrio (-)

MM : masa molecular (g/mol)

p : pressão (Pa)

Q_g : vazão de gás injetado (m^3/s)

Re : número de Reynolds (-)

S : termo fonte (p/ transporte de espécies: $kg/m^3.s$; p/ κ : kg/ms^3 ; p/ ε : kg/ms^4)

u : velocidade média (m/s)

z : posição vertical (m)

We_c : número de Weber crítico (-)

ε : dissipação de energia turbulenta (m^2/s^3)

σ : tensão superficial (N/m)

ρ : densidade gás (kg/m^3)

μ : viscosidade dinâmica (kg/ms)

v: viscosidade cinemática (m^2/s)

α : fração volumétrica (-)

λ_{RT} : comprimento de onda da instabilidade de Rayleigh-Taylor (-)

ω : taxa específica de dissipação ($1/\text{s}$)

SUBSCRITOS

b: bolha

BIT: turbulência induzida pelas bolhas

d: drag (arraste)

eff: efetiva

eq: equilíbrio

g: gás

H: hidrogênio

i: espécie

k ou q: fase

l: líquido

m: mistura

M: molecular

n: nozzle (injetor de gás)

op: operação

t: turbulenta

td: dispersão turbulenta

VM: massa virtual

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	15
2. OBJETIVOS	17
2.1. OBJETIVOS GERAIS.....	17
2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS	17
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	18
3.1. REFINO DE METAL POR SISTEMA DE COLUNA DE BOLHAS.....	18
3.1.1. Regimes de fluxo em coluna de bolhas.....	20
3.1.2. Dinâmica de um sistema de desgaseificação a vácuo	23
3.1.3. Termodinâmica do processo de desidrogenação.....	25
3.2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DOS FENÔMENOS FÍSICO-QUÍMICOS.....	27
3.2.1. Forças de interação entre dois fluidos.....	27
3.2.1.1. Força de arraste.....	28
3.2.1.2. Força de sustentação	29
3.2.1.3. Força de massa virtual	30
3.2.1.4. Força de dispersão turbulenta	31
3.2.2. Equações de Transporte.....	31
3.2.2.1. Abordagens.....	31
3.2.2.2. Turbulência.....	34
3.2.2.3. Transporte de espécies	38
3.2.3. Coalescência e quebra de bolhas	40
4. METODOLOGIA.....	43
4.1. MODELO MATEMÁTICO.....	43
4.1.1. Equações governantes do escoamento multifásico	43
4.1.2. Modelagem da densidade de força interfacial	43
4.1.3. Modelagem da turbulência.....	44
4.1.4. Modelagem do transporte de hidrogênio	45
4.1.5. Modelagem da área interfacial e do diâmetro da bolha	46
4.2. VALIDAÇÃO DOS MODELOS.....	49
4.3. MÉTODO NUMÉRICO.....	50
4.3.1. Discretização do domínio de cálculo	50
4.3.1.1. Qualidade da Malha e Erros Numéricos	50
4.3.1.2. Definição da Malha Computacional	51
4.3.2. Discretização das equações por FVM.....	51
4.3.3. Configurações do modelo numérico	52
4.3.3.1. Acoplamento Pressão-Velocidade	52
4.3.3.2. Métodos de Interpolação.....	52

5.	DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	54
5.1.	ESCOAMENTO MULTIFÁSICO E PROPRIEDADES TURBULENTAS	54
5.1.1.	Detalhes numéricos	55
5.1.2.	Avaliação da malha	55
5.1.3.	Teste de sensibilidade do modelo ao diâmetro da bolha	58
5.1.4.	Teste dos modelos BIT – <i>Bubble Induced Turbulence</i>	59
5.2.	TRANSPORTE DE ESPÉCIES: REMOÇÃO DE HIDROGÊNIO	63
5.2.1.	Informações dos dados industriais de validação	63
5.2.2.	Avaliação em geometria 2D	65
5.2.3.	Simulação em 3D: detalhes numéricos	67
5.2.4.	Avaliação da Malha em 3D	67
5.2.5.	Geração dos campos de velocidade e pressão	68
5.2.6.	Cálculo numérico da taxa de remoção de hidrogênio	70
5.3.	TESTE DE CONCENTRAÇÃO INICIAL DE HIDROGÊNIO	74
6.	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	75
7.	APÊNDICES	77
AP1.	Teste do modelo do coeficiente de arraste - CD	77
AP2.	Teste da inclusão de fH no modelo de Bannenberg (1992)	78
AP3.	Exemplo de UDF de transferência de massa	78
8.	ANEXOS	81
AN1.	Modelos disponíveis para o coeficiente de arraste no Ansys Fluent	81
AN2.	Modelos disponíveis p/ o coeficiente de força de sustentação no Ansys Fluent	82
AN3.	Modelos disponíveis para a força de dispersão turbulenta no Ansys Fluent	82
AN4.	Modelos disponíveis p/ o coeficiente de força de sustentação no Ansys Fluent	83
AN5.	Modelos de turbulência dentro do contexto κ - ϵ e κ - ω	84
9.	REFERÊNCIAS	85

1. INTRODUÇÃO

Colunas de bolhas são sistemas multifásicos em que pode ocorrer a transferência de massa e/ou calor entre duas fases, a líquida, contínua, e a fase gasosa, dispersa, podendo conter partículas sólidas em suspensão na fase líquida. Em muitas aplicações, ocorrem também transformações químicas, compreendendo uma ou mais reações químicas nas fases presentes. Uma coluna de bolhas consiste essencialmente em uma coluna equipada de um distribuidor que insere na fase líquida (fase contínua), presente na coluna, bolhas de gás (fase dispersa), causando a movimentação do líquido. Esses equipamentos são utilizados em diversas indústrias e processos, como reações de oxidação, reações de alquilação, tratamentos de efluentes, reações de fermentação, entre outros (SANTOS; 2005).

Esses sistemas apresentam em geral baixo custo de manutenção e construção por não ter em sua estrutura partes móveis ou de alta complexidade de operação (DIONISIO; 2008). Porém, por apresentar um escoamento complexo, a fluidodinâmica desses sistemas ainda é considerada pouco conhecida e, portanto, pesquisadores têm dedicado muitos esforços nos últimos anos para desenvolver modelos experimentais e matemáticos que sejam capazes de descrever seu comportamento fluidodinâmico.

Na indústria metalúrgica as colunas de bolhas são amplamente usadas em processos nos quais a injeção de gás por distribuidores aumenta a homogeneização química e térmica do metal fundido, além de atuar na remoção de gases e inclusões indesejados. A compreensão do efeito da injeção de gás depende muito da capacidade de prever a dinâmica de suas bolhas. Consequentemente, é de grande importância para o projeto adequado desses sistemas entender a formação das bolhas e sua evolução ao longo que transcorrem o metal líquido (XU; 2015). Como exemplo de processo metalúrgico realizado em coluna de bolhas tem-se a desgaseificação a vácuo durante o refino secundário, em que é realizada a remoção de gases dissolvidos no metal líquido que são prejudiciais à qualidade do produto final.

Muito se encontra na literatura sobre estudos referentes à formação de bolhas em diversos sistemas envolvendo metal fundido. Iguchi et al. (1995) desenvolveu um estudo com uma sonda de eletrorresistividade de duas agulhas para medir características da bolha, como a retenção de gás, a frequência de bolhas e a velocidade de ascensão da

bolha, em um banho de ferro fundido a 1600°C. Em outro estudo, Iguchi et al. (1998) desenvolveram um modelo experimental (*Water Model*) para investigar a frequência da formação de bolhas sob pressões reduzidas e elevadas. Thomas et al. (1997) observaram a formação de bolhas de argônio e seu comportamento ao longo do bocal e no molde de um sistema de lingotamento contínuo através de modelos experimentais (*Water Model*), com ajuda de câmeras de alta velocidade para capturar a evolução das bolhas.

Dentro do contexto dessas e outras pesquisas envolvendo colunas de bolhas em processos metalúrgicos, existem dificuldades ligadas aos métodos de medição e coleta de amostras, limitados pelas altas temperaturas de operação e pela não transparência do metal fundido. Além disso, as dimensões de uma panela em macro escala podem chegar a vários metros, o que não é possível reproduzir em laboratórios. Assim, os modelos computacionais se mostram uma alternativa promissora para complementar resultados. As técnicas de simulação baseadas em fluidodinâmica computacional proporcionam um recurso eficiente para estudo de escoamentos multifásicos dentro da indústria metalúrgica.

Este trabalho tem como objetivo desenvolver o estudo de um modelo matemático e numérico por CFD que descreva o escoamento multifásico em um reator de coluna de bolhas no processo de desgaseificação de metais a vácuo. Será observada a dinâmica das bolhas, incluindo sua composição e área interfacial de troca de massa. O modelo será aplicado ao processo de desgaseificação de aço, com foco na etapa do refino da liga para remoção do gás hidrogênio.

O presente projeto de pesquisa foi desenvolvido no âmbito do “Plano de Desenvolvimento Institucional na Área de Transformação Digital: Manufatura Avançada e Cidades Inteligentes e Sustentáveis (PDIP)” do Instituto de Pesquisas Tecnológicas de São Paulo (Processo Fapesp 2017/50348-2), na linha de pesquisa “Modelagem de Processos Bio-Físico-Químicos”. Sua realização estava prevista na proposta PDIP-IPT submetida à Fapesp. As atividades previstas no projeto de pesquisa são conduzidas nas instalações do IPT, mais precisamente no Laboratório de Processos Metalúrgicos, sob a supervisão do pesquisador-líder Mário Boccalini Jr, e com o apoio da equipe técnica formada pelo pesquisador André Luiz Nunis da Silva.

2. OBJETIVOS

2.1. OBJETIVOS GERAIS

A pesquisa tem como objetivo geral o desenvolvimento de um modelo fluidodinâmico robusto que incorpore a dinâmica das fases de um escoamento multifásico no tratamento do metal líquido para o refino do aço. Parâmetros como a velocidade de ambas as fases e distribuição da composição da fase gasosa em hidrogênio foram estudados dentro das condições do processo industrial.

2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Para tal, os seguintes objetivos específicos foram determinados:

- i. Desenvolvimento de um modelo fluidodinâmico rigoroso que inclua as equações governantes do escoamento multifásico, transporte de espécie e propriedades de escoamento turbulento. Dados disponíveis nos trabalhos de Nunis et al. (2015) e Sheng e Irons (1993) são usados para validação do modelo.
- ii. Estudar o efeito do fenômeno de turbulência induzida pelas bolhas (BIT) no cálculo das propriedades turbulentas do escoamento multifásico.
- iii. Tornar eficiente o modelo de transferência de hidrogênio entre as fases, ou seja, obter informações numéricas relevantes sem grandes exigências computacionais, adotando uma abordagem simplificada ao adicionar o cálculo da distribuição da área interfacial de troca pela correlação de Besagni et. al (2018). A variação da concentração de hidrogênio no reator e sua taxa de remoção são os parâmetros determinantes para a análise dos modelos.
- iv. Possibilitar a implementação de um modelo adequado às circunstâncias de um ambiente industrial para estudo de diferentes configurações de sistema a fim de promover melhorias técnicas e operacionais no equipamento.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1. REFINO DE METAL POR SISTEMA DE COLUNA DE BOLHAS

A indústria metalúrgica é conhecida como indústria de base por ser responsável por fornecer metais, ferrosos e não-ferrosos, em forma de produto que servirá como matéria-prima para a cadeia de produção de outras indústrias. A indispensabilidade desse setor mantém contínuo o seu crescimento que, de acordo com a ABM (Associação Brasileira de Metalurgia, Materiais e Mineração), aumentou 6,2% no primeiro trimestre de 2021.

A fabricação de aço envolve uma série de processos (Figura 1) que convertem ferro em um aço com uma composição química específica. A composição do metal, porém, depende das exigências do produto final para o qual ele será usado como matéria-prima, podendo variar. Aços com nitrogênio, em relação ao aço com carbono, apresentam maior estabilidade às transformações de fase e aumentam a resistência à corrosão, porém, são mais suscetíveis à deformação plástica. Já o aço com carbono acelera a degradação do material em ambientes agressivos. O hidrogênio, por sua vez, é responsável pelo fenômeno chamado de fragilização por H₂ (*hydrogen embrittlement, HE*), e sua remoção do metal é indispensável, independente da sua aplicação final. (GAVRILJUK; 2010)

As principais etapas desse processo de fabricação são o refino primário, refino secundário e o lingotamento. No refino primário, a sucata de aço passa ou por um Conversor a Oxigênio (OSM) ou por um Forno de Arco Elétrico (EAF), para a remoção de impurezas. Ao longo desse processo, o metal fundido pode absorver gases provenientes da atmosfera, como é o caso do hidrogênio, ou de reações do próprio metal com as paredes do molde. Por serem menos solúveis em metal solidificado, os gases adicionam uma porosidade ao material que tende a resultar na formação de flocos, fragilização e zonas vagas, diminuindo sua resistência e vida útil.

Para fins de controlar o teor desses gases e produzir metal de alta qualidade, é indispensável que o metal líquido passe por um refino secundário em que ocorre a desoxidação, dessulfurização e desgaseificação a vácuo (FRUEHAN; 1998). A história deste último aplicado ao tratamento de metais data dos anos 50. Naquela época era

primordialmente usada na remoção de hidrogênio, até que uma nova família de aço, os chamados *Ultralow-carbon steels* (ULC), surgiu no mercado com uma alta valorização. Desde então, a desgaseificação a vácuo também é fortemente usada para a fabricação de aços com baixos teores em carbono (hoje chamado de desoxidação) e nitrogênio, sendo uma etapa necessária para obtenção de aço IF (*Interstitial-free*), muito valorizado pela indústria por apresentar baixo teor de carbono e nitrogênio em sua solução sólida (KOR, GLAWS; 1998).

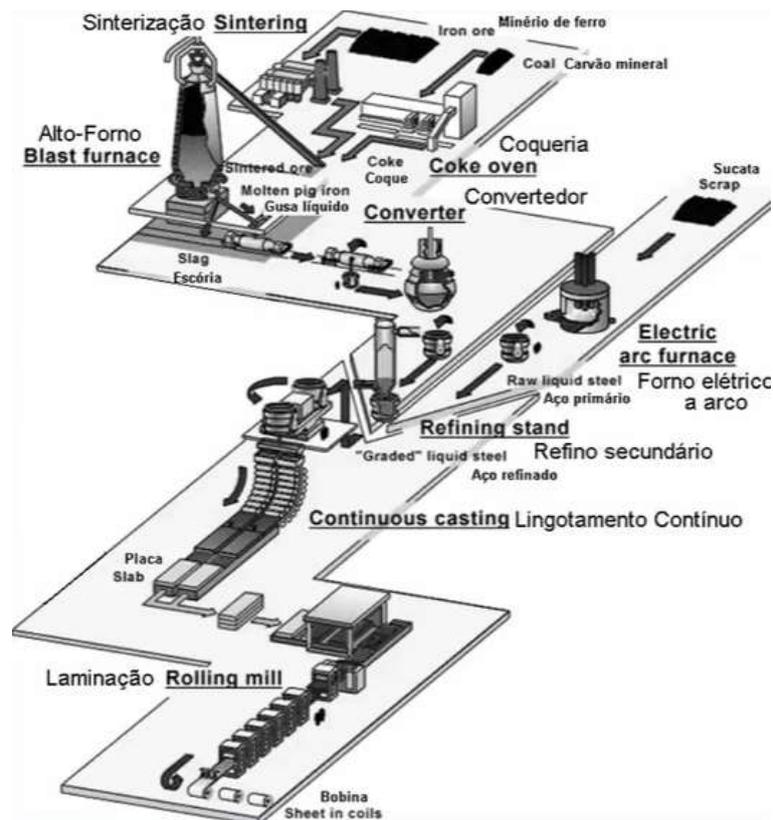


Figura 1. Etapas de fabricação de aço. Referência: Prof. Roberto Parreiras Tavares, UFMG. Ansys Talks Online, 18/08/2020.

A desgaseificação a vácuo consiste em um processo bifásico em que o metal fundido a altas temperaturas é submetido a pressões muito baixas (< 1 mbar) enquanto um gás inerte, geralmente o argônio, é inserido pela base da panela. A agitação provocada pela injeção de gás permite a homogeneização química e térmica do material líquido além de promover o contato constante entre as duas fases e, conseqüentemente, permitir reações químicas entre elas. Esse tipo de processo pode ser categorizado como uma coluna de bolhas, sistema que tem sido muito estudado por ser altamente utilizado em diversos tipos de indústrias.

3.1.1. Regimes de fluxo em coluna de bolhas

Colunas de bolhas podem ser projetadas em diversas configurações. A fase líquida pode se encontrar em batch ou em contracorrente, ou co-corrente, com a fase gasosa. O plug injetor de gás pode estar posicionado na lateral inferior da parede ou na base da coluna, centralizado ou não, etc. Apesar da simplicidade de suas configurações, o projeto e operação das colunas de bolhas são dependentes da compreensão das complexas interações fluidodinâmicas em diferentes escalas (escala molecular, escala de bolhas, escala laboratorial e escala industrial).

Na escala de bolhas e na escala laboratorial, o estudo se concentra no formato e distribuição de tamanho das bolhas, e nos regimes de fluxo e recirculação da fase líquida, respectivamente. As informações fluidodinâmicas nessas escalas podem ser quantificadas através da estimativa das propriedades fluidodinâmicas locais (velocidade superficial da bolha, distribuição do tamanho, entre outras) e globais (dissipação de energia turbulenta, tempo de residência da bolha, entre outras). (BESAGNI; 2018)

Besagni et al. (2018) realizaram uma extensa revisão sobre a fluidodinâmica das colunas de bolhas na escala laboratorial. Sua pesquisa concluiu que os parâmetros de projeto e as propriedades das fases não influenciam as características principais dos regimes de fluxo, mas influenciam o ponto de transição entre esses regimes. Como exemplo, ao aumentar a vazão de entrada e, conseqüentemente, a velocidade superficial do gás, o regime se modifica no seguinte sentido: (1) de homogêneo mono disperso (com distribuição do tamanho de bolhas mono dispersa, geralmente ocasionada por injetores de gás de poros finos) para pseudo-homogêneo (com maiores tamanhos de bolhas na distribuição); (2) de pseudo-homogêneo para regime de transição (com formação de bolhas por coalescência); (3) de regime de transição para regime heterogêneo (com nítida presença de quebra e coalescência de bolhas); (4) de regime heterogêneo para *slug-flow* ou *anular-flow* (pouco observados em aplicações industriais).

Na literatura, o foco dos estudos se concentra principalmente nos pontos de transição entre os regimes pseudo-homogêneo, de transição e heterogêneo. Ainda de acordo com Besagni et al. (2018), a mudança do pseudo-homogêneo para o de transição, regimes mais comuns encontrados na prática, depende sobretudo do design e modo de

operação da coluna de bolhas, da viscosidade da fase líquida e das condições de pressão e temperatura a que o sistema está submetido.

Aspect ratio AR

A “razão de aspecto”, ou *aspect ratio*, *AR*, é definida aqui como a razão entre altura, *H*, e diâmetro da coluna, *D*. Em colunas com baixos valores de *AR*, o fluxo de recirculação não se encontra totalmente desenvolvido perto das paredes, o que implica que a maior influência ao regime se encontra próxima ao injetor e no topo da coluna. Thorat e Joshi (2004) fizeram experimentos em colunas com *AR* entre 1 e 8, e observaram uma desestabilização do regime (diminuição da velocidade superficial de transição entre os regimes) com o aumento do *AR*. Besagni et al. (2017) observaram um valor crítico de 5 para *AR* de colunas em modo batch para desestabilizar o regime homogêneo.

Projeto do injetor de gás

Distribuidores com diâmetros de abertura inferiores a 1 mm promovem um regime homogêneo mono disperso até em velocidades superficiais elevadas de gás. Nesses tipos de distribuidores, o efeito da tensão superficial, principalmente em altas vazões de gás, é considerado insignificante, enquanto em distribuidores com aberturas maiores, a força superficial exerce grande influência no contato e no tempo de aderência da bolha com o orifício (KULKARNI, JOSHI; 2005). Os distribuidores com diâmetros maiores que 1 mm não produzem regimes mono dispersos, e regimes pseudo-homogêneos apenas em velocidades superficiais muito baixas. Safarri et al. (1999), Thorat e Joshi (2004) e Sal et al. (2013) observaram que a velocidade superficial de transição diminui com o aumento do diâmetro da abertura do injetor de gás ($d_o = 0,0015$ m; $d_o = 0,0008-0,05$ m; $d_o = 0,001-0,003$ m; respectivamente).

Viscosidade da fase líquida

Besagni et al. (2018) usaram o termo “efeito duplo” para descrever o efeito da viscosidade da fase líquida no regime em uma coluna de bolhas. Líquidos com viscosidades altas ou moderadas (tendo a viscosidade da água como referência) tendem a estabilizar o regime homogêneo, apesar de provocarem um aumento na coalescência das bolhas e um retardo no desprendimento da bolha do plug injetor. Viscosidades

baixas também provocam uma estabilização do regime, mas devido à diminuição da coalescência de bolhas e, por consequência, aumento do número de bolhas de tamanhos menores. Rabha et al. (2014) observaram que em uma coluna com valor de AR igual a 21, abertura do orifício de 1 mm e sendo a viscosidade de líquidos superiores a 5,18 – 8,94 mPa.s, o regime homogêneo já não é mais observado. Já Kulkarni e Joshi (2005) sugerem que líquidos com viscosidades baixas não afetam a formação das bolhas, enquanto viscosidades altas produzem bolhas de diâmetros maiores em baixas vazões de gás.

Pressão e temperatura

O aumento da pressão tende a estabilizar o regime homogêneo devido ao retardo na coalescência e à maior frequência na quebra de bolhas, apesar de reduzir a velocidade da fase gasosa. Em distribuidores com diâmetros de abertura pequenos, como os distribuidores porosos, a influência da pressão sobre a formação das bolhas chega a ser desprezível em relação à de outros parâmetros, como a temperatura. O aumento da temperatura diminui a viscosidade da fase líquida e reduz o efeito das forças de tensão superficial, facilitando o fenômeno de quebra e a formação de bolhas menores (BESAGNI, 2018).

Formato das bolhas

De acordo com Besagni et al. (2018), a estabilização do regime homogêneo está atrelada à distribuição do tamanho de bolhas, cujo tamanho e formato têm papel significativo na área interfacial de troca. O formato das bolhas depende de variáveis do sistema que são acopladas através dos números adimensionais Eötvös (Eo), Morton (Mo), Reynolds (Re) e Weber (We).

$$Eo = \frac{g\rho_L d_{eq}^2}{\sigma} \quad (1)$$

$$Mo = \frac{g(\rho_L - \rho_g)\mu_L^4}{\rho_L^2 \sigma^3} \quad (2)$$

$$Re = \frac{\rho_L u_b d_{eq}}{\mu_L} \quad (3)$$

$$We = Re^2 \left(\frac{Mo}{Eo} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (4)$$

Sendo u_b = velocidade superficial, d_{eq} = diâmetro equivalente da bolha, $(\rho_L - \rho_g)$ = diferença entre as densidades dos fluidos, μ_L = viscosidade da fase líquida, σ = tensão superficial e g = gravidade.

O número de Eötvös indica o efeito da aceleração da gravidade em relação ao efeito da tensão superficial, porém, ele depende do diâmetro equivalente da bolha, o qual muda com o tempo. Nos casos transientes, o número de Morton é, portanto, mais usado, já que depende exclusivamente das propriedades dos fluidos. Em fluxos em que os efeitos da tensão superficial ou das forças viscosas são superiores às das forças inerciais, as bolhas se mantêm em um formato esférico. Chao (1962) sugere que bolhas de ar em água têm um formato esférico até o valor de Re limite de 400, superior a isso elas tendem a se achatar até alcançar um formato esférico. O número de Weber representa a estabilização da força de tensão superficial por forças hidrodinâmicas. Quanto maior o n° de Weber, maior parte da energia injetada ao sistema é transformada em energia cinética, tornando-a dominante. No caso contrário, quanto menor o n° de Weber, mais a tensão superficial é dominante, indicando maior dificuldade de formação de bolhas.

3.1.2. Dinâmica de um sistema de desgaseificação a vácuo

O projeto de pesquisa será aplicado a um sistema de desgaseificação a vácuo em que gás argônio é injetado na base da coluna para promover a remoção de gás hidrogênio contido em um banho de metal fundido. Bannenberg et al. (1992) propuseram um modelo matemático baseado em métodos experimentais para esse sistema metal-hidrogênio. Em sua pesquisa, são destacados diversos fatores que influenciariam na eficácia da eliminação de gases durante a desgaseificação a vácuo, dentre eles estão:

- i. O enxofre presente no metal líquido, assim como outros elementos ativos presentes na superfície do banho como o oxigênio, prejudica o processo no caso da desnitração (remoção de gás nitrogênio) ao contaminar a interface gás-líquido e por consequência diminuir a dessorção do nitrogênio pelas bolhas de argônio. O ideal seria ter uma concentração inferior a 20ppm de enxofre no banho (KOR, GLAWS; 1998). Essa limitação não se aplica ao presente caso, de desidrogenação (remoção de gás hidrogênio).
- ii. A eliminação dos gases é favorecida quando o volume de gás argônio introduzido ao banho é alto. De acordo com Bannenberg et al. (1992), para se

atingir 1 ppm de hidrogênio ao final do tratamento em uma coluna de metal com área transversal de 1 m² operando em pressões abaixo de 10mbar, seria necessário o uso de pelo menos 20 Nm³ de argônio.

- iii. A vazão de gás argônio tem influência de forma contrária. Em valores elevados, as bolhas de gás acabam por ter um menor tempo de contato com o metal e, portanto, com os gases a serem eliminados. Além disso, em sistemas de líquido estagnado, a vazão do gás argônio tem influência sobre o tamanho das bolhas: vazões maiores levam a bolhas de diâmetros maiores (THOMAS, DENNISOV, BAI; 1997). O tamanho das bolhas surge como uma limitação ao modelo de Bannenberg et al. (1992) por não ter sua distribuição bem definida.
- iv. A pressão de vácuo aplicada ao sistema tem grande impacto sobre o desempenho do processo. Variando a pressão entre 1 e 10 mbar é possível atingir valores finais de hidrogênio abaixo de 1ppm no metal líquido. Para pressões de até 100 mbar, uma concentração de 2ppm de hidrogênio ao final do tratamento pode ser alcançada. Em pressões superiores, a eliminação é comprometida.

Outro fator de grande importância para o desempenho do tratamento é a compreensão da dinâmica das bolhas injetadas ao sistema. Smith (1998) reuniu algumas das principais descobertas com base em resultados experimentais sobre a dinâmica da fase dispersa:

- i. De acordo com os experimentos realizados por Tacke et al. (1985) em sistemas ar/água, a expansão das bolhas ocorre de forma totalmente linear, enquanto em sistemas hélio/água e nitrogênio/mercúrio uma expansão lateral também é observada.
- ii. Duas etapas definem a ascensão das bolhas: a primeira é a ascensão da bolha dentro do metal líquido e a segunda é a bolha atravessando a superfície líquida (XU; 2014). Com exceção da região próxima à injeção de gás, onde o fluxo é predominantemente dominado pela inércia, ao longo da pluma de bolhas o fluxo é impulsionado pela flutuabilidade e a velocidade relativa de ascensão das bolhas pode ser considerada a velocidade terminal de uma bolha individual. Essa zona de pluma de bolhas é fundamental para a compreensão do processo, já que

nela ocorre grande parte da transferência de massa e calor do sistema (LOU, ZHU; 1985).

- iii. Em sistemas com distribuidores simples de gás, foram visualmente observados, pela dinâmica das bolhas, três regimes de escoamento:
 - Zona primária de bolhas, região dominada pela inércia onde ocorre o despreendimento da bolha do orifício de injeção. Nessa zona, a vazão de gás e a forma de injeção têm forte influência no tamanho das bolhas, assim como na sua expansão e velocidade.
 - Zona livre, dominada pela flutuabilidade que permite a ascensão livre com poucas quebras de bolhas e independe das condições de entrada.
 - Zona de pluma, onde é observado um maior espectro de tamanho de bolhas devido a quebras e coalescência. As quebras são principalmente promovidas pela turbulência da fase líquida que resulta na instabilidade da superfície de bolhas maiores.
- iv. Em sistemas com distribuidores porosos com baixas vazões de gás, é normal haver a formação de uma população uniforme de bolhas com pouca evidência de quebras ou coalescência. Ao aumentar a vazão de gás, é observada a coalescência de bolhas próximas ao distribuidor e a formação de uma camada de bolhas na superfície da fase líquida. A zona livre, que ocorre com sistemas com distribuidores simples, parece não existir nesse sistema.

3.1.3. Termodinâmica do processo de desidrogenação

A remoção do gás hidrogênio presente no metal, ou desidrogenação, ocorre à medida que o gás argônio introduzido no sistema percorre o volume de metal e captura as moléculas de hidrogênio nele dissolvidas. Para entender melhor os fatores que influenciam o desempenho da desidrogenação é importante quantificar o hidrogênio dissolvido no metal e como ele se encontra distribuído. A taxa de remoção de hidrogênio do metal é decorrente da transferência de massa na superfície das bolhas de argônio ou na superfície do banho do metal. Nessa área de troca, os átomos de hidrogênio e o hidrogênio molecular ($\frac{1}{2}H_2 \rightarrow H$) estão em equilíbrio termodinâmico de

acordo com a lei de Sievert: “A concentração em equilíbrio do hidrogênio dissolvido no metal é proporcional à raiz quadrada da pressão parcial de H₂”.

A concentração em equilíbrio de hidrogênio é determinada mediante a pressão parcial de hidrogênio na fase gasosa dada pela Equação 5.

$$[H]_{eq} = Kp^{1/2} \quad (5)$$

Sendo K a constante de equilíbrio definida como:
$$K = \frac{\exp\left(\frac{-\Delta\bar{H}}{RT}\right)}{f_H} \quad (6)$$

O diagrama de pressão-temperatura-composição (Figura 2) é bastante usado para sistemas metal-hidrogênio. Nele está representado um esquema das isotermas dadas como lineares de acordo com a lei de Sievert para baixas concentrações de hidrogênio (BAMBAKIDIS; 1980).

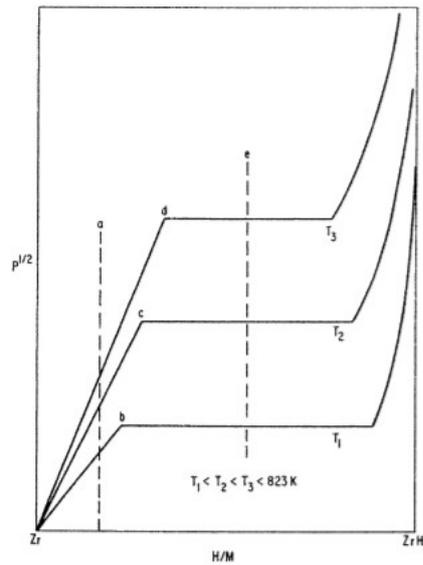


Figura 2. Esquema de isotermas pressão-composição para sistemas Zr-ZrH₂ (BAMBAKIDIS; 1980).

O valor de K varia mediante a adição de elementos ligantes à liga metálica. O coeficiente de atividade do hidrogênio, f_H , é determinado de acordo com o coeficiente de interação correspondente para cada elemento ligante Zr (Equação 7), sendo definido por métodos experimentais (KAROUNI; 2018).

$$\log f_H = \sum e_H^Z [\%_{wt}Zr] \quad (7)$$

3.2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DOS FENÔMENOS FÍSICO-QUÍMICOS

Apesar de sua importância na produção de aços de alta qualidade, a desgaseificação a vácuo é um processo do qual os fenômenos físicos permanecem pouco compreendidos. Uma das desvantagens do tratamento a vácuo em uma panela de metal é a impossibilidade de se coletar amostras de metal fundido para acompanhamento da evolução da remoção dos gases e da temperatura do banho (KLEIMT et al., 2003). Para compensar essas limitações, são gerados modelos numéricos capazes de descrever o avanço dos principais parâmetros do processo.

Para tal, os modelos fazem uso das equações de Navier-Stokes, sendo elas as equações de energia, transporte de espécies e modelos de propriedades turbulentas. Outras equações podem ser adicionadas ao modelo para incluir diferentes fenômenos particulares de cada caso, como o Balanço Populacional, usado para estudar a distribuição do tamanho das bolhas por quebra e coalescência. Os modelos a serem acoplados dependem da natureza do escoamento e do objetivo do estudo.

3.2.1. Forças de interação entre dois fluidos

Em geral, sistemas multifásicos exigem uma modelagem mais criteriosa devido à complexidade da interação entre as fases. Em sistemas gás-líquido, a introdução do gás no líquido permite que as bolhas se transformem, colidam e quebrem à medida que interagem entre si ou com o líquido. Essas interações são decorrentes de forças interfaciais que atuam sobre os fluidos. Em caso de coluna de bolhas, as forças interfaciais são principalmente: força de arraste, força de sustentação, força de massa virtual e força de dispersão turbulenta.

As forças interfaciais são adicionadas aos modelos através de termos fontes nas equações de conservação e são expressas pela soma linear de todas as forças atuantes. Apesar dos inúmeros modelos existentes na literatura, eles ainda são considerados como insuficientes para serem aplicados a simulações computacionais. Chuang e Hibiki (2017) realizaram uma extensa revisão bibliográfica dos modelos de forças interfaciais usados em simulações numéricas para escoamentos bifásicos, e apontaram que os desvios observados ao usar os modelos em simulações podem ser, em parte, decorrentes de uso inadequado dos dados de validação. Grande parte dos modelos é validada com dados de estados estacionários, enquanto algumas forças (como causada pela massa

virtual) só atuam em estados transientes. Outro problema é a escassez de dados experimentais para diferentes configurações de equipamentos; parâmetros como geometria, dimensão, orientação do fluido e condições operacionais devem ser levados em conta quando escolhidos dados para validação. Atualmente, as pesquisas têm como principal foco adaptar os coeficientes dos modelos para que sejam corretamente aplicados a cada sistema (CHUANG, HIBIKI, 2017; ZHANG et. al, 2006; LOU, ZOU, 2013).

3.2.1.1. Força de arraste

A força de arraste pode ser considerada como a principal contribuinte às forças de interação dos fluidos. Ela representa a resistência atuante em direção oposta ao movimento da bolha descrita pela velocidade relativa dos fluidos e pelo coeficiente de transferência:

$$F_d = K_{gl}(\bar{u}_g - \bar{u}_l) \quad (8)$$

$$K_{gl} = \frac{3\alpha_g \alpha_l \rho_l C_d}{4d_b} |\bar{u}_g - \bar{u}_l| \quad (9)$$

Na Equação 9, C_d é o coeficiente de arraste e grande maioria das suas definições são baseadas no número de Reynolds. A correlação entre C_d e Re representa a relação entre a velocidade superficial da bolha e seu tamanho/formato. A viscosidade da fase contínua resulta em uma força de arraste que desacelera a partícula no interior de um fluido. As forças viscosas são dominantes em regimes com baixos valores de Re em que as bolhas possuem formato predominantemente esférico e seu diâmetro aumenta com a velocidade terminal. Quando as forças inerciais e a tensão superficial são dominantes em relação à força viscosa, as bolhas já não mantêm em seu formato esférico devido à diminuição da contribuição da força de arraste e aumento de sua velocidade superficial. (KULKARNI, JOSHI; 2005)

Alguns dos modelos para o cálculo do C_d estão no Anexo AN1 e são: Schiller e Naumann, Morsi e Alexander, Grace et al., Tomiyama et al., Ishii e Zuber e Kolev. Dentre os modelos de Tomiyama et al. (1999) e Ishii-Zuber (1979), Chuang e Hibiki (2017) alegam que o desempenho do modelo de Tomiyama et al. (1999) é superior ao de Ishii-Zuber (1979) em um regime de bolhas esféricas, em que as forças viscosas são dominantes, além de já ter sido validado com dados reais para uma grande faixa de

valores de Reynolds. Zhang et al. (2006) observaram que o modelo de Tomiyama et al. (1999) provocava um aumento no coeficiente de arraste em relação aos dados reais, promovendo uma redução na velocidade da fase gasosa e um aumento da retenção das bolhas no sistema. O modelo de Tomiyama et al. (1999) se mostra eficiente quando se quer considerar efeitos de contaminantes em líquidos, como apontado por Gemello et al. (2019). O modelo de Ishii-Zuber (1979) considera os diferentes formatos das bolhas (esférico, elipsoidal e *cap*) e foi validado para uma ampla gama de número de Reynolds (RZEHACK et al.; 2012).

De acordo com Lou e Zhu (2013), o coeficiente de arraste tem grande influência no modelo. Dentre os modelos de Tomiyama et al., Ishii-Zuber e Kolev, este último foi o que melhor se adaptou ao sistema estudado por Lou e Zhu (2013) (sistema água-ar com dimensões 500x420mm e diâmetro de injetor 4mm), enquanto nos dois primeiros modelos o coeficiente foi superestimado, o que levou a um aumento na velocidade do líquido e a uma diminuição em sua energia cinética turbulenta.

3.2.1.2. Força de sustentação

A força de sustentação atua na direção lateral do fluxo da bolha e é, portanto, a responsável pela sua expansão lateral. Ela é mais significativa em bolhas maiores por serem mais suscetíveis ao cisalhamento do líquido (CHUANG, HIBIKI; 2017).

$$F_{sustentação} = -C_l \rho_l \alpha_g (\vec{u}_l - \vec{u}_g) \times (\nabla \times \vec{u}_l) \quad (10)$$

Sendo o C_l o coeficiente de força de sustentação para o qual são atribuídos os modelos do Anexo AN2.

Apesar da variedade de modelos para C_l , não existe na literatura um modelo preciso o suficiente para a força de sustentação, e por isso alguns autores preferem calibrar o C_l comparando os resultados numéricos e experimentais. Lou e Zhu (2013) testaram três valores (-0,05; 0; 0,5) para C_l , e observaram que ao aumentar o coeficiente a expansão radial da pluma de bolhas era maior. Apesar de observarem uma variação positiva na velocidade do líquido e na energia cinética quando diminuído o C_l de 0,5 para -0,05, os valores mais próximos dos dados reais foram obtidos com C_l próximo à zero. Logo, Lou e Zhu (2013) alegam que a força de sustentação não tem uma influência significativa sobre o fluxo da pluma de bolhas. Pflieger e Becker (2001) também obtiveram

resultados satisfatórios para o perfil de velocidade ao desconsiderarem a força de sustentação.

Zhang et al. (2006), obtiveram resultados diferentes de acordo com a altura da coluna. Em colunas menores (3m de altura), C_l igual a 0,5 foi mais adequado enquanto para o dobro de altura o modelo de Tomiyama et al. (1998) forneceu resultados mais coerentes com a literatura. Zhang et al. (2006) alegam também que a força de sustentação tem grande influência sobre a distribuição radial da velocidade, não importando a proporção da coluna. O coeficiente C_l pode mudar de sinal caso uma deformação significativa ocorra no formato das bolhas. Em bolhas esféricas, C_l é positivo para que a força de sustentação atue como desacelerador da velocidade da fase líquida (RZE HACK; 2013). Valores positivos de C_l provocam movimentação das bolhas em direção à parede, enquanto valores negativos direcionam as bolhas para o centro da pluma (TABIB et al.; 2008). De acordo com Gemello et al. (2019), o efeito da força de sustentação pode ser desprezível em simulações 3D de regimes heterogêneos, porém, significativas em simulações 2D.

3.2.1.3. Força de massa virtual

A força de massa virtual ocorre devido à aceleração das bolhas em relação à fase contínua. A força de massa virtual é usualmente adicionada à soma das forças quando a densidade da fase secundária é muito menor que a da fase primária (Ansys Fluent Theory Guide), sendo geralmente o caso de uma coluna de bolhas. Ela é dada por:

$$\vec{F}_{VM} = C_{VM} \alpha_g \rho_l \left(\frac{d_l \vec{u}_l}{dt} - \frac{d_g \vec{u}_g}{dt} \right) \quad (11)$$

Sendo C_{VM} o coeficiente de massa virtual que tem um valor padrão de 0,5 para escoamentos potenciais de bolhas esféricas (CHUANG, HIBIKI; 2017). Para bolhas elipsoidais, Tomiyama (2004) propõe que o C_{VM} deva ser tratado de forma diferente para as direções vertical e horizontal, formando um tensor com valores não nulos para o coeficiente na sua diagonal representando essas direções. No estudo de Zhang et al. (2006) foi observado que o efeito da força de massa virtual parece desprezível em todo domínio exceto na superfície do banho, onde ela provoca um aumento nas velocidades verticais de ambas as fases.

3.2.1.4. Força de dispersão turbulenta

A força de dispersão turbulenta representa as componentes flutuantes das forças atuantes sobre a bolha, ou seja, efeitos da flutuação turbulenta do fluido sobre a bolha. Ela decorre a partir da média do termo de arraste entre as fases (Ansys Fluent Theory Guide):

$$K_{gl}(\vec{u}_g - \vec{u}_l) = K_{gl}(\vec{u}_g - \vec{u}_l) - K_{gl}(\vec{u}_{dr}) \quad (12)$$

Sendo K_{gl} o coeficiente de transferência descrito para a força de arraste. O termo do lado esquerdo corresponde ao arraste instantâneo, enquanto o primeiro termo do lado direito é a média da transferência de quantidade de movimento entre as duas fases e o segundo é a dita força de dispersão turbulenta.

$$\vec{F}_{td} = -K_{gl}\vec{u}_{dr} \quad (13)$$

Sendo \vec{u}_{dr} a velocidade que representa a dispersão das bolhas pelo fluxo turbulento. Alguns dos modelos para a força de dispersão turbulenta são: Lopez de Bertodano, Simonin, Burns et al., Difusão em VOF (Anexo A3).

De acordo com Lou e Zhu (2013), a força de dispersão turbulenta governa o formato da pluma de bolhas devido ao fato dela considerar o efeito da frequência de flutuação turbulenta do líquido. Se esta última é desconsiderada, a pluma de bolhas desenha uma trajetória quase que constante na direção vertical, quando, em realidade, deveria haver uma dispersão lateral da pluma de bolhas.

3.2.2. Equações de Transporte

3.2.2.1. Abordagens

Dois abordagens matemáticas podem ser aplicadas para estudar o comportamento de bolhas em um escoamento multifásico: Euleriana-Lagrangeana e Euleriana-Euleriana. A abordagem escolhida para simulação de sistemas de fornos com aço fundido pode ser categorizada de acordo com a escala do processo (XU; 2015): o método Euleriano-Euleriano é recomendado para grandes escalas industriais (LOU, ZHU; 2013) e o Euleriano-Lagrangeano para escalas intermediárias (JOHANSEN, BOYSAN; 1988).

Na abordagem Euleriana-Lagrangeana, a fase contínua é modelada adotando-se as equações de conservação de massa e quantidade de movimento enquanto a fase dispersa é resolvida por meio de balanço de forças para cada partícula. As forças a serem consideradas dependem do tipo de escoamento e são selecionadas de acordo com sua relevância para o processo. Dentre essas forças estão: força de arraste, força de sustentação, forças referentes à interação com a parede e choques entre partículas, massa virtual, entre outras (STENMARK; 2013). Essa abordagem é computacionalmente mais custosa, pois a fase dispersa deve ser resolvida para cada partícula, e, portanto, é recomendada para sistemas em que essa fase se encontra diluída.

Na abordagem Euleriana-Euleriana, todas as fases são consideradas contínuas e interpenetradas, sendo recomendada para fluxos dispersos quando o intuito é investigar o comportamento geral das partículas, e não partículas individuais. Para tal, é adequado que o escoamento seja denso. As fases são modeladas e resolvidas por meio de múltiplos conjuntos de equações de conservação de quantidade de movimento linear e de continuidade para cada fase (modelo multi-fluidos), e acopladas via relações de interações entre elas. As simulações são realizadas simultaneamente para ambas as fases.

O uso da abordagem Euleriana-Euleriana em modelos de escoamentos multifásicos de colunas de bolhas tem sido objeto de pesquisa nos últimos anos. Johansen et al. (1988) apresentaram um modelo numérico para um sistema de forno com agitação a gás com o intuito de prever características do fluxo turbulento e da interação gás-líquido. Seu modelo conseguiu reproduzir quantitativamente as velocidades médias de escoamento e as propriedades turbulentas, para um tamanho médio de bolhas de gás. Lou et al. (2013) demonstraram que a abordagem Euleriana-Euleriana promove resultados mais condizentes que Euleriana-Lagrangeana em casos de escoamentos densos em sistemas metal-gás destacando a influência das forças de interface no processo, como força de dispersão turbulenta, força de arraste e força de sustentação. Yu e Louhenkilpi (2012) desenvolveram um modelo de turbulência $k-\epsilon$ para prever o comportamento do fluxo em um processo de desidrogenação em tanque de degaseificação a vácuo. Na mesma pesquisa foi adotado um modelo da área de concentração interfacial (IAC) para as bolhas e foram analisadas duas equações fundamentais (Higbie e Danckwerts) do coeficiente de transferência de massa na simulação.

As equações governantes de um escoamento multifásico estão apresentadas na Figura 3. O termo fonte F representa a soma das forças interfaciais discutidas no tópico anterior.

Euler-Lagrange	Euler-Euler
$\frac{\partial \alpha_f \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_f) = S_{mass}$	$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{U}_k) = 0$
$\frac{\partial \alpha_f \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \mathbf{u}_f \mathbf{u}_f) = \alpha_f \nabla p - \alpha_f \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_f - S_p + \alpha_f \rho_f \mathbf{g} = 0$	$\frac{\partial \alpha_k \rho_k \mathbf{U}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{U}_k \mathbf{U}_k) = -\alpha_k \nabla p + \alpha_k \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_k + \alpha_k \rho_k \mathbf{g}_k + S_k = 0$
$\frac{\partial \mathbf{u}_p}{\partial t} = \sum \mathbf{F}$	$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{U}_k) = 0$

Figura 3. Equações governantes de escoamentos multifásicos para regimes homogêneos e pseudo-homogêneos (STENMARK; 2013).

Incluso à estrutura do Euleriano-Euleriano, o modelo multi-fluidos Volume de Fluido (VOF) considera as fases como distintas, assumindo que os dois ou mais fluidos são completamente imiscíveis. O método usa um indicador para definir cada uma das fases. Caso o indicador tenha o valor de 1 ou 0, o volume de controle se encontra em uma das fases, mas com o indicador marcando um valor intermediário entre 0 e 1, existe uma interface entre os fluidos no volume de controle. Apenas um conjunto de equações é calculado para as fases, sendo assim elas compartilham do mesmo campo das variáveis multifásicas. Logo, as variáveis e as propriedades nas células computacionais são apenas representações de uma das fases ou de um elemento de mistura entre elas, dependendo do valor do indicador, e por isso é uma abordagem recomendada para sistemas multifásicos compostos por fluidos de densidades próximas. Apesar desse fato, Horvath et al. (2009) evidenciaram a aplicação do método em sistemas de colunas de bolhas água-ar por meio de simulações realizadas em dois programas de CFD (OpenFOAM e Fluent ANSYS), porém, ambos os *solvers* superestimaram o campo de velocidade da fase dispersa. Já Aktar et al. (2007) desenvolveram um estudo sobre o efeito de parâmetros operacionais (velocidade superficial do gás) e de projeto (tamanho do distribuidor de gás) sobre uma cadeia contínua de bolhas em uma coluna de líquido usando o método VOF, obtendo resultados numéricos próximos aos experimentais. Ainda assim, o método VOF é principalmente aplicado a sistemas onde há uma interface bem definida entre as fases (LIU et. al; 2018), como foi feito por Xu et al. (2014) que utilizaram o modelo VOF para caracterizar a interface entre gás argônio e

metal líquido considerando um fluxo laminar para a ascensão das bolhas de gás. Os mesmos autores também usaram o VOF para estudar a dinâmica das bolhas em termos de sua trajetória, formato, velocidade terminal e jatos de gotículas de metal formadas à medida que o gás era liberado na atmosfera. Outro modelo, desenvolvido por Llanos et al. (2010), adotou o método de volume de fluido para modelar um sistema trifásico (considerando a escória como terceira fase). Com os resultados obtidos para duas configurações diferentes de injeção de gás, concluiu-se que a terceira fase seria indispensável em simulações numéricas de processos em painéis de metal líquido.

Em termos de esforços computacionais, o modelo Euleriano-Euleriano se torna custoso devido aos múltiplos conjuntos de equações de conservação que são calculadas para cada fase separadamente, enquanto o custo computacional do modelo Euleriano-Lagrangeano depende principalmente do número de partículas que se deseja rastrear. Não obstante, a abordagem Euleriana-Euleriana é a mais utilizada para modelar processos da indústria metalúrgica e permite a inclusão de diversos fenômenos ao seu corpo de modelo (LIU et al.; 2018), como quebra e coalescência de bolhas, turbulência, forças interfaciais entre fases.

3.2.2.2. Turbulência

Em escoamentos com altos valores de Reynolds, as propriedades variam de maneira desordenada e podem ser representadas pelos seus valores médios somados a componente flutuante no espaço e no tempo. Isso reflete a característica de um escoamento turbulento, em que há produção, transferência e destruição de energia (VERSTEEG, MALALASEKERA; 2007). A produção de energia é função da energia turbulenta cinética, κ (que representa o quanto de energia está contida nas flutuações) e da taxa de dissipação de energia cinética, ϵ .

Para incluir os efeitos das flutuações turbulentas devido ao movimento caótico do escoamento, foram desenvolvidos modelos de turbulência mais complexos para sistemas multifásicos quando comparados aos modelos de sistema monofásico (Ansys Fluent Theory Guide). Tais modelos têm papel fundamental na predição do campo de velocidade de uma pluma de bolhas e de escoamentos multi-dimensionais.

O modelo κ - ϵ é baseado nas equações de transporte para a energia cinética de turbulência κ e sua dissipação ϵ (Figura 4), tendo como suposições que o escoamento é

inteiramente turbulento e os efeitos da viscosidade molecular são desprezíveis (Ansys Fluent Theory Guide). Esse modelo se tornou popular na indústria devido ao fato de apresentar três características bem equilibradas em sua aplicação para uma ampla gama de fluxos turbulentos: robustez, economia e precisão. Desde sua criação, foram derivados mais outros dois modelos com o intuito de melhorar seu desempenho (modelo RNG κ - ε e *realizable* κ - ε).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon$$

Figura 4. Equações de transporte do modelo κ - ε (Ansys Fluent Theory Guide).

G_k = geração de energia cinética turbulenta devido a gradientes de velocidade.

G_b = geração de energia cinética turbulenta devido à flutuabilidade.

Y_M = contribuição da dilatação flutuante na turbulência compressível para a taxa de dissipação geral.

$C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ e $C_{3\varepsilon}$ são constantes e σ_ε e σ_k são os números de Prandtl turbulentos para ε e κ , respectivamente, determinados experimentalmente: $C_{1\varepsilon} = 1,44$; $C_{2\varepsilon} = 1,92$; $\sigma_\varepsilon = 1,3$; $\sigma_k = 1,0$.

μ_t é a viscosidade turbulenta calculada por :

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (14)$$

sendo $C_\mu = 0,09$ uma constante.

S_k e S_ε são termos fontes para κ e ε , respectivamente, determinados por funções definidas pelo usuário (UDFs) para cada caso particular. Elas serão discutidas posteriormente para o caso de coluna de bolhas.

O modelo κ - ω é baseado nas equações de transporte para a energia cinética de turbulência κ e a taxa específica de dissipação ω (a qual pode ser considerada como a razão entre ε e κ) (Figura 5).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k - Y_k + S_k$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \omega u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right) + G_\omega - Y_\omega + S_\omega$$

Figura 5. Equações de transporte do modelo κ - ω .

G_ω = geração da taxa específica de dissipação.

Γ_κ e Γ_ω são as difusividades efetivas de κ e ω , respectivamente.

Y_ε e Y_ω são as dissipações de κ e ω devido a turbulência.

A viscosidade turbulenta nesse caso é calculada combinando κ e ω :

$$\mu_t = \alpha^* \frac{\kappa^2}{\omega} \quad (15)$$

A plataforma computacional Ansys Fluent disponibiliza três métodos para modelar a turbulência no contexto dos modelos κ - ε e κ - ω : modelo turbulento de mistura, modelo turbulento dispersado, modelo turbulento para cada fase. No Anexo AN5 estão resumidas as equações para os três métodos no modelo κ - ε , o mesmo raciocínio pode ser desenvolvido no modelo κ - ω .

Apesar dos dois modelos apresentarem resultados bem próximos quando aplicados a um sistema de coluna de bolhas (EKAMBARA, DHOTRE; 2010), o modelo κ - ε é o mais utilizado quando se trata de processos metalúrgicos devido a sua capacidade de captar informações numéricas de uma ampla gama de tamanhos de turbilhões (LIU et al.; 2018).

Entretanto, ambos os modelos em seu formato padrão não podem ser diretamente aplicados a uma coluna de bolhas, pois não incluem o cisalhamento viscoso associado ao fenômeno de turbulência gerada pela fase dispersa na fase líquida por forças de interação entre elas (SHENG, IRONS; 1993). É, portanto, recomendável acrescentar o fenômeno de turbulência induzida pelas bolhas (BIT) ao modelo, o que pode ser realizado através de duas abordagens: adicionando um termo de BIT à viscosidade efetiva (SATO, SEKOGUCHI; 1975) ou adicionando termos fontes às equações dos modelos turbulentos.

Vários modelos para os termos fontes já foram desenvolvidos, dentre eles dois se encontram disponíveis no *software* Ansys Fluent (SIMONIN, VIOLLET, 1990; TROSHKO, HASSAN, 2001) para aplicação direta, conforme a Tabela 1. Outros modelos (PFLEGER, BECKER; 2001, KATAOKA, SERIZAWA; 1989) podem ser compilados no programa através de funções definidas pelo usuário (UDFs).

Tabela 1. Modelos de termos fontes para turbulência induzida pelas bolhas (Ansys Fluent Theory Guide).

Modelo	Termos fontes para BIT
Simonin-Viollet (SIMONIN, VIOLLET; 1990)	$\Pi_{k_q} = C_s \sum_{p=1}^M \frac{K_{pq}}{\alpha_q \rho_q} X_{pq} (k_{pq} - 2k_q) + C_s \sum_{p=1}^M \frac{K_{pq}}{\alpha_q \rho_q} X_{pq} \vec{v}_{pq} \cdot \vec{v}_{dr}$; $\Pi_{\varepsilon_q} = C_{3\varepsilon} \frac{\varepsilon_q}{K_q} \Pi_{k_q}$
Troshko-Hassan (TROSHKO, HASSAN; 2001)	$\Pi_{k_q} = C_{ke} \sum_{p=1}^M \frac{K_{pq}}{\alpha_q \rho_q} \left \vec{U}_p - \vec{U}_q \right ^2$; $\Pi_{\varepsilon_q} = C_{td} \frac{1}{\tau_p} \Pi_{k_q}$; $\tau_p = \frac{2C_{VM} d_p}{3C_D \left \vec{U}_p - \vec{U}_q \right }$

Nos modelos de Troshko e Hassan (2001), Kataowa e Serizawa (1989) e Pflieger e Becker (2001), o termo fonte representa o trabalho exercido pela bolha calculado através das forças interfaciais e velocidades relativas, enquanto no modelo de Simonim e Viollet (1990), o segundo termo a direita da equação de Π_{k_q} representa a turbulência derivada da velocidade média atingida por partículas carregadas (*drift velocity*).

Sato e Sekoguchi (1975) propuseram uma maneira alternativa para adicionar os efeitos das flutuações da velocidade da fase líquida ao interagir com a movimentação da fase dispersa. Em vez de adicionarem termos fontes explicitamente nas equações de transporte, o que acrescenta complexidade ao modelo, Sato e Sekoguchi (1975) sugeriram que a tensão de cisalhamento total é derivada de três componentes (Equação 16): viscosidade do líquido, transferência de quantidade de movimento resultante da turbulência e transferência de quantidade de movimento resultante da agitação das bolhas (SCHWARZ; 2015).

$$\mu_{eff} = \mu_M + \mu_t + \mu_{BIT} \quad (16)$$

Sendo: μ_M = viscosidade molecular.

μ_t = viscosidade turbulenta.

μ_{BIT} = viscosidade turbulenta induzida pelas bolhas, dada por:

$$\mu_{BIT} = \rho_l \alpha_g C_{\mu,BIT} d_g \left| \vec{u}_g - \vec{u}_l \right| \quad (17)$$

$C_{\mu,BIT}$ é uma constante de valor 0,6; a velocidade relativa e o diâmetro da fase dispersa representam a velocidade e a escala de tempo, respectivamente.

Zang et al. (2006) compararam diferentes modelos (SATO, SEKOGUCHI; 1975, TROSHKO, HASSAN; 2001, PFLEGER, BECKER; 2001) para BIT em sistemas

ar-água. Foi constatado sobre o modelo de Sato e Sekoguchi (1975) que a viscosidade turbulenta induzida pelas bolhas tem um efeito insignificante nas flutuações turbulentas quando comparada com a turbulência por cisalhamento. De acordo com Sokolichin et al. (2005), a viscosidade turbulenta μ_{BIT} é quase duas ordens de magnitude menor que viscosidade turbulenta μ_t . Na revisão de Schwarz (2015) sobre modelos BIT, a abordagem de Sato e Sekoguchi (1975) é apenas recomendada quando a componente de turbulência induzida pelas bolhas é dissipada onde foi gerada, o que só ocorre quando essa escala for menor do que àquela onde a componente de turbulência convencional foi gerada. Na ausência de qualquer modelo BIT, o fluxo da fase dispersa parecia quase estacionário, discordando com os resultados experimentais de Deen et al. (2001), o que seria corrigido adicionando os termos fontes de BIT.

3.2.2.3. Transporte de espécies

No que diz respeito ao transporte de massa em colunas de bolhas, a compreensão da movimentação das bolhas na fase líquida e do líquido entorno das bolhas é fundamental para a modelagem. A intensidade turbulenta provocada pela movimentação das fases facilita a interação entre micro turbilhões e partículas, intensificando a transferência de massa. Besagni et al. (2018) dizem que a taxa de transferência de massa k_{La} é produto de dois parâmetros principais: o coeficiente de transferência de massa da fase líquida, k , e a área interfacial de troca entre as fases A .

O transporte de espécies no *software* Ansys Fluent é calculado através da equação de convecção-difusão (Figura 6), pela qual, para cada fase k , é calculada a fração mássica para cada espécie, Y_i^k .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho^q \alpha^q Y_{i,q}) + \nabla \cdot (\rho^q \alpha^q \vec{v}^q Y_{i,q}) = -\nabla \cdot \alpha^q \vec{J}_{i,q} + \alpha^q R_{i,q} + \alpha^q S_{i,q} + \sum_{p=1}^n \dot{m}_{p,q}^i + \mathcal{R}$$

Figura 6. Equação de transporte de espécies (Ansys Fluent Theory Guide).

Onde: R_i^q = taxa de produção da espécie homogênea i pela reação química para a fase q .

$\dot{m}_{q,p}^i$ = transferência de massa entre espécies i e j da fase q para p .

\mathcal{R} = taxa de reação heterogênea.

S_i^q = termo fonte para adição de taxas extras de criação.

No que diz respeito à remoção de hidrogênio, Yu e Louhenkilpi (2012) explicam que ela pode ser realizada através de duas rotas: o hidrogênio é capturado pelas bolhas de argônio ao longo do banho até que a bolha seja liberada na superfície, ou pode ocorrer na própria superfície do banho. Porém, Yu e Louhenkilpi (2012) constataram que a taxa de remoção pela superfície do banho é mínima em relação à captura pelas bolhas.

Como mencionado na seção 3.1.3. *Termodinâmica do Processo de Desidrogenação*, a eliminação de hidrogênio pelas bolhas de argônio é regida pela Lei de Sieverts. Quando se trata de sua implementação nos *softwares* da Ansys (Fluent e CFX), ela é adicionada ao modelo através do termo fonte presente na equação de convecção-difusão e na equação de continuidade (YU, LOUHENKILPI, 2012; KAROUNI et al., 2018).

De acordo com Karouni et al. (2018) e Yu e Louhenkilpi (2012), o termo fonte é regido pelo gradiente de concentração entre o hidrogênio dissolvido no metal e o hidrogênio no metal em equilíbrio com a fase gasosa (Equação 19). O termo fonte para as diferentes fases é escrito conforme a Equação 19, respeitando a conservação de massa.

$$S_H^l = -S_H^g \quad (18)$$

$$S_H^l = kA\rho_l([H]_{eq} - [H]_l) \quad (19)$$

Onde: A = área interfacial de concentração.

k = coeficiente de transferência de massa.

Encontram-se estudos onde o coeficiente de transferência de massa é calculado por diferentes expressões: Higbie (1935), Lamont et al. (1970) e Bannenberg et al. (1992). Resultados obtidos por Yu e Loukenkilpi (2012) mostram melhor concordância da expressão de Lamont et al. (1970) (Equação 20) com dados experimentais do sistema de desgaseificação considerado em seu estudo.

$$k = 0,3 \left(D_H \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (20)$$

Já Bannenberg et al. (1992) faz uso da correlação de Higbie (1935) (Equação 21) onde o coeficiente de transferência de massa depende da hidrodinâmica do sistema metal/gás em termos de diâmetro da bolha, d_b , e sua velocidade média, u_b .

$$k = 0,59 \left(D_H \cdot \frac{u_b}{d_b} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (21)$$

Sendo a velocidade média u_b e o diâmetro de bolha d_b calculados pela velocidade superficial da bolha:

$$u_b = 22,15 * \sqrt{d_b} * v_s^{0,1126} \cdot 0,0431 * \log v_s \quad (22)$$

$$d_b = f_p * 0,9 * v_s^{0,44} \quad (23)$$

Para a área interfacial de troca A , algumas correlações propostas para sistemas água-ar são encontradas na literatura (VAN DIRENDONCK, 1968; GESTRICH, 1975; AKITA, 1974). Elas dependem, sobretudo, da fração volumétrica do gás e das propriedades dos fluidos. A correlação proposta por Van Dierendonck et al. (1968) é a seguinte:

$$A = 2,4 \left(\frac{\sigma}{\rho_L g} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{\mu_L u_b}{\sigma} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\rho_L \sigma^3}{g \mu_L^4} \right)^{\frac{1}{4}} \alpha_g \quad (24)$$

A correlação proposta por Gestrich e Krauss (1975) conta com parâmetros da geometria da coluna:

$$A = 26 AR^{-0,3} \left(\frac{\rho_L \sigma^3}{g \mu_L^4} \right)^{-0,03} \alpha_g \quad (25)$$

Já Akita e Yoshida (1974) propuseram uma correlação que considera o diâmetro da coluna de bolhas D :

$$A = \frac{1}{3D} \left(\frac{g d^2 \rho_L}{\sigma} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{g D^3 \rho_L^2}{\mu_L^2} \right)^{0,1} \alpha_g^{1,13} \quad (26)$$

3.2.3. Coalescência e quebra de bolhas

Uma abordagem usada para modelar a distribuição do tamanho de bolhas é empregar o modelo Euleriano-Euleriano acoplado ao modelo de Balanço Populacional. O balanço populacional é empregado em sistemas que envolvem a distribuição de tamanho da fase dispersa, a qual evolui de acordo com fenômenos físico-químicos ocorrendo no meio. Em sistemas de coluna de bolhas, as bolhas passam de uma distribuição monodispersa para polidispersa com o aumento da vazão de entrada de gás, devido ao surgimento de fenômenos como coalescência e quebra. Logo, uma equação

de balanço é aplicada para adicionar o efeito da hidrodinâmica da distribuição do tamanho de uma determinada população de partículas (sólidas, líquidas ou gasosas), juntamente com as outras equações de transporte do modelo.

Dentre os métodos de resolução da equação do balanço populacional tem-se o método discretizado (*Discrete Method*), método padronizado de momentos (SMM) e método de quadratura dos momentos (QMOM). No método discretizado, também conhecido como método de classes, a população de partículas é representada por um número finito de classes de tamanho de bolhas e para cada classe são calculadas as taxas de quebra e coalescência. É importante que a gama de tamanho de partículas seja conhecida a priori e que o número de intervalos de tamanho das partículas seja limitado para que não torne o método computacionalmente custoso. No método padrão de momentos, a equação de balanço populacional é representada por um conjunto de equações de transporte para os momentos da distribuição. O momento de ordem k é definido pela integração da densidade numérica em todo espaço de partículas ponderado com a propriedade elevada à ordem k . Logo, o momento zero representa a densidade numérica total, o momento de ordem 2 representa a área total por unidade de volume, e assim por diante.

A desvantagem desse método é que, diferentemente do método de classes que oferece diretamente a distribuição do tamanho de partículas, o SMM, assim como todo método de momentos, oferece os momentos da distribuição do tamanho de partículas. Por outro lado, a resolução de poucos momentos é o suficiente para acompanhar a evolução da distribuição, o que, comparado com o método discretizado, diminui consideravelmente o custo computacional por número de equações a serem resolvidas.

A importância de se aplicar um modelo referente a fenômenos relacionados à distribuição de bolhas em sistemas metal/gás não é uma discussão recente. Bannenberg et al. (1992) ressaltaram que o diâmetro da bolha varia com a profundidade do banho de metal em que está inserida. Em grande profundidade, perto do injetor, as bolhas se encontram livres para aumentar de tamanho à medida que ascendem no metal e capturam os gases dissolvidos. Ao alcançar um nível menor de profundidade, as bolhas se desintegram e coalescem.

Apesar de ser um parâmetro relevante para o estudo de sistemas multifásicos metal-gás, a distribuição do tamanho das bolhas é considerada um fator limitante na

modelagem desses sistemas devido a sua complexidade. Para fins de simplificações, muitos trabalhos a consideram como monodispersa (LOU, ZHU, 2013; NUNIS et al., 2015), enquanto outros (YU, LOUHENKILPI, 2012) fazem uso de correlações empíricas para superar essa limitação, conforme a Tabela 2.

Tabela 2. Correlações empíricas para o tamanho das bolhas em sistema metal-gás.

Autor	d_b	Especificações
Xie et al. (1992)	$d_{b,médito} = 1,46 \left[\frac{Q_g}{z + H} \right]^{0,1}$	Diâmetro médio de uma bolha esférica a uma altura de 10 cm acima da posição do injetor de gás.
Morsi et al. (1979)	$d_b = \left\{ \left(\frac{6\sigma_l D_n}{\rho_l g} \right) + 0,0242 (Q_g^2 D_n)^{0,867} \right\}^{1/6}$	Tamanho da bolha logo acima do injetor de gás. Correlação recomendada para estimar o tamanho inicial da bolha.
Wang et al. (1996)	$d_{b,max} = \left(\frac{We_c \sigma_l}{\rho_l} \right)^{0,6} \cdot \frac{1}{\varepsilon^{0,4}}$	Tamanho máximo da bolha de gás em um fluxo turbulento.
Oeters (1994)	$d_b = \left\{ 2 \left(\frac{6}{C_d} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot \frac{\sigma_l}{0,52g(\rho_g - \rho_l)^{\frac{1}{3}}} \right\}^{\frac{1}{2}}$	Tamanho de bolha em função do coeficiente de arraste em um domínio de fluxo desenvolvido.
Turkdogan (1996)	$d_{b,c} = \left(\frac{3}{C_d \rho_g \rho_l^2} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot \frac{2\sigma}{u_b^2}$	Tamanho crítico de bolha em função de sua velocidade.
Ilegbusi, Szekely (1990)	$d_b = 0,091 \left(\frac{\sigma}{\rho_l} \right)^{0,5} \cdot \left(\frac{4Q_g}{\pi D_n^2} \right)^{0,44}$	Expressão de tamanho de bolhas aplicável a um sistema com injeção de gás.
Miller (1974)	(A) $d_b = 1,817 \left(\frac{\sigma D_n}{g(\rho_l - \rho_g)} \right)^{1/3}$ (B) $d_b = 2,35 \left(\frac{\rho_l}{\pi^2 g(\rho_l - \rho_g)} \right)^{0,2} Q_g^{0,4}$ (C) $d_b = 3,22 \left(\frac{\mu_l}{\pi g(\rho_l - \rho_g)} \right)^{0,25} Q_g^{0,25}$	Correlações de tamanho de bolhas para sistemas de colunas de bolhas em geral: (A) Para baixas vazões de gás. (B) Para número de Reynolds de bolha menor que 9. (C) Para número de Reynolds de bolha maior que 9.

4. METODOLOGIA

4.1. MODELO MATEMÁTICO

O modelo matemático deve respeitar as leis de conservação de massa, calor e quantidade de movimento, e deve acoplar a física dos fenômenos de interesse às variáveis das equações governantes. O modelo desenvolvido englobou as equações que regem os escoamentos multifásico e turbulento, a densidade de forças interfaciais, o transporte de hidrogênio e a distribuição da área interfacial.

4.1.1. Equações governantes do escoamento multifásico

Na abordagem Euleriana-Euleriana para escoamentos multifásicos, diferentes conjuntos de equações de transporte são calculados para cada fase q . No caso de estudo da pesquisa, têm-se duas fases (líquido-gás), logo, dois conjuntos de equações de continuidade e quantidade de movimento. O acoplamento entre as fases é estabelecido pelo campo de pressão p compartilhado entre elas e as forças de interação F_I de dois fluidos. As Equações 27 e 28 são referentes à continuidade e quantidade de movimento, respectivamente. Este modelo calcula os campos de velocidade e pressão, assim como a fração volumétrica das fases.

$$\frac{\partial(\alpha_q \rho_q)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{u}_q) = S_{i,q} \quad (27)$$

$$\frac{\partial(\alpha_q \rho_q \vec{u}_q)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{u}_q \vec{u}_q) = -\alpha_q \nabla p + \nabla \cdot [\alpha_q \mu_{eff,q} (\nabla \vec{u}_q + \nabla \vec{u}_q^T)] + \alpha_q \rho_q \vec{g} + F_I \quad (28)$$

O termo $S_{i,q}$ é referente ao termo fonte da transferência de massa interfacial, e o termo $\mu_{eff,q}$ é referente a viscosidade dinâmica efetiva da fase q .

4.1.2. Modelagem da densidade de força interfacial

A força de sustentação e massa virtual tem seus coeficientes (C_l e C_{VM} , respectivamente) definidos a um valor constante igual a 0,5. Por ser a principal contribuinte às forças de interação entre fluidos, o coeficiente da força de arraste, C_D , foi avaliado como constante e de acordo com os modelos de Kolev (2005) e Ishii-Zuber (1979).

Após a avaliação (comentada no Apêndice AP1), foi constatado que o modelo mais adequado ao sistema do coeficiente da força de arraste, C_D , é o modelo de Kolev (KOLEV; 2005). Este último determina que o coeficiente da força de arraste C_D tem seu valor definido de acordo com o regime no qual o escoamento se encontra: viscoso (*vis*), distorcido (*dis*), limitado (*cap*).

$$\begin{aligned} C_{D_{dis}} < C_{D_{vis}} &\rightarrow C_D = C_{D_{vis}} \\ C_{D_{vis}} < C_{D_{dis}} < C_{D_{cap}} &\rightarrow C_D = C_{D_{dis}} \\ C_{D_{dis}} > C_{D_{cap}} &\rightarrow C_D = C_{D_{cap}} \end{aligned}$$

Sendo $C_{D_{vis}}$, $C_{D_{cap}}$ e $C_{D_{dis}}$:

$$C_{D_{vis}} = \frac{24}{Re} (1 + 0.1Re^{0.75}) \quad (29)$$

$$C_{D_{cap}} = \frac{8}{3} (1 - \alpha_g)^2 \quad (30)$$

$$C_{D_{dis}} = \frac{2}{3} \left(\frac{d_b}{\lambda_{RT}} \right) \left\{ \frac{1 + 17.67 [(1 - \alpha_g)^{1.5}]^6}{18.67 (1 - \alpha_g)^{1.5}} \right\}^2 \quad (31)$$

Sendo o número de Reynolds e o comprimento de onda de instabilidade de Rayleigh-Taylor dados por:

$$Re = \frac{\rho_l |\vec{u}_l - \vec{u}_g| d_b}{\mu_{eff,l}} \quad (32)$$

$$\lambda_{RT} = \left(\frac{\sigma}{g \Delta \rho_{lg}} \right)^{0.5} \quad (33)$$

Sendo σ e d_b a tensão superficial entre as fases e o diâmetro das bolhas, respectivamente.

4.1.3. Modelagem da turbulência

As propriedades de turbulência seguem o modelo κ - ϵ para cada fase q pelas Equações 34 e 35. Esse modelo é acoplado ao modelo multifásico através da fração volumétrica, dos campos de velocidade e pressão, e da viscosidade turbulenta (Equação 36).

$$\frac{\partial (\alpha_q \rho_q \kappa_q)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \kappa_q \vec{u}_q) = \nabla \cdot \left(\alpha_q \left(\mu_q + \frac{\mu_{t,q}}{\sigma_k} \right) \nabla \kappa_q \right) + \alpha_q (G_{\kappa,q} - \rho_q \epsilon_q) + \Pi_{\kappa,q} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_q \rho_q \varepsilon_q)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \varepsilon_q \vec{u}_q) \\ = \nabla \cdot \left(\alpha_q \left(\mu_q + \frac{\mu_{t,q}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_q \right) + \frac{\varepsilon_q}{\kappa_q} \alpha_q (C_{1\varepsilon} G_{\kappa,q} - C_{2\varepsilon} \rho_q \varepsilon_q) + \Pi_{\varepsilon,q} \end{aligned} \quad (35)$$

$$\mu_{t,q} = \rho_q C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (36)$$

Por falta de resultados conclusivos na literatura para os termos fontes representantes da turbulência induzida pelas bolhas nas equações de κ e ε dentro do contexto do estudo, os modelos de Simonin-Viollet (1990) e Troshko-Hassan (2001) são testados e comparados ao modelo κ - ε na ausência desses termos. Os resultados estão comentados na seção 5. *Discussão dos Resultados*.

Tabela 3. Equações dos modelos para os termos fontes de BIT na formulação κ - ε para cada fase.¹

Modelo	$\Pi_{\kappa,q}$	$\Pi_{\varepsilon,q}$
Simonin-Viollet	$\Pi_{\kappa,q} = C_s \alpha_q K_{gl} \vec{u}_{gl} \cdot \vec{u}_{dr}$	$\Pi_{\varepsilon,q} = C_{3\varepsilon} \frac{\varepsilon_r}{\kappa_q} \Pi_{\kappa,q}$
Troshko-Hassan	$\Pi_{\kappa,q} = C_{\kappa,e} \alpha_q K_{gl} \vec{u}_g - \vec{u}_l ^2$	$\Pi_{\varepsilon,q} = C_{td} \frac{1}{\tau_g} \Pi_{\kappa,q}$

Os seguintes valores são adotados para as constantes:

$$C_{1\varepsilon} = 1,44 ; C_{2\varepsilon} = 1,92 ; \sigma_\varepsilon = 1,3 ; \sigma_\kappa = 1,0 ; C_\mu = 0,09$$

4.1.4. Modelagem do transporte de hidrogênio

O transporte de espécie é modelado pela equação de convecção-difusão (Equação 37), com o termo fonte para transferência de massa interfacial $S_{i,q}$ para o hidrogênio regido pela Lei de Sievert, dada pela Equação 40.

$$\frac{\partial(\rho_q \alpha_q Y_{i,q})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_q \alpha_q \vec{u}_q Y_{i,q}) = -\nabla \cdot \alpha_q \vec{J}_{i,q} + \alpha_q S_{i,q} \quad (37)$$

$\vec{J}_{i,q}$ é o fluxo difusivo de massa da espécie i decorrente de gradientes de concentração e temperatura, este último desconsiderado.

$$\vec{J}_{i,q} = -\left(\rho_q D_{M,i} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (38)$$

¹ As constantes $C_s, C_{3\varepsilon}, C_{\kappa,e}, C_{td}$ valem, respectivamente, 1, 1.2, 0.75 e 0.45 (*Ansys Fluent Guide*).

$D_{M,i}$, $D_{T,i}$, Sc_t são, respectivamente o coeficiente de difusão mássica da espécie i , o coeficiente de difusão térmica da espécie i e o número Schmidt turbulento, dado por:

$$Sc_t = \frac{\mu_t}{\rho_q D_t} \quad (39)$$

D_t é a difusividade turbulenta.

O termo fonte de transferência de massa interfacial é responsável pelo acoplamento do modelo de transporte de espécie aos demais. Ele é dado por:

$$S_{H,l} = kA\rho_l(H_{eq} - H_l) \quad (40)$$

Sendo k e $[H]_{eq}$ o coeficiente de transferência de massa e a fração mássica de hidrogênio no metal em equilíbrio com a fase gasosa, respectivamente, dados por:

$$k = 0,59 \left(D_H \cdot \frac{u_b}{d_b} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (41)$$

$$\frac{H_{eq}}{10^{-7}} = \frac{K_H}{f_H} \sqrt{p_{H_2}} \quad (42)$$

Sendo D_H a difusividade do hidrogênio dissolvido no metal líquido, ν a viscosidade cinemática do fluido, p_{H_2} a pressão parcial de hidrogênio na bolha de argônio e K_H a constante de equilíbrio, dada por: $\log K_H = -\frac{1900}{T} + 0,9201$ (YU, LOUHENKILPI; 2012).

4.1.5. Modelagem da área interfacial e do diâmetro da bolha

A distribuição do tamanho das bolhas influencia diretamente na área interfacial disponível para a troca de espécies entre as fases, impactando, portanto, a remoção do hidrogênio da fase líquida pela fase gasosa. Porém, devido à complexidade da modelagem considerando os fenômenos que envolvem essas partículas, como coalescência e quebra, foi desenvolvida uma metodologia simplificada para modelar a área interfacial e o diâmetro da bolha apenas no cálculo da equação de convecção-difusão, enquanto mantêm-se esses parâmetros constantes no cálculo da equação da quantidade de movimento.

Foram realizados testes preliminares, cujos resultados estão comentados no Apêndice AP2, para avaliar a influência de diferentes valores constantes de d_b na geração do campo de velocidade e pressão. A equação de Morsi et. al (1979) (Tabela 2),

que gera um valor de 0,0074m de diâmetro de bolha, foi comparada com um valor superior (0,01m) e um inferior (0,001m). Tendo em vista as características de um regime homogêneo discutidas na seção 3.1.1. *Regimes de fluxo em coluna de bolhas*, alguns pontos foram considerados para atribuir uma distribuição monodispersa das bolhas na geração do campo de velocidade e pressão:

- i. O uso de um *plug* injetor poroso, como é o do caso em estudo, provoca regimes homogêneos a pseudo-homogêneos, em que não há grande evidência de coalescência ou quebra de bolhas.
- ii. Colunas com razão de aspecto baixa (< 5), estabilizam o regime homogêneo, de forma que o fluxo de bolhas apenas apresenta comportamento mais disperso logo acima do *plug* injetor e na superfície da coluna.
- iii. Altas temperaturas reduzem o efeito das forças de tensão superficial facilitando a formação de bolhas menores, além de diminuir a viscosidade da fase líquida, o que contribui para estabilizar o regime homogêneo gerado.

Dessa forma, é possível explorar ainda mais o modelo de transferência de espécie adicionando o cálculo do diâmetro da bolha e da área interfacial, permitindo a análise da influência desses parâmetros na taxa de remoção de hidrogênio. A metodologia seguiu os modelos de Karouni et al. (2018) e Bannenberg et al. (1992), adicionando o modelo de Besagni et. al (2018) (Equação 43) e *ia-particle* (Equação 44) para A , como mostrado nas Tabelas 4, 5 e 6.

$$A = \frac{0,23}{D} AR^{-0,3} \left(\frac{gD^2 \rho_L}{\sigma} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{gD^3 \rho_L^2}{\mu_L^2} \right)^{0,12} \left(\frac{u_g^2}{gD} \right)^{\frac{1}{4}} \alpha_g^{1,13} \quad (43)$$

$$A = 6 * \frac{\alpha_g}{d_b} \quad (44)$$

Como mostrado na seção 3.2.2.3. *Transporte de espécies*, o modelo de Bannenberg (1992) calcula a velocidade média u_b e o diâmetro de bolha d_b através da velocidade superficial da bolha (Equações 22 e 23). Diferentemente do modelo de Karouni et al. (2018) e Yu e Louhenkilpi (2012), ele não inclui o coeficiente de atividade de hidrogênio no cálculo de x_{Heq} , porém, testes mostraram (Apêndice AP2) que f_p pode ser significativo na taxa de remoção e foi, portanto, incluído nesse modelo.

$$u_b = 22,15 * \sqrt{d_b} * v_s^{0,1126 + ,0431 * \log v_s} \quad (\text{Equação 22})$$

$$d_b = f_p * 0,9 * v_s^{0,44} \quad (\text{Equação 23})$$

Tabela 4. Modelo geral de transporte de hidrogênio - utilizado por Karouni (2018) e Bannenberg (1992) - sem incluir modelagem de A e db.

Modelo geral de transporte de hidrogênio			
S_{H_l}	Termo fonte de transferência de massa interfacial	kg/m ³ .s	$k * A * \rho_l * (x_{H_{eq}} - x_{H_l})$
k	Coefficiente de transferência de massa interfacial	m/s	$0,59 * \sqrt{D_H * \frac{u_b}{d_b}}$
$x_{H_{eq}}$	Fração mássica de hidrogênio em equilíbrio com a fase gasosa	(-)	$\frac{K_H}{f_H} \sqrt{P_{H_2}}$
$\log f_H$	Coefficiente de atividade do hidrogênio	(-)	$\sum w_H^J [\%J]$
K_H	Constante de equilíbrio	(-)	$10^{-\frac{1900}{T} + 0.9201}$
P_{H_2}	Pressão parcial de hidrogênio na bolha	Pa (kg/m.s ²)	$P_{bubble} * \frac{\frac{x_H}{M_H}}{\left(\frac{x_H}{M_H}\right) + \left(\frac{x_{Ar}}{M_{Ar}}\right)}$

Tabela 5. Variações do modelo Karouni (2018) adicionando a modelagem de A.

Variações testadas do modelo Karouni (2018)			
A	Área de concentração interfacial (m ² /m ³)	Correlação ia-particle	$d_b = 0,001m$
		Correlação Besagni (2018)	$d_b = 0,001m$

Tabela 6. Variações do modelo de Bannenberg (1992), adicionando a modelagem de A.

Variações testadas do modelo Bannenberg (1992)			
		d_b – Diâmetro da bolha (m)	
		Constante: $d_b = 0,001m$	
A - Área de concentração interfacial (m²/m³)	Correlação ia-particle	Equação 23	$f_p = 0,01$
			$f_p = 0,005$
			$f_p = 0,05$
	Correlação Besagni (2018)	Equação 23 com $f_p = 0,05$	

4.2. VALIDAÇÃO DOS MODELOS

A capacidade dos modelos de prever corretamente as variáveis é analisada através de comparações dos resultados numéricos com dados experimentais reportados na literatura. Para a validação dos modelos propostos são usados dados experimentais de dois trabalhos publicados. Sheng e Irons (1993) estudaram a medição e a modelagem das flutuações da velocidade da fase líquida em um sistema de borbulhamento de ar em água. Seus dados são usados, portanto, para a validação do campo de velocidade e das propriedades turbulentas. O modelo de transferência de hidrogênio será validado com dados industriais disponibilizados no trabalho de Nunis et al. (2015). As características técnicas dos sistemas dos casos de validação estão listadas nas Tabelas 7 e 8 abaixo.

Tabela 7. Características do sistema gás/água dos casos de validação.

Características do sistema ar/água	Sheng e Irons (1993)
Altura do banho líquido (m)	0,42 m
Diâmetro do cilindro (m)	0,5 m
Diâmetro do injetor de gás (m)	0,004 m
Vazão de entrada do gás (m ³ /s)	5e-5 Nm ³ /s

Tabela 8. Características do sistema argônio/metal do caso de validação.

Características do sistema Ar/Metal	Nunis et. al (2015)
Altura do banho/Diâmetro da panela	1 – 1,2
Diâmetro do injetor de gás (m)	0,11
Vazão de entrada do gás (m ³ /s)	0,08 – 0,3 Nm ³ /s
Massa de metal (ton)	81,4 – 100,4 ton
Concentração de hidrogênio na entrada (ppmw)	5,8 – 7,8 ppmw

4.3. MÉTODO NUMÉRICO

A solução do modelo matemático baseia-se na discretização do domínio de cálculo e das equações diferenciais parciais, transformando-as em um sistema de equações algébricas a ser resolvido numericamente.

4.3.1. Discretização do domínio de cálculo

4.3.1.1. Qualidade da Malha e Erros Numéricos

A discretização do domínio físico consiste na partição da região de interesse em pequenos e finitos volumes de controle, os quais constituem a grade numérica chamada de malha. A malha computacional influencia diretamente na verificação numérica através das estimativas dos erros numéricos, que asseguram a resolução correta das equações diferenciais parciais.

Os erros numéricos podem ser classificados em três principais tipos: erros de arredondamento (*round-off*), erros de iteração e erros de discretização. Os erros de arredondamento são relacionados à precisão com a qual os números são armazenados e com a representação de números de pontos flutuantes (*floating point*), esse tipo de erro é considerado menos significativo em relação aos outros. Os erros de iteração ocorrem devido aos métodos iterativos usados para resolver o sistema de equações algébricas. Para controlar esse erro, são usados critérios de convergência que devem ser respeitados, como os chamados resíduos, que é a diferença relativa entre os valores de uma iteração e outra.

O terceiro erro é diretamente relacionado à qualidade da malha numérica. Os erros de discretização, também chamados de difusão numérica, são derivados da aplicação dos métodos de discretização do domínio e das equações. Para obterem-se os valores das faces dos volumes de controles, são feitas interpolações com os valores nodais, e a precisão desse método depende do nível de ortogonalidade entre os elementos. Uma malha de baixa qualidade ortogonal ou pouco refinada (implicando uma distância significativa entre os elementos) pode gerar erros de discretização significativos e, portanto, interferir na resolução numérica do problema.

4.3.1.2. Definição da Malha Computacional

Ao definir a malha computacional devem-se levar em conta dois fatores: o tipo de elementos que formam a malha e a sensibilidade da malha ao refinamento. O tipo de elemento influencia a homogeneidade da distribuição dos elementos ao longo do domínio discretizado. Existem métricas que auxiliam na verificação da deformação e não constância dos elementos de malha, como a assimetria (*skewness*), que mede a diferença na forma do elemento para um objeto equilátero de mesmo volume, e a qualidade ortogonal, que mede a ortogonalidade de um elemento em relação ao outro. O tipo de elemento ideal para uma malha de qualidade é o quadrilátero para planos 2D e hexaédrico para planos 3D. O refinamento da malha afeta a disposição dos elementos e o número total de elementos. É importante verificar a sensibilidade da malha ao refinamento a fim de evitar esforços computacionais com malhas extremamente refinadas assim como soluções equivocadas com malhas pouco refinadas. Portanto, deve-se demonstrar que a solução obtida independe da resolução da grade numérica através de testes de convergências e sensibilidade de malha.

Em uma análise de independência de malha, diferentes disposições e tamanhos de malhas são testados para uma mesma geometria de modo a garantir a qualidade e a independência dos resultados perante a grade numérica. Neste trabalho, esta análise é realizada para cada geometria dos casos usados para validação do modelo.

4.3.2. Discretização das equações por FVM

O software comercial Ansys Fluent foi usado para a solução numérica das equações de transporte e utiliza o método de volumes finitos (FVM) como método de discretização das equações. O FVM parte da decomposição do domínio de cálculo em vários volumes de controle que constituem a grade numérica. Os valores das variáveis a serem resolvidas são guardados nos centroides dos elementos da malha computacional. Em seguida, integra-se as equações sobre as células e aplica-se o teorema de divergência de Gauss para obter as equações de conservação na forma de integral para todo o volume de estudo. A equação de continuidade foi usada para exemplificar a aplicação do método dos volumes finitos (Equação 45).

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V (\alpha_q \rho_q) dV + \oint_A (\alpha_q \rho_q \vec{u}_q) \cdot dA = \int_V S_{i,q} dV \quad (45)$$

Finalmente, para obter o sistema de equações algébricas, as variáveis e os gradientes são aproximados a partir dos valores nodais (Equação 46). O sistema de equações é, então, resolvido numericamente por meio da aplicação de métodos segregados ou acoplados, descritos na seção seguinte.

$$V_{CÉLULA} \cdot \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \sum_q^{N_{FACES}} (\alpha_q \rho_q \vec{u}_q) \cdot A_q = S_{i,q} \cdot V_{CÉLULA} \quad (46)$$

4.3.3. Configurações do modelo numérico

4.3.3.1. Acoplamento Pressão-Velocidade

O método numérico de solução aplicado no estudo foi o *Pressure-Based Solver*, no qual o campo de pressão é obtido pelo cálculo de uma equação de correção de pressão. Tal equação é uma derivação das equações da continuidade e quantidade de movimento, garantindo que o campo de velocidade, quando corrigido pela pressão, satisfaça a continuidade (Ansys Fluent Solver Theory Guide).

O Ansys Fluent disponibiliza dois esquemas de acoplamento pressão-velocidade quando o modelo multifásico Euleriano está ativado: *Coupled* e *Phase-Coupled SIMPLE*. O esquema *Coupled* resolve as equações de quantidade de movimento e correção de pressão simultaneamente, o que pode promover uma maior probabilidade de convergência da solução. Os esquemas acoplados são recomendados para simulações em estado estacionário ou transiente com *time-steps* elevados. O *Phase-Coupled SIMPLE* é uma extensão do algoritmo segregado *SIMPLE*, em que a conservação da massa é imposta através de uma relação entre a velocidade e as correções de pressão para obter o campo de pressão. Ambos os esquemas de acoplamento pressão-velocidade podem ser aplicados ao estudo.

4.3.3.2. Métodos de Interpolação

Sabendo que o método dos volumes finitos armazena os valores das variáveis em nós, faz-se necessário aplicar técnicas de interpolação para obter os valores das faces dos volumes de controle para fins de calcular os termos convectivos. Dentre os métodos de interpolação disponibilizados pelo Ansys Fluent, foi escolhido o esquema *QUICK* para o cálculo das variáveis convectivas nas faces. A vantagem de usar o esquema *QUICK* para os termos convectivos é a precisão do método quando aplicado a uma malha estruturada e alinhada ao escoamento, como é o caso da malha construída para o

domínio de estudo. Na discretização dos termos convectivos e difusivos nas equações de conservação são usados os gradientes das variáveis. Para o cálculo dos gradientes foi adotado o esquema padrão do Ansys Fluent, o *Least Squares Cell Based*.

Todas as simulações foram lançadas em *double precision*, em 2D e 3D, e em formulação transiente. O esquema de discretização temporal adotado foi o *Bounded Second Order*, que promove precisão de solução parecida com o *Second Order*, porém, garante maior estabilidade (Ansys Fluent User's Guide).

5. DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Nesta seção, estão discutidos os resultados da análise e validação dos modelos. Ela está dividida em duas partes: validação do modelo multifásico e de turbulência, e validação do modelo de transferência de hidrogênio entre as fases.

5.1. ESCOAMENTO MULTIFÁSICO E PROPRIEDADES TURBULENTAS

O modelo físico de Sheng e Irons (1993) foi reproduzido em ambiente computacional para validar o campo de velocidade e as propriedades turbulentas do escoamento. Ele consiste em um sistema de ar em água em uma coluna de dimensões 0,42 m de altura de banho, 0,5 m de diâmetro e 0,004 m de diâmetro de injetor localizado no eixo central da coluna, com uma vazão de gás a 50 mL/s. Uma sonda elétrica combinada com um anemômetro Doppler a laser (LDA) foi usada para a medição da distribuição axial e radial das componentes de turbulência das velocidades da fase líquida e das flutuações da velocidade das bolhas. A energia cinética de turbulência (Equação 47) foi calculada através das componentes das velocidades da fase líquida, que por sua vez foram obtidas pelos dados de 1000 sinais de laser das velocidades e sua média (Equação 48).

$$k = \frac{1}{2}(u'^2 + v'^2 + w'^2) \quad (47)$$

$$u' = \sqrt{\frac{1}{999} \sum_{i=1}^{1000} (u_i - U)^2} \quad (48)$$

Os resultados numéricos da energia cinética turbulenta foram comparados com os calculados através da Equação 48. As propriedades dos fluidos estão apresentadas na Tabela 9.

Tabela 9. Propriedade dos fluidos.

Propriedade	Valor
Densidade da fase líquida (kg/m ³)	998,2
Densidade da fase gasosa (kg/m ³)	1,225
Viscosidade da fase líquida (kg/m.s)	0,001
Viscosidade da fase gasosa (kg/m.s)	1,79e-5
Tensão superficial água/ar (N/m)	0,0727

5.1.1. Detalhes numéricos

A malha computacional foi construída em geometria 2D e em plano axisimétrico, com injeção de gás no centro do fundo da coluna a um fluxo de 50mL/s. Após um estudo de sensibilidade de malha, foi definida uma malha de 8625 elementos e utilizado o fluxo de massa de gás e pressão de saída como condições de contorno na entrada e na superfície da coluna, respectivamente. Ambas as fases são tratadas como incompressíveis. A condição de contorno de não deslizamento foi aplicada para ambas as fases na parede da coluna. Condições atmosféricas foram empregadas no sistema e nenhuma transferência de massa ou calor considerada nesta fase do estudo. O pacote comercial Ansys Fluent 2019 R2 foi utilizado para resolver as equações. Inicialmente, o domínio foi considerado preenchido com água e a injeção de gás foi iniciada no tempo zero. As condições de contorno aplicadas estão representadas nas imagens abaixo:

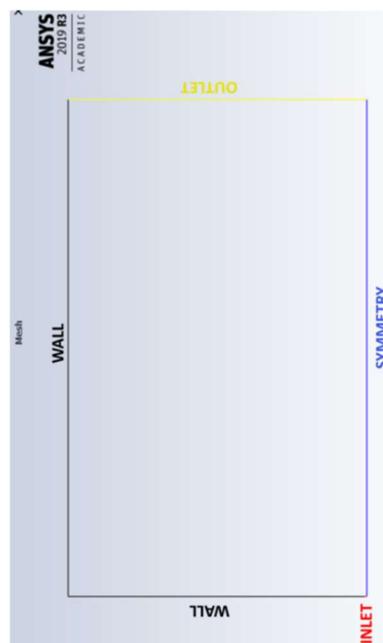


Figura 7. Condições de contorno do domínio em 2D e axisimétrico.

- *Mass-flux-inlet*: vazão mássica do gás (kg/s) constante na entrada do injetor;
- *Pressure-outlet*: pressão relativa na saída da coluna;
- *Wall*: parede com condição de não-deslizamento;
- *Axis*: condição de eixo na simetria.

5.1.2. Avaliação da malha

Para assegurar a qualidade das respostas numéricas relativas à malha, foram testadas três malhas perfeitamente estruturadas com refinamentos diferentes, todas constituídas apenas

de elementos quadriláteros. A Tabela 10 reúne as métricas e o número de volumes de controle para cada malha, da mais refinada (malha A1) até a menos refinada (malha C). Foram coletadas as médias nodais dos resultados em dois planos de corte no início da coluna, um a 0,08 metros de distância da base e outro a 0,16 metros, como mostrado na Figura 8.

Tabela 10. Característica e métricas das malhas para o caso Sheng e Irons (1993).

Malha	Nº VC	Mínima qualidade ortogonal	Máximo skewness
Malha A1	11700	1	3,2e-5
Malha A	8625	1	3,6e-5
Malha B	4500	1	2,8e-6
Malha C	1925	1	2,4e-5

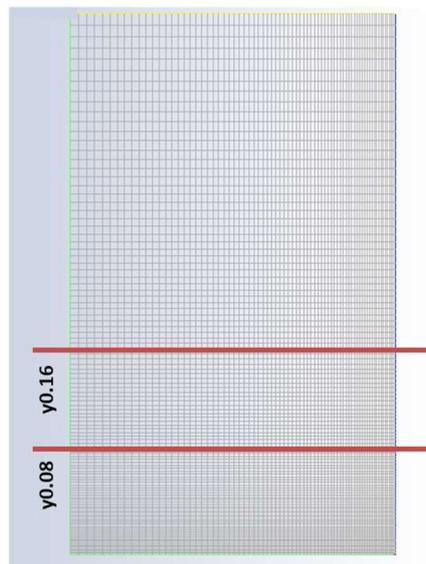


Figura 8. Partições de coleta de respostas na configuração 2D.

Os parâmetros usados para a avaliação das malhas foram: a pressão estática e a velocidade em módulo da fase líquida. A malha foi considerada convergida quando a variação entre os valores a cada refinamento não ultrapassasse 5%. Os valores para pressão das três malhas são próximos, com uma variação menor que 1%. Logo, destaca-se que a velocidade se torna o parâmetro mais crítico de comparação entre as malhas. Com a malha B apresentando uma diferença menor que 5% para a malha mais refinada A, pode-se indicar que a malha B é suficiente para discretização espacial do modelo. Além das variações dos resultados (Tabela 11), pode-se também ser observado o contorno das variáveis no plano como mostrado na Figura 9, onde se destaca, principalmente, a semelhança entre os contornos da pluma de bolhas das malhas A e B,

enquanto que na malha C há uma nítida expansão da pluma ao longo do eixo y. Para maior confiabilidade nos resultados, foi adotada a malha A para as demais simulações.

Tabela 11. Variação dos parâmetros para avaliação da qualidade de malhas no caso Sheng (1993).

Malha_Corte	Pressão (Pa)	Varição de Pressão (%)	Velocidade da fase líquida (m/s)	Varição de Velocidade (%)
A1_y0.08	3322.67	-	0.098	-
A_y0.08	3323.574	0.0273	0.099	1.15
B_y0.08	3323.464	0.0033	0.103	3.44
C_y0.08	3320.038	0.1032	0.121	14.97
A1_y0.16	2536.39	-	0.126	-
A_y0.16	2537.145	0.0299	0.128	1.40
B_y0.16	2538.925	0.0701	0.131	2.18
C_y0.16	2542.993	0.1600	0.182	28.10

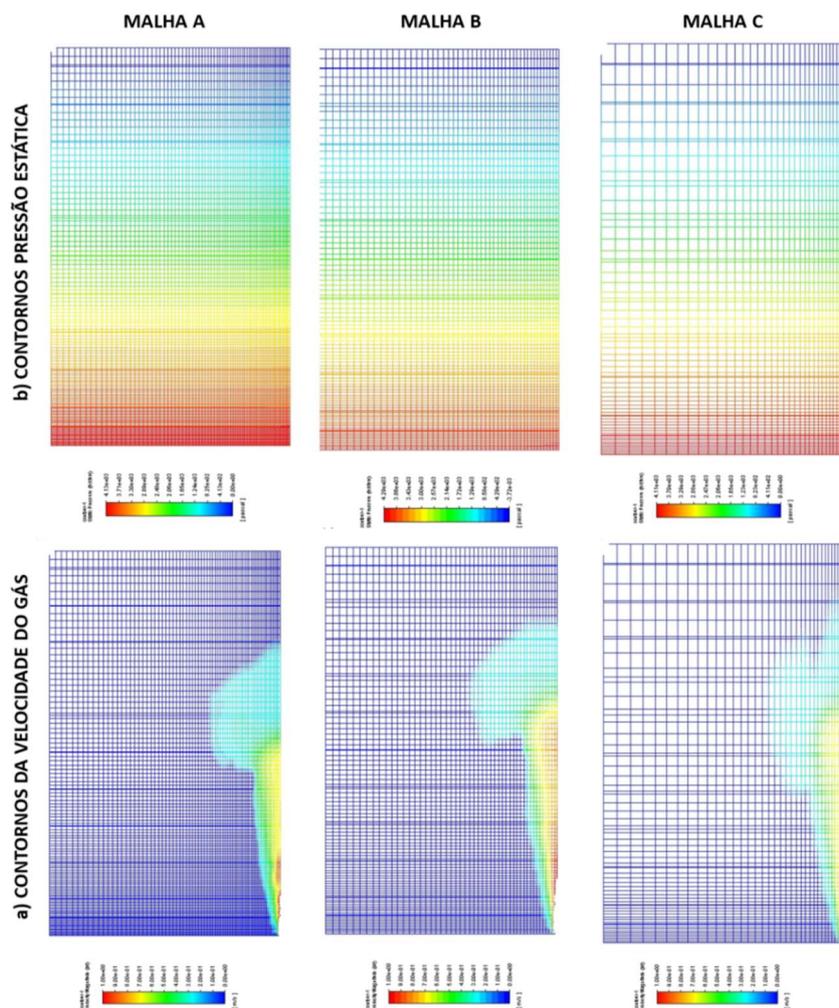


Figura 9. Contornos da pluma de gás em termos da velocidade do gás (a) e da pressão estática (b) para cada malha após 1 segundo de injeção.

5.1.3. Teste de sensibilidade do modelo ao diâmetro da bolha

A distribuição do tamanho das bolhas é considerada um fator limitante na modelagem de sistemas multifásicos. Contudo, é comum atribuir a sistemas polidispersos uma distribuição monodispersa devido à complexidade de modelagem. Para simplificação do modelo, nessa primeira etapa de validação, uma distribuição monodispersa respeitando a correlação de Morsi e Alexander (1979) (Equação 49) foi analisada.

$$d_b = \left\{ \left(\frac{6\sigma_l D_n}{\rho_l g} \right) + 0,0242 (Q_g^2 D_n)^{0,867} \right\}^{1/6} \quad (49)$$

Sendo D_n e Q_g , o diâmetro do injetor e a vazão de gás de entrada. Dados D_n e Q_g , tem-se como diâmetro de bolha 0,0074m.

Apesar do histórico da correlação de Morsi-Alexander (1979) para representar o diâmetro da bolha inicial, resultados preliminares mostraram que havia um grande desvio entre os dados experimentais e numéricos. Para validar a correlação de Morsi-Alexander (1979) como distribuição monodispersa, ela foi comparada com valores superiores e inferiores de diâmetro de bolha (0,01m e 0,001m).

A Figura 10 reúne as variações da energia cinética de turbulência, da velocidade axial da fase líquida e da fração volumétrica do gás em valores pontuais na linha central ao longo da pluma de bolhas. Foram coletados dados entre 1 e 2,5 segundos de simulação de injeção de gás. Elas mostram que o uso de diâmetros de bolhas maiores (0,0074m e 0,01m), subestimam a produção de energia cinética de turbulência e a fração volumétrica de gás no sistema. No que diz respeito à velocidade da fase líquida, a predição das curvas para esses diâmetros se mostram mais de acordo com os dados experimentais de Sheng e Irons (1993).

O diâmetro da bolha atua diretamente e de forma não proporcional à força de arraste. Diâmetros maiores implicam em um coeficiente de transferência interfacial menor e, portanto, em uma força de arraste de menor magnitude, força esta que é oposta ao movimento ascendente da bolha. Logo, a limitação da força de arraste implica em velocidades axiais mais significantes.

A contrariedade entre os resultados da energia cinética e velocidade da fase líquida pode ser provocada pelo fato desses dois parâmetros estarem correlacionados

através da viscosidade efetiva. Com a energia cinética baixa, a viscosidade efetiva diminui e não restringe a movimentação da fase líquida e, portanto, aumenta sua velocidade.

Analisados os resultados dessa análise, foi concluído que adotar um tamanho de 0,001m de diâmetro de bolha para as simulações seguintes seria mais adequado ao sistema.

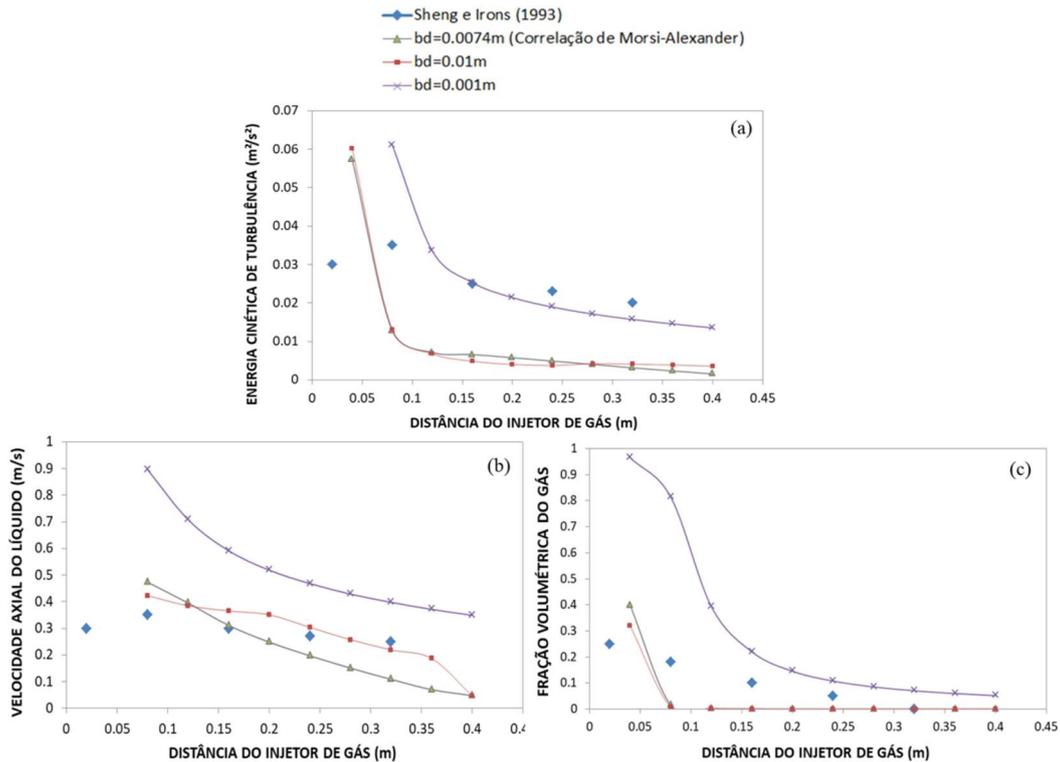


Figura 10. Comparação dos diâmetros de bolha com os dados experimentais de Sheng e Irons (1993) através da energia cinética de turbulência (a), velocidade axial da fase líquida (b) e fração volumétrica do gás (c) em função da distância axial do injetor de gás.

5.1.4. Teste dos modelos BIT – *Bubble Induced Turbulence*

Dois diferentes modelos para reproduzir o fenômeno de turbulência induzida pelas bolhas (BIT) na fase líquida foram testados, os modelos de Troshko-Hassan (2001) e Simonin-Viollet (1990). A Figura 11 reúne as variações da energia cinética de turbulência, da velocidade axial da fase líquida e fração volumétrica da fase gasosa em valores pontuais na linha central ao longo da pluma de bolhas. Foram coletados dados entre 1,5 e 6 segundos de simulação de injeção de gás.

É observado que o modelo κ - ϵ padrão apresenta comportamento semelhante ao modelo de Troshko-Hassan (2001) para energia cinética turbulenta e para fração

volumétrica do gás, mas a Figura 11b mostra uma discrepância entre os modelos para a velocidade axial da fase líquida. Já o modelo de Simonin-Violet (1990) superestima a produção de energia cinética de turbulência, mas mantém a velocidade axial do líquido próxima as observações experimentais. Tendo em vista que a velocidade do líquido é o parâmetro experimental obtido por medição, portanto são dados mais confiáveis, e a energia cinética é um parâmetro estimado, foram feitos novos testes para complementar os resultados de Simonin-Violet (1990). Ambos os modelos, Simonin-Violet (1990) e Troshko-Hassan (2001), possuem coeficientes que agem sobre a magnitude do termo nas equações de transporte κ - ϵ . Foram testados diferentes valores para esses coeficientes a fim de aprimorar os modelos e melhorar a concordância com os dados experimentais.

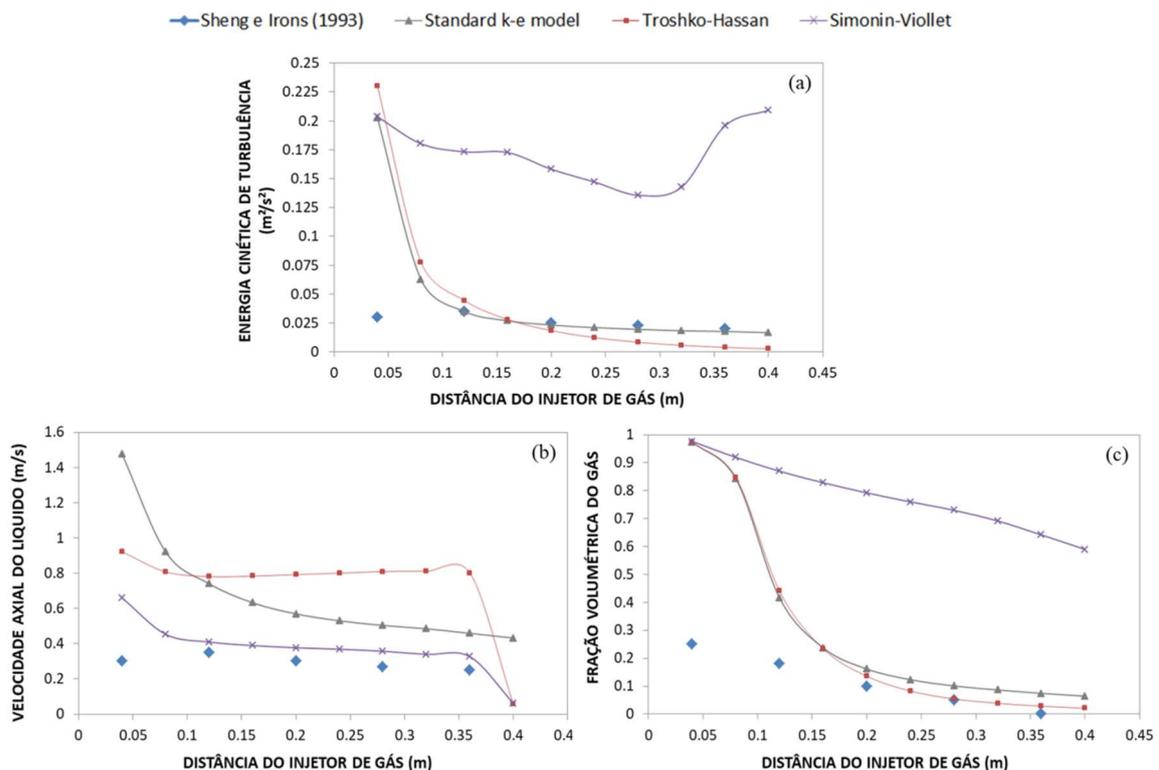


Figura 11. Comparação dos modelos BIT com os dados de Sheng e Irons (1993) através da energia cinética de turbulência (a), velocidade axial da fase líquida (b) e fração volumétrica do gás (c) em função da distância axial do injetor de gás na linha central da coluna.

Nas Figuras 12 e 13 estão os resultados numéricos para a correção dos coeficientes dos modelos BIT. Observa-se a influência da correção do coeficiente C_s no desempenho do modelo Simonin-Violet (1990). Com $C_s = 0,5$ a produção de energia cinética turbulenta se mostra de acordo com os dados experimentais de Sheng e Irons (1993), assim como a fração volumétrica do gás, corrigindo o erro observado na Figura 10. Já

no modelo de Troshko-Hassan (2001), a correção dos coeficientes não se mostrou tão significativa quanto no de Simonin-Viollet (1990).

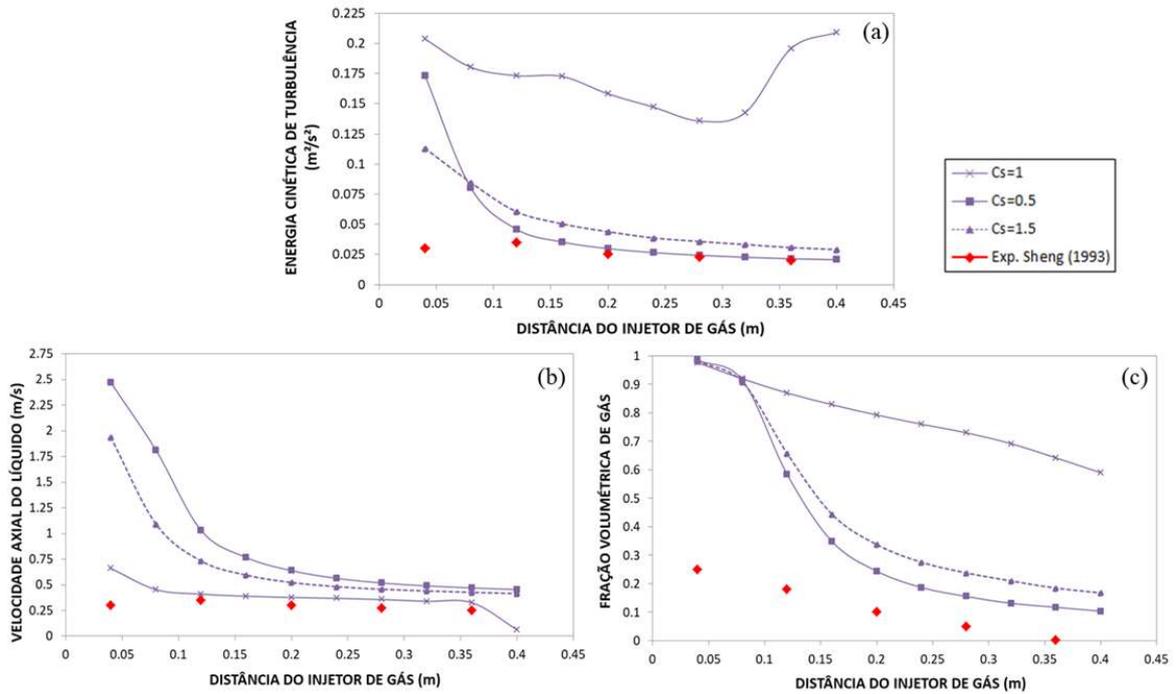


Figura 12. Comparação do coeficiente C_s do modelo de Simonin-Violet (1990) através da energia cinética de turbulência (a), velocidade axial da fase líquida (b) e fração volumétrica do gás (c) em função da distância axial do injetor de gás na linha central da coluna.

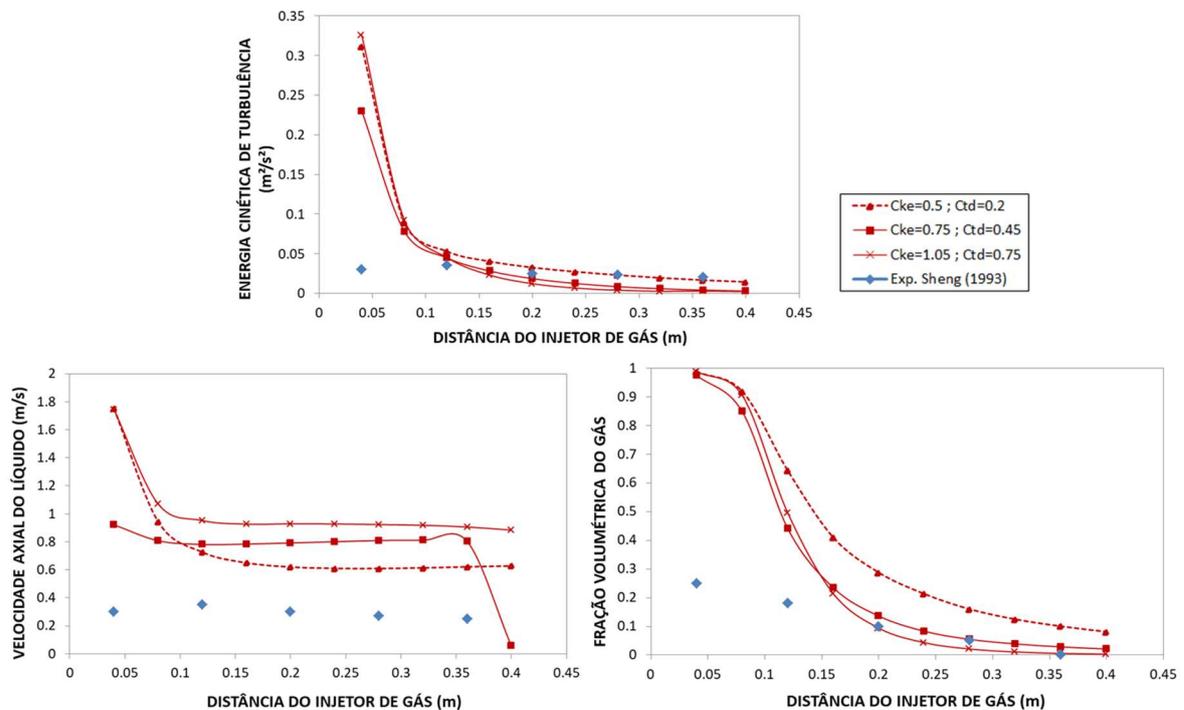


Figura 13. Comparação dos coeficientes C_{ke} e C_{td} do modelo de Troshko-Hassan (2001) através da energia cinética de turbulência (a) e velocidade axial da fase líquida (b) em função da distância axial do injetor de gás na linha central da coluna.

Em todas as simulações, foi observada uma discrepância significativa entre resultados numéricos e experimentais próximos ao injetor de gás. É possível que essa diferença ocorra perto da entrada de gás já que nesta região o escoamento ainda não está completamente desenvolvido. De mais, seria interessante fazer uso de outra abordagem de cálculo como a Lagrangeana para captar as informações numéricas dessa região. Enquanto na abordagem Lagrangeana são capturadas as características e desenvolvimento de cada bolha, na Euleriana o foco é aplicado no comportamento da pluma de bolhas em geral. A variação radial da energia cinética turbulenta nas simulações dos modelos BIT não corrigidos confirma a concordância dos modelos distante da entrada de gás (Figura 14). Os dados da Figura 13 foram coletados a uma altura de 0,21m da coluna de bolhas.

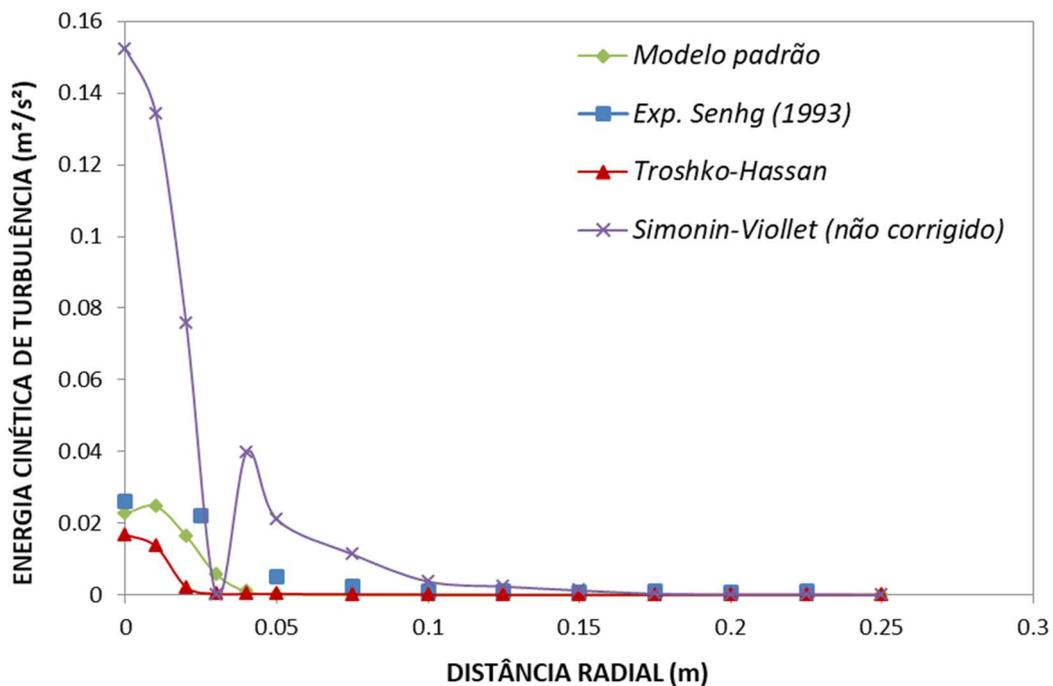


Figura 14. Resultados numéricos da energia cinética em função da distância radial da coluna à uma altura de 0,21m.

Na Figura 15 está a imagem dos vetores da magnitude da velocidade da fase líquida. A Figura 14b mostra os vetores em linhas de cortes em diferentes alturas da coluna, nas quais são observados os maiores valores de velocidade da fase líquida devido à expansão e movimentação, tanto na direção axial quanto na radial, da pluma de bolhas. A Figura 15a é uma amplificação da recirculação da fase líquida provocada pela movimentação ascendente da pluma de bolhas. Esta recirculação é mais evidente

próxima da superfície do líquido, região onde ocorre a liberação das bolhas na atmosfera.

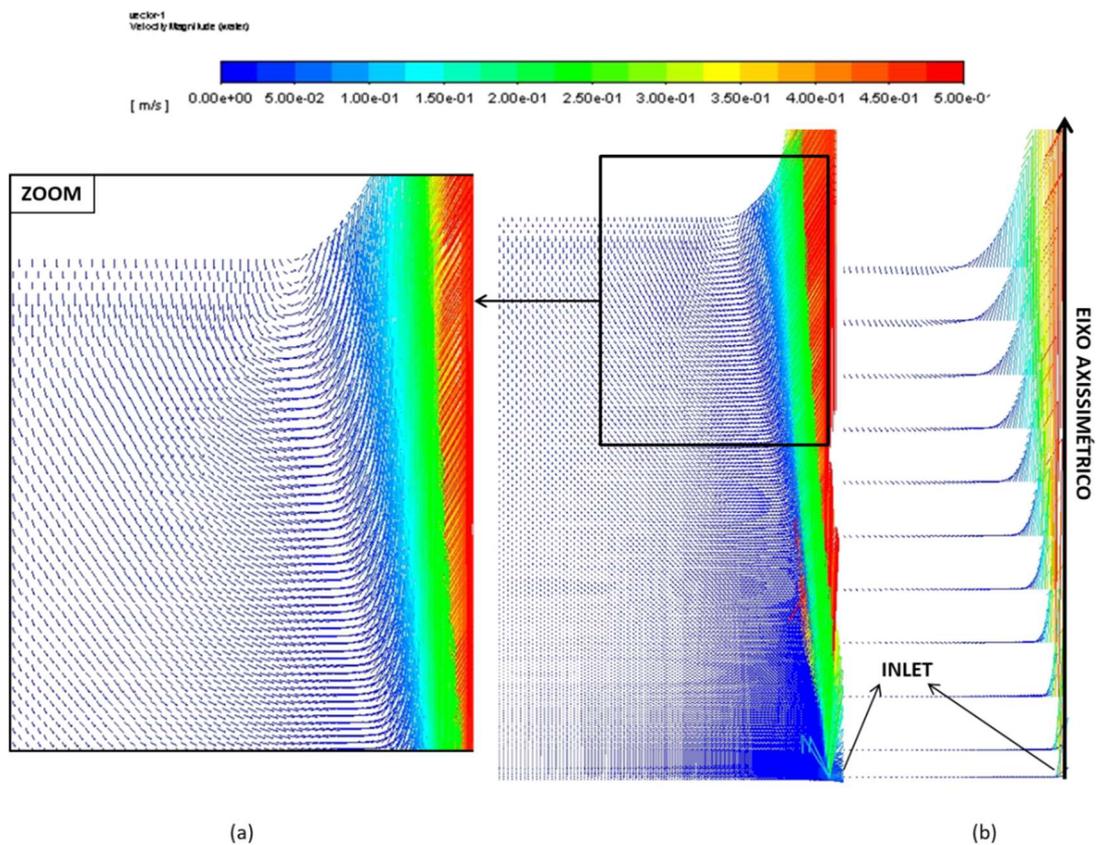


Figura 15. Vetores da magnitude da velocidade da fase líquida.

5.2. TRANSPORTE DE ESPÉCIES: REMOÇÃO DE HIDROGÊNIO

A validação do modelo de transferência de hidrogênio da fase líquida, aço fundido, para a fase gasosa, gás argônio, foi dividida em quatro etapas: simulação em 2D para entendimento prévio, avaliação da malha numérica da geometria em 3D de uma panela industrial de 3m, geração dos campos de velocidade e pressão através dos modelos multifásico e turbulento validados, aplicação da equação de transporte de espécie por compilação de UDF (User-Defined Function) nos campos gerados. Todas as simulações foram executadas no *software* Ansys Fluent.

5.2.1. Informações dos dados industriais de validação

Os dados das corridas de um processo de desgaseificação a vácuo que foram utilizados nessa etapa foram disponibilizados pela empresa Gerdau ao IPT em Nunis et. al (2015). Devido às condições de operação da desgaseificação, os dados coletados se

limitam a parâmetros iniciais e finais do processo. A composição da liga metálica assim como a os coeficientes de interação entre os componentes e o hidrogênio estão na Tabela 12. As propriedades das fases do sistema metal/argônio estão na Tabela 13.

A panela tem dimensões 2,824m x 2,613m e o injetor de gás é poroso com 0,11m de diâmetro. Na Tabela 14 estão as condições de operação e as concentrações de hidrogênio, medidas por uma sonda Hydris/Heraeus Electro-Nite, antes e após desgaseificação. Esses parâmetros serão usados para avaliar a capacidade do modelo de prever corretamente a taxa de remoção de hidrogênio por transferência da fase líquida para fase gasosa.

Tabela 12. Composição da liga metálica e coeficientes de interação Z-H.

Z	Composição (%)	Coeficientes de interação	Referência
C	0.48	0,06	Weinstein e Elliot (1963)
Mn	0.69	-0,0014	
Cu	0.11	0,0005	
P	0.011	0,011	
S	0.011	0,008	
Nb	0.011	-0,002	
Co	0.011	0,0018	
B	0.0004	0,050	
Cr	4.47	-0,002	Boorstein e Pehlke (1974)
Al	0.003	0,0116	Gunji et al. (1964)
W	0.66	0,0048	
Mo	0.19	0,0029	
Ni	0.13	-0,002	
V	0.089	-0,0074	Maekawa e Nkagawa (1961)
Si	0.29	0,038	
Ti	0.0052	-0,22	Karnaukhov e Morozov (1948)
Sn	0.016	Não encontrado	(-)
Zr	0.004		
As	0.003		
Pb	0.001		
Ca	0.0009		

Tabela 13. Propriedades das fases do sistema metal/argônio.

Propriedade	Valor
Densidade do metal (kg/m ³)	7000
Viscosidade do metal (kg/m.s)	0,005
Viscosidade do argônio (kg/m.s)	2,12e-5
Tensão superficial metal/argônio (N/m)	1,19

Tabela 14. Condições de operação e concentrações de H durante processo de desgaseificação da empresa Gerdau.

Massa de metal (ton)	86,2	
Altura do banho/Diâmetro da panela	1,0	
Durante desgaseificação	Pressão (mbar)	1,14
	Tempo abaixo de 1 mbar (min)	25
	Temperatura antes da desgasificação (°C)	1607
	Temperatura após desgasificação (°C)	1541
	Vazão de argônio abaixo de 1mbar (NL/min)	100-260
H (ppmw) antes da desgaseificação	5,8	
H (ppmw) após desgaseificação	1,6	

5.2.2. Avaliação em geometria 2D

Simulações em 2D foram previamente realizadas para melhor entendimento do fenômeno e do modelo matemático desenvolvido. O perfil de velocidade gerado da fase líquida (Figura 16) se mostrou fisicamente adequado ao sistema, com a recirculação do metal no centro da panela provocada pela movimentação do gás na lateral da mesma. Foi observado um caminho preferencial na parede da panela percorrido pelo gás, caminho este corrigido nas simulações em 3D. O perfil da fração mássica de hidrogênio molecular dissolvido no metal, calculado pela UDF de transferência de massa (Apêndice AP3) e depois de 16 minutos de processo, está nas Figuras 17 e 18. Os resultados mostram o perfil da remoção do hidrogênio no interior da geometria em função do tempo e indica uma predição de fração mássica final que se aproxima a da industrial. A simulação 2D foi interrompida para dar início à simulação 3D.

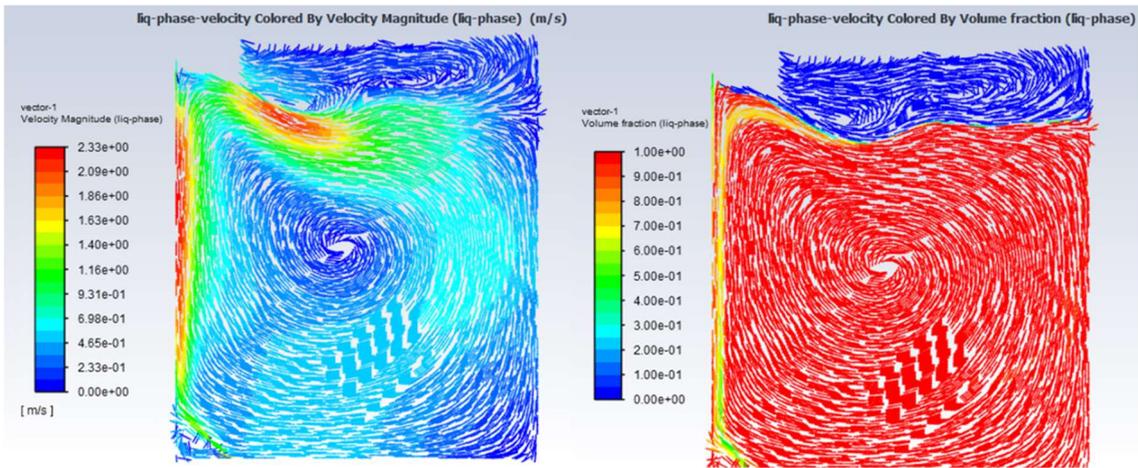


Figura 16. (esquerda) perfil de velocidade da fase líquida em vetores e em coloração de intensidade. (direita) perfil de velocidade da fase líquida em vetores e da fração volumétrica em coloração.

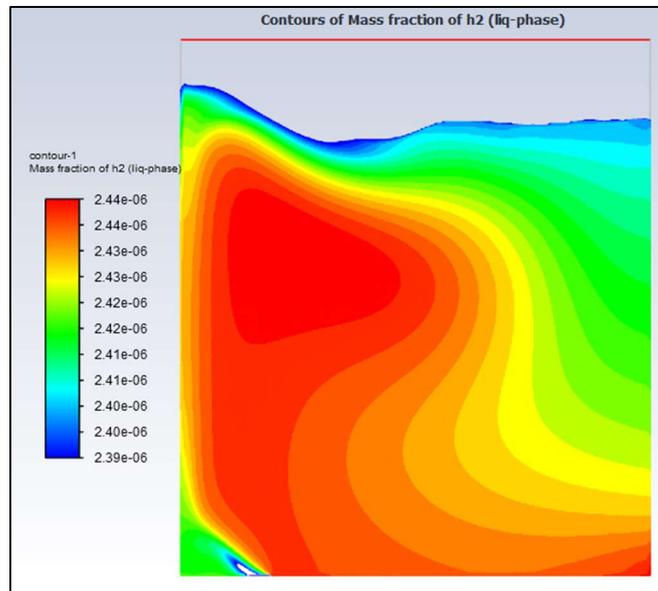


Figura 17. Perfil em contornos da fração mássica de hidrogênio molecular dissolvido no metal após 16 minutos de processo.

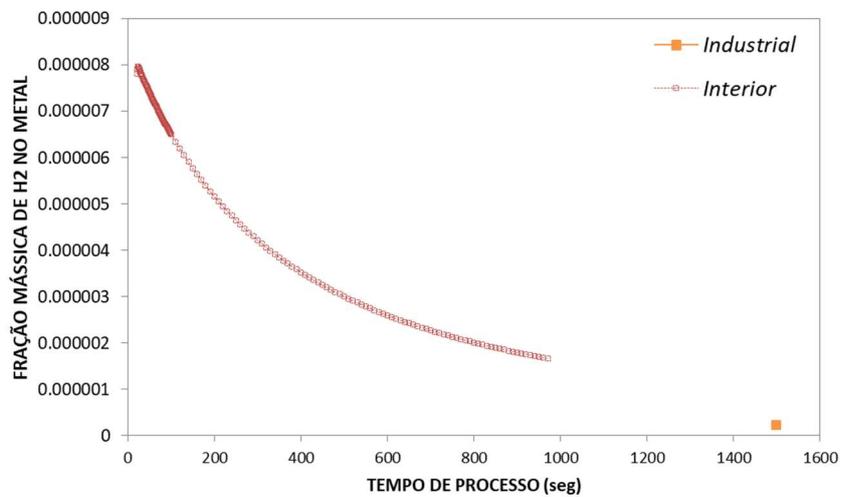


Figura 18. Média da fração mássica de hidrogênio molecular dissolvido no metal em função do tempo.

5.2.3. Simulação em 3D: detalhes numéricos

Para o restante das simulações foi construída uma malha computacional em 3D representando metade da geometria da panela de metal. A injeção de argônio foi descentralizada, sendo posicionada a 0,38 metros da parede. Após um estudo de sensibilidade de malha, foi definida uma malha de 532682 elementos e utilizado o fluxo de massa de gás e pressão de saída como condições de contorno na entrada e na superfície da coluna, respectivamente. Ambas as fases são tratadas como incompressíveis. A condição de contorno de não deslizamento foi aplicada para ambas as fases na parede da coluna. O pacote comercial Ansys Fluent 2019 R2 foi utilizado para resolver as equações. As simulações são lançadas em 1 ou 2 nós por vez, com 16 processadores cada, do cluster localizado nas instalações do Instituto de Pesquisas Tecnológicas (IPT).

5.2.4. Avaliação da Malha em 3D

As malhas foram geradas no Fluent Meshing em dois tipos de elementos (polyhedra e polyhexcore) e refinadas próximas à entrada do gás e as paredes da panela (Figura 19). Quatro malhas com diferentes números de elementos foram analisadas e os parâmetros de comparação entre elas foram: a fração volumétrica do gás e a velocidade do líquido.

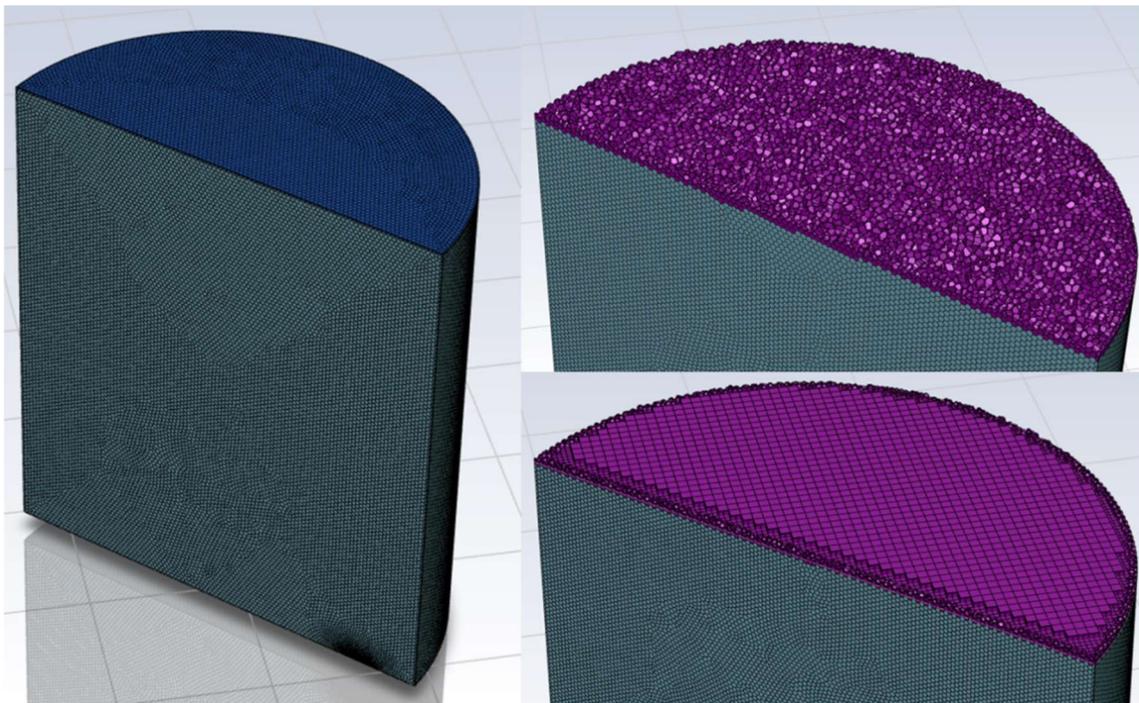


Figura 19. Malha numérica da metade da geometria em elementos polyhedricos (acima) e polyhexcore (abaixo).

Os elementos de tipo polyhexcore reduzem o uso de recursos computacionais sem comprometer a precisão dos resultados e foram, portanto, escolhidos para a grade numérica. A malha M4, com 532682 elementos, foi escolhida para as simulações por apresentar variação menor que 5% para a velocidade da fase líquida em relação à malha M3 (Tabela 15).

Tabela 15. Resultados da avaliação de malha computacional em 3D.

	Nº elementos	α_g	Variação de α_g (%)	u_l	Variação de u_l (%)
M1	188430	0.1026	-	0.056862	-
M2	300350	0.102899	0.289946	0.04203	-35.2892
M3	392186	0.102853	-0.044452	0.056947	26.19511
M4	532682	0.102877	0.023756	0.059863	4.870612

5.2.5. Geração dos campos de velocidade e pressão

Os dados industriais da corrida 2277626 de desgaseificação a vácuo disponíveis em Nunis et. al (2015) foram usados como condições de processo nas simulações para geração dos campos de velocidade e pressão com os modelos multifásico Euleriano e de turbulência κ - ϵ validados anteriormente. Dentre os dados disponíveis tem-se a concentração de gás hidrogênio antes e depois do tratamento, dados estes que foram usados para a validação do modelo de transporte de espécie por meio de comparação entre os resultados numéricos produzidos e os reais.

Tabela 16. Dados de uma corrida de uma planta industrial da Gerdau fornecidos em Nunis et. al (2015).

Corrida 2277626	
Diâmetro da panela (m)	2.504
Altura do banho (m)	2.504
Diâmetro do plug injetor (m)	0.11
Vazão de argônio (NL/min)	217.5
Pressão de Vácuo (Pa)	114
Concentração H2 inicial (ppm)	5.8
Concentração H2 final (ppm)	1.6
Tempo de processo (min)	25

Na Figura 20 e Figura 21 estão os campos de fração volumétrica e velocidade da fase líquida após 30 segundos de processo a partir do qual é atingido um regime

próximo ao estacionário, em que a variação da velocidade já não se mostra tão significativa ao longo do tempo. O caminho preferencial próximo à parede percorrido pela fase gasosa observado nas simulações em 2D foi corrigido e a recirculação do metal se mostra menos uniforme, sendo mais intensa próxima a superfície do banho. A média da velocidade da fase líquida sobre a superfície de simetria é 0,3 m/s. Os resultados numéricos destes campos são, em seguida, utilizados na UDF para o cálculo da taxa de remoção de hidrogênio.

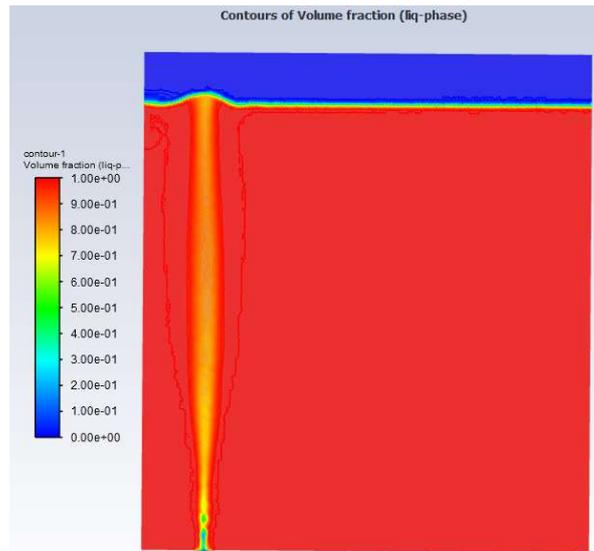


Figura 20. Perfil da fração volumétrica da fase líquida após atingir regime próximo a estacionário (após 30 segundos de injeção).

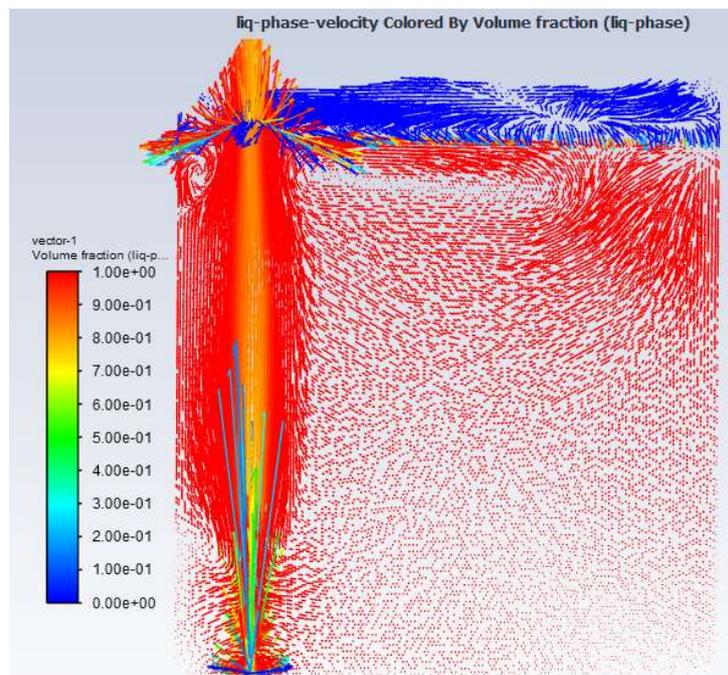


Figura 21. Perfil da velocidade da fase líquida em vetores e da fração volumétrica em coloração (após 30 segundos de processo).

5.2.6. Cálculo numérico da taxa de remoção de hidrogênio

O cálculo da taxa de transferência do hidrogênio da fase líquida para fase gasosa foi adicionado ao modelo através da UDF – *User Defined Function* – do Apêndice AP3. A UDF foi ajustada a cada variação dos modelos de Karouni (2018) e Bannenberg (1992) testados. Abaixo estão as Tabelas 5 e 6 da 4. *Metodologia* com as variações dos modelos indicadas pela nomenclatura de simulação. Na Tabela 19 estão as acurácias dos modelos em relação aos dados industriais calculadas em termos de porcentagem de remoção do hidrogênio ao fim do processo. A representação gráfica dos resultados numéricos das variações dos modelos em função do tempo está apresentada na Figura 22.

Tabela 17. Nomenclatura das variações do modelo de Karouni (2018).

Variações testadas do modelo Karouni (2018)				Nomenclatura da Simulação
A	Área de concentração interfacial (m^2/m^3)	Correlação ia-particle	$d_b = 0,001m$	Karouni (2018)
		Correlação Besagni (2018)	$d_b = 0,001m$	A_K5

Tabela 18. Nomenclatura das variações do modelo de Bannenberg (1992).

Variações testadas do modelo Bannenberg (1992)				Nomenclatura da Simulação
		d_b – Diâmetro da bolha (m)		
A - Área de concentração interfacial (m^2/m^3)	Correlação ia- particle	Constante: $d_b = 0,001m$		A_B12
		Equação 23	$f_p = 0,01$	A_B22
			$f_p = 0,005$	A_B32
			$f_p = 0,05$	A_B42
	Correlação Besagni (2018)	Equação 23 com $f_p = 0,05$		A_B52

Tabela 19. Acurácia dos modelos com base na taxa de remoção de hidrogênio.

Dado Industrial de remoção de hidrogênio: 72,41%							
Resultados Numéricos							
	Karouni	A_B12	A_B22	A_B32	A_42	A_B52	A_K5
Acurácia	93,65%	93,65%	93,23%	93,41%	93,06%	97,42%	98,86%

É observado que o fator f_p não mostrou contribuição à acurácia do modelo. Este parâmetro, chamado de *plug factor*, foi adicionado ao modelo de Bannenberg (1992) por Nunis et. al (2015) como um ajuste para incluir os efeitos da morfologia e material do injetor sobre a geração das bolhas de argônio. Nunis et. al (2015) observou que menores valores f_p induzem a menores tamanhos de bolhas e, portanto, maior taxa de remoção de hidrogênio. Porém, ao incluir este parâmetro em um modelo mais rigoroso como o em estudo, ele se mostrou pouco significativo na transferência de massa. O mesmo pode ser observado com a modelagem de d_b em Bannenberg (1992), o qual mostrou promover menor acurácia que o modelo geral de Karouni (2018). Isso se deve ao fato do cálculo de d_b através da velocidade superficial do gás promover diâmetro de bolhas maiores (média de 0,035m como mostrado na Figura 23), o que repercute no cálculo do termo fonte de transferência S_{Hl} diminuindo a taxa de remoção de H. Na Figura 24 estão os perfis de concentração de hidrogênio na fase líquida (metal fundido) após 20 minutos de tratamento calculados pelos modelos de Karouni (2018) e Bannenberg (1992). Depois do mesmo tempo de tratamento percorrido, o modelo Karouni (2018) apresenta menor concentração de hidrogênio no volume.

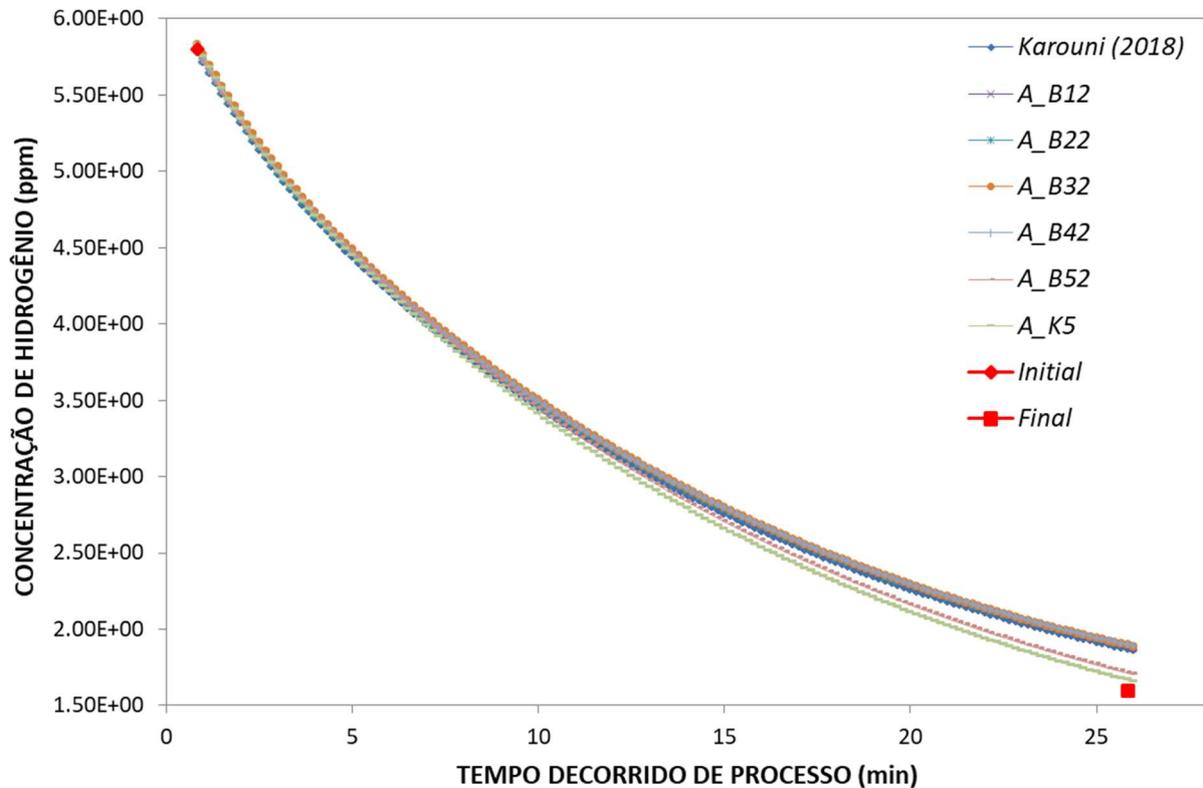


Figura 22. Resultados numéricos da média volumétrica da concentração de hidrogênio no banho de metal em função do tempo decorrido de processo.

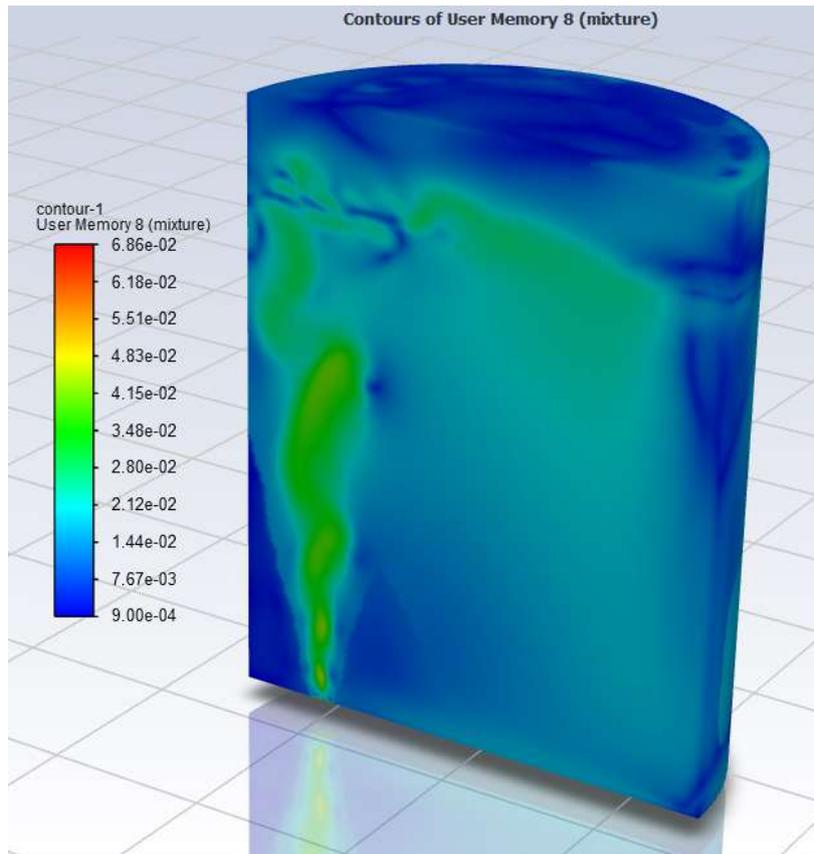


Figura 23. Contorno da distribuição do tamanho das bolhas de acordo com o modelo de Bannenberg (1992).

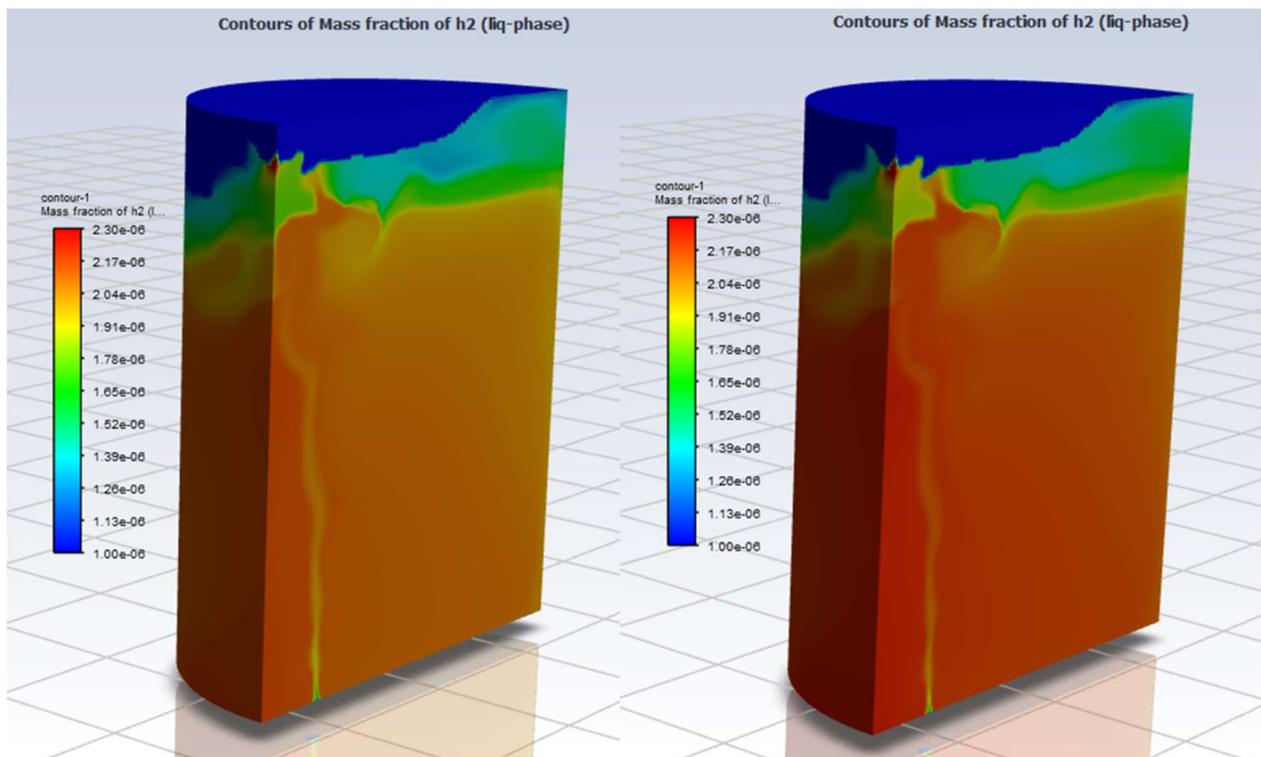


Figura 24. Perfis de concentração de hidrogênio predito pelo modelo Karouni (esquerda) e Bannenberg (direita), após 20 minutos de tratamento.

Ampliando o gráfico da Figura 22 próximo a 25 minutos de desgaseificação, é possível observar que dois modelos se destacam em relação à acurácia: A_K5 e A_B52. Em ambos foi aplicada a correlação de Besagni (2018) para modelagem da área interfacial, pela qual é calculada através de constantes do sistema e da velocidade superficial da fase gasosa. Na Figura 26 está o contorno da área interfacial (em m^2/m^3) de Besagni (2018) para esse sistema.

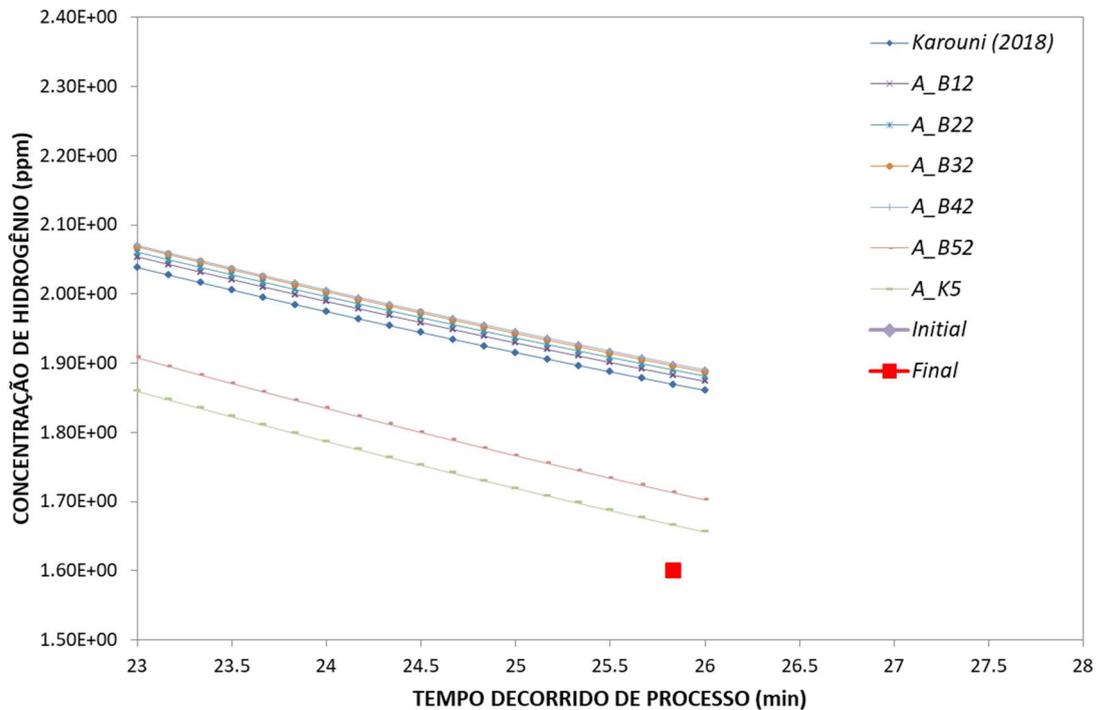


Figura 25. Ampliação da Figura 21 ao final do processo de desgaseificação.

Apesar dos resultados satisfatórios de acurácia do modelo, é importante mencionar que existem algumas ressalvas em relação à medição experimental e estimação numérica do dado de concentração de hidrogênio. A coleta da amostra de metal retirada da panela industrial é realizada de forma aleatória de um ponto do reator sob a suposição de que seria um reator de mistura perfeita. Além disso, deve ser levado em consideração a gama de erro do método de medição da concentração de hidrogênio na amostra realizada por uma sonda Hydrys/Heraeus Electro-Nite. Da mesma forma, o método de coleta das informações numéricas do parâmetro no *software* Ansys Fluent foi o cálculo da média volumétrica ponderada em todo o volume de controle, logo, há a possibilidade de subestimação do valor de concentração de hidrogênio, implicando uma taxa de remoção menor do que a informada no presente texto.

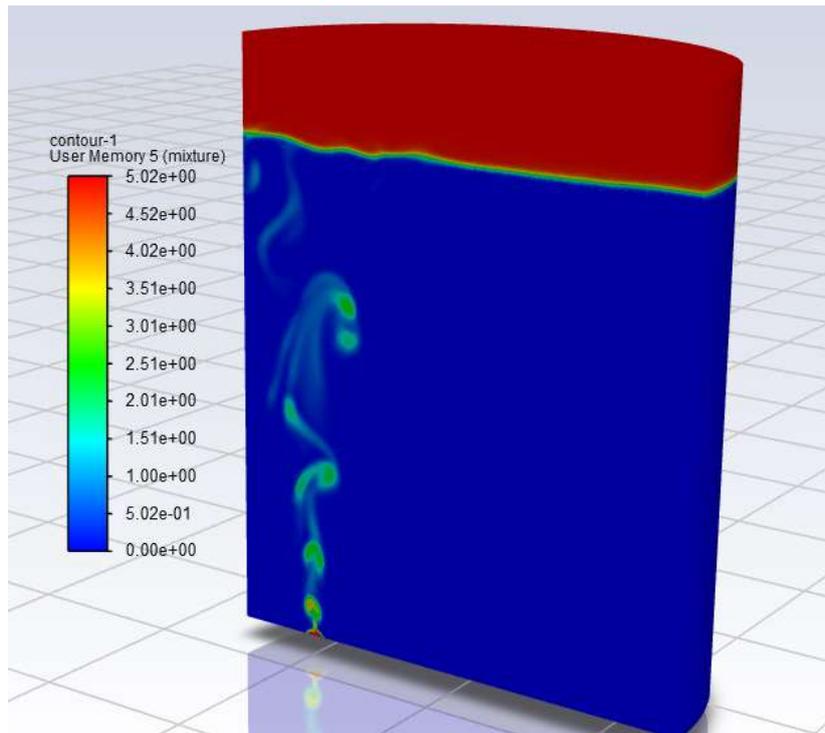


Figura 26. Contorno da área interfacial calculada pela correlação de Besagni (2018).

5.3. TESTE DE CONCENTRAÇÃO INICIAL DE HIDROGÊNIO

Após validação, o modelo pode ser aplicado para diferentes configurações do sistema com o objetivo de prever seu comportamento e ajudar em tomadas de decisões para torná-lo mais eficiente. Dentre as múltiplas variáveis que podem ser avaliadas, está a concentração inicial de hidrogênio.

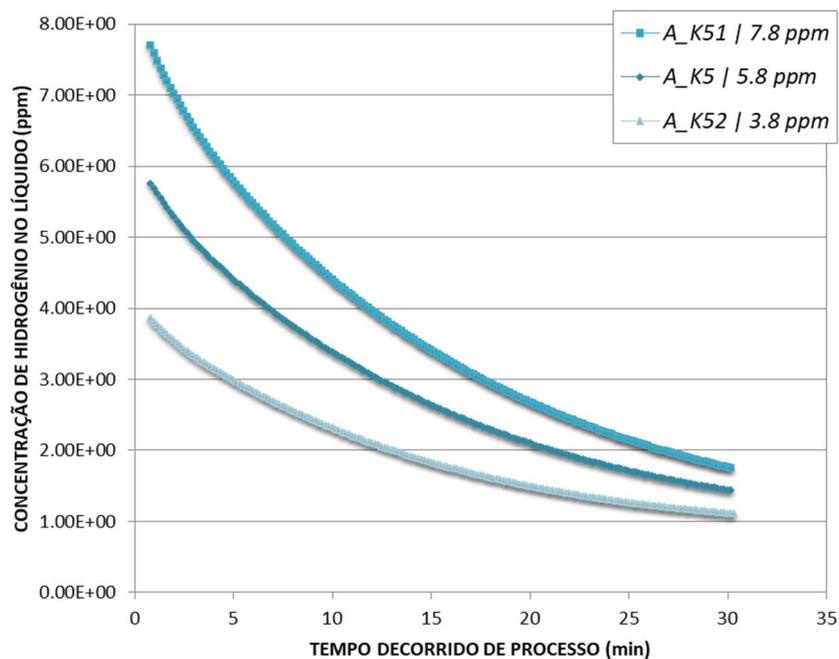


Figura 27. Perfil da concentração de hidrogênio para diferentes $[H]_{\text{inicial}}$.

Com uma concentração de hidrogênio inicial menor, supõe-se que o tempo de processo necessário para alcançar as exigências de 2 ppm finais é menor. A Figura 27 mostra os resultados dos testes realizados com uma concentração inicial inferior e superior à da simulação *A_K5* (7,8 ppm; 5,8 ppm e 3,8 ppm) nas mesmas condições operacionais da Tabela 16, e confirma esse efeito. Porém, maiores concentrações de hidrogênio promovem maiores taxas de remoção, como ilustrado na Figura 28. Como observado, a cinética da desidrogenação não é linear e, à medida que o hidrogênio é retirado, a taxa de remoção desacelera, apresentando comportamento bem próximo para todas as simulações.

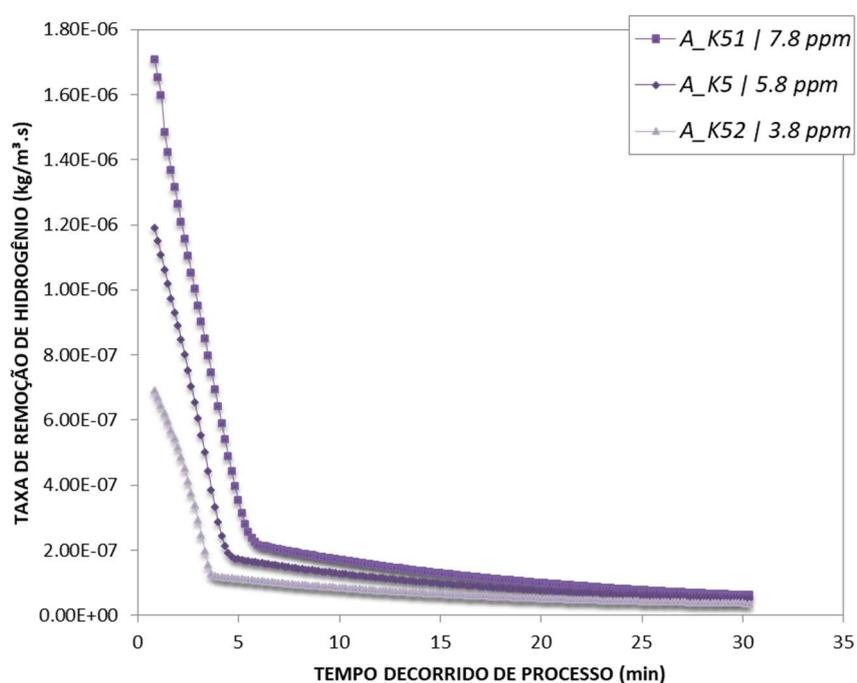


Figura 28. Perfil da taxa de remoção de hidrogênio para diferentes [H] inicial.

6. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Um modelo CFD multifásico baseado em modelos de turbulência induzida por bolhas (BIT) foi proposto e validado com dados experimentais coletados da literatura. As forças interfaciais também foram consideradas no modelo multifásico Euleriano aplicado. Simulações numéricas foram realizadas no programa comercial CFD Ansys Fluent 2019 R2. O modelo padrão κ - ϵ foi comparado com o modelo incluindo os termos fontes que representam a turbulência associada com o movimento das bolhas inseridas. Um modelo de transporte de massa para eliminação do hidrogênio foi desenvolvido e

sua sensibilidade à área interfacial de troca foi investigada. As principais conclusões extraídas deste trabalho são:

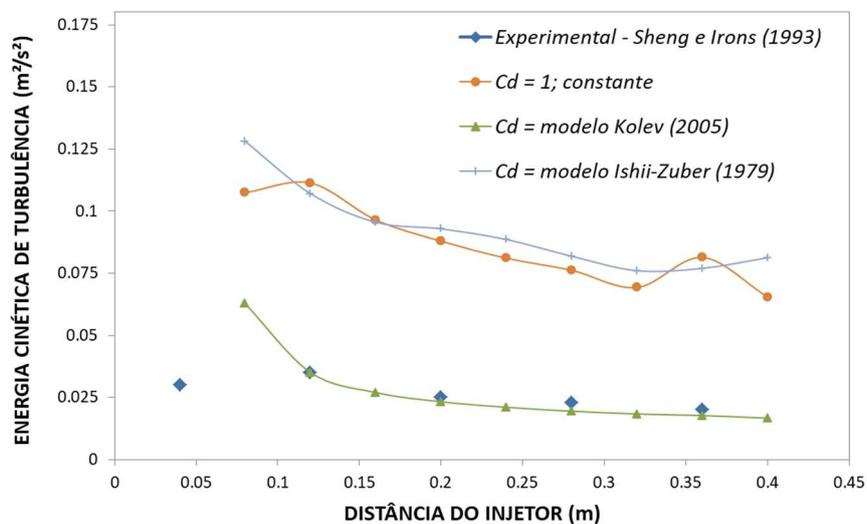
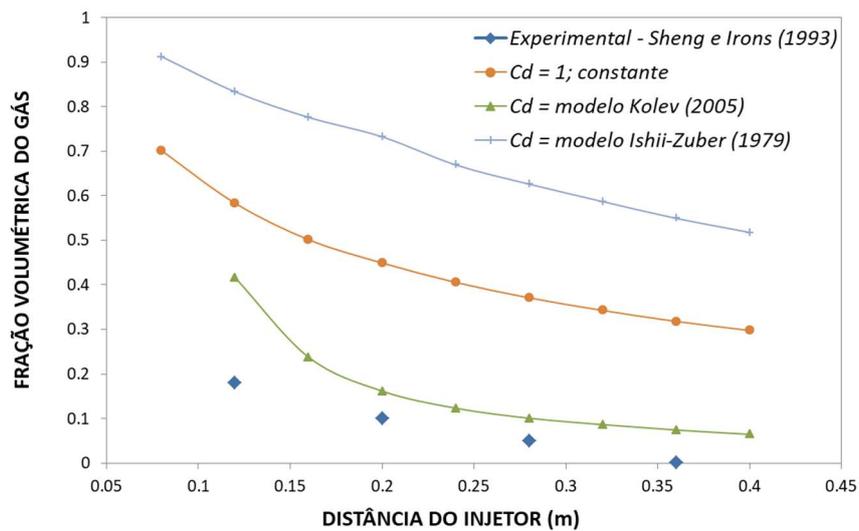
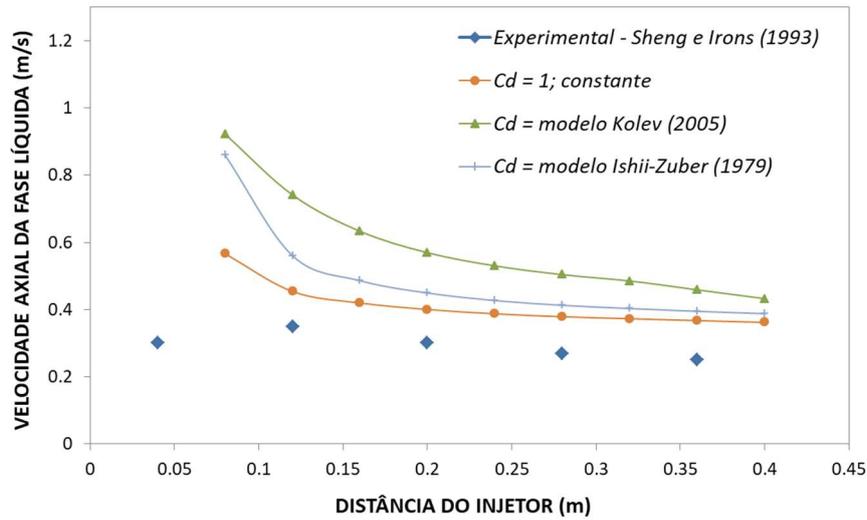
- i. O diâmetro da bolha mostrou ser um parâmetro de grande importância para a capacidade do modelo de prever corretamente a dinâmica do fluido, indicando que fenômenos de interação da bolha, tais como ruptura e coalescência, deveriam ser incluídos;
- ii. O campo de velocidade foi previsto com precisão, em regiões longe do injetor de gás, para ambos os modelos BIT acoplados ao modelo multifásico Euleriano. Entretanto, nenhum dos modelos BIT mostrou uma melhoria significativa na acurácia em relação ao modelo κ - ϵ padrão;
- iii. O modelo Simonin-Viollet (1990) BIT mostrou ser altamente dependente dos valores do coeficiente do modelo e sugere-se que eles sejam ajustados para cada caso e sistema;
- iv. O cálculo do diâmetro da bolha, d_b , polidisperso de Bannenberg et. al (1992) não aprimorou a acurácia do modelo de transferência de hidrogênio;
- v. A correlação da área interfacial de troca, A , de Besagni et. al (2018) implementada ao modelo de transferência de hidrogênio mostrou ter efeito positivo na acurácia do modelo (98,86% comparado a 93,65% do modelo inicial) e, assim, pode ser uma alternativa promissora para considerar o efeito da distribuição do tamanho das bolhas no fenômeno de transporte de massa.

O modelo desenvolvido no presente estudo torna possível o estudo de diferentes configurações do sistema industrial. Como exemplo, podem ser estudadas diferentes vazões de gás na entrada, tipo do plug injetor, posição desse plug, pressão de vácuo aplicada, entre outras variáveis de processo.

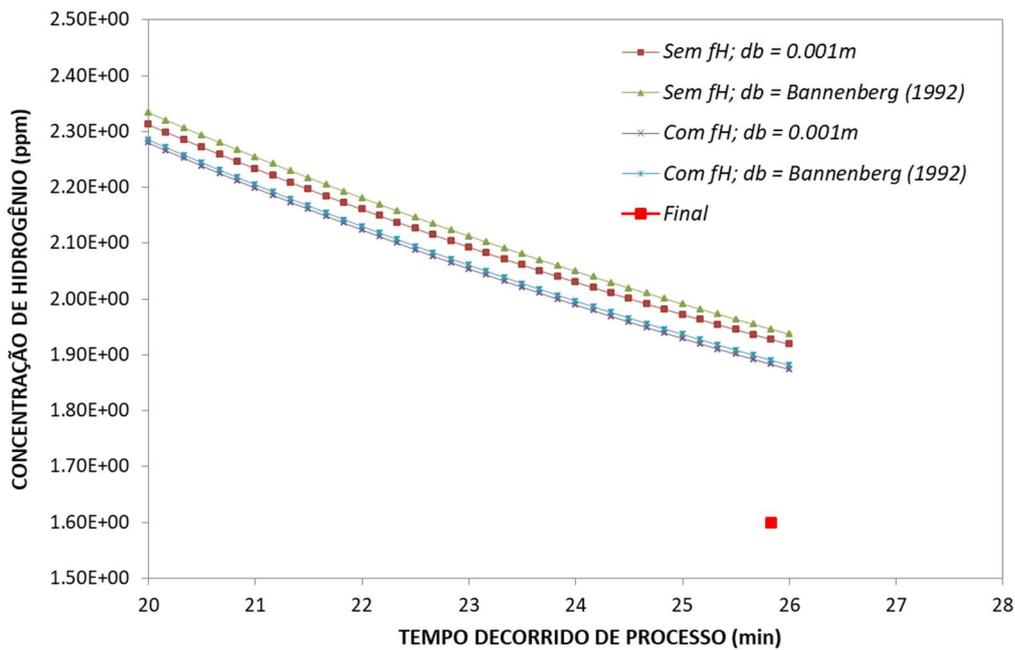
Assim, o presente modelo constitui-se em recurso importante de engenharia de processo, que pode ser usado em estudos visando melhorar a eficiência e qualidade do processo estudado.

7. APÊNDICES

AP1. Teste do modelo do coeficiente de arraste - C_D



AP2. Teste da inclusão de f_H no modelo de Bannenberg (1992)



AP3. Exemplo de UDF de transferência de massa

```
#include "udf.h"
```

```
DEFINE_PROPERTY(gas_density, c, t)
```

```
{
```

```
    real gas_rho;
```

```
    gas_rho = 1.6228;
```

```
    return gas_rho;
```

```
}
```

```
DEFINE_PROPERTY(steel_density, c, t)
```

```
{
```

```
    real steel_rho;
```

```
    steel_rho = 7000;
```

```
    return steel_rho;
```

```
}
```

```
DEFINE_MASS_TRANSFER(source, cell, thread, from_index, from_species_index,  
to_index, to_species_index)
```

```
{
```

```
#if !RP_HOST
```

```
    real S_lg, H_eq, A, k, U_g, P_H2, P_bubble, K_H, V_s, db;
```

```
    Thread* liq = THREAD_SUB_THREAD(thread, from_index);
```

```
    Thread* gas = THREAD_SUB_THREAD(thread, to_index);
```

```
    real f_h = 1.0762;
```

```

real P_surface = 114;

real xc[ND_ND];

C_CENTROID(xc, cell, thread);

real H_l = C_YI(cell, liq, from_species_index);

C_UDMI(cell, thread, 0) = H_l;

if (C_VOF(cell, gas) <= 1 || xc[1] < 2.504)
{
    P_bubble = P_surface + (7000 * 9.81 * (3.0 - xc[1]));

    C_UDMI(cell, thread, 1) = P_bubble;

    P_H2 = (P_bubble * ((C_YI(cell, gas, to_species_index) / 0.001) /
((C_YI(cell, gas, to_species_index) / 0.001) + ((1 - C_YI(cell, gas,
to_species_index)) / 0.0399))));

    C_UDMI(cell, thread, 2) = P_H2;

    K_H = pow(10, ((-1900 / 1873) + 0.9201));

    C_UDMI(cell, thread, 3) = K_H;

    H_eq = (K_H/f_h) * pow(10, -7) * pow(P_H2, 0.5);

    C_UDMI(cell, thread, 4) = H_eq;

    A = ((6 * C_VOF(cell, gas) * (1 - C_VOF(cell, gas))) /
C_PHASE_DIAMETER(cell, gas));

    C_UDMI(cell, thread, 5) = A;

    V_s = 100 * sqrt(pow(C_U(cell, gas), 2) + pow(C_V(cell, gas), 2) +
pow(C_W(cell, gas), 2)); /* cm/s */

    db = 0.005 * 0.9 * pow(V_s, 0.44);

    C_UDMI(cell, thread, 8) = db;

    U_g = (22.15 / 100) * pow((100 * db), 0.5) * pow(V_s, (0.1126 +
(0.0431 * log(V_s)))); /* m/s */

    C_UDMI(cell, thread, 7) = U_g;

    k = 0.59 * pow((pow(10, -7) * (U_g / db)), 0.5); /*higbie*/

    C_UDMI(cell, thread, 6) = k;

    S_lg = k * A * 7000 * (H_l - H_eq);

}

else

{

```

```
        S_lg = 0;
    }
    if (S_lg <= 0)
    {
        S_lg = 0;
    }
    return (S_lg);
#endif
}
```

8. ANEXOS

AN1. Modelos disponíveis para o coeficiente de arraste no Ansys Fluent²

Modelo	C_d	Especificações
Schiller-Naumann (SCHILLER; 1935)	$C_D = \begin{cases} 24(1+0.15Re^{0.687})/Re & Re \leq 1000 \\ 0.44 & Re > 1000 \end{cases}$	Modelo generalizado e aplicável a praticamente todos os pares de fase fluido-fluido.
Morsi-Alexander (MORSI; 1972)	$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2}$ $a_1, a_2, a_3 = \begin{cases} 0, 24, 0 & 0 < Re < 0.1 \\ 3.690, 22.73, 0.0903 & 0.1 < Re < 1 \\ 1.222, 29.1667, -3.8889 & 1 < Re < 10 \\ 0.6167, 46.50, -116.67 & 10 < Re < 100 \\ 0.3644, 98.33, -2778 & 100 < Re < 1000 \\ 0.357, 148.62, -47500 & 1000 < Re < 5000 \\ 0.46, -490.546, 578700 & 5000 < Re < 10000 \\ 0.5191, -1662.5, 5416700 & Re \geq 10000 \end{cases}$	Modelo mais completo, aplicável a uma vasta gama de número de Reynolds. Cálculos devem se torna menos estáveis com esse modelo.
Grace et al. (CLIFT et al. 1978)	$C_D = \alpha_i^{C_{exp}} \max \left(\min \left(C_{D_{ellipse}}, C_{D_{cap}} \right), C_{D_{sphere}} \right)$ $C_{D_{sphere}} = \begin{cases} 24/Re & Re < 0.01 \\ 24(1+0.15Re^{0.687})/Re & Re \geq 0.01 \end{cases}$ $C_{D_{cap}} = \frac{8}{3}; \quad C_{D_{ellipse}} = \frac{4}{3} \frac{gd_p(\rho_q - \rho_p)}{U_t^2 \rho_q}$	Modelo adequado para sistemas gás-líquido onde as bolhas adquirem diferentes formas.
Tomiyaama et al. (TOMIYAMA et al. 1999)	$C_D = \max \left(\min \left(\frac{24}{Re} (1+0.15Re^{0.687}), \frac{72}{Re} \right), \frac{8}{3} \frac{E_o}{E_o+4} \right)$ $E_o = \frac{g(\rho_l - \rho_g)d_b^2}{\sigma}$	Assim como Grace et al., esse modelo abrange as diferentes formas que uma bolha pode tomar em um sistema gás-líquido.
Ishii-Zuber (ISHII, 1979)	$C_D = \begin{cases} C_{D_{sphere}}, & \text{if } C_{D_{sphere}} \geq C_{D_{ellipse}} \\ \min(C_{D_{ellipse}}, C_{D_{cap}}) & \text{if } C_{D_{sphere}} < C_{D_{ellipse}} \end{cases}$ $C_{D_{ellipse}} = \frac{2}{3} \sqrt{E_o}; \quad C_{D_{cap}} = \frac{8}{3}$ $C_{D_{sphere}} = \frac{24}{Re_m} (1+0.15 Re_m^{0.687})$	Abrange diferentes regimes de distribuição de partículas (partículas fluidas escassamente distribuídas e densamente distribuídas)
Kolev (KOLEV; 2005)	$C_{D_{vis}} = \frac{24}{Re} (1+0.1Re^{0.75}); \quad C_{D_{cap}} = \frac{8}{3} (1-\alpha_p)^2$ $C_{D_{dis}} = 2/3 \left(\frac{d_p}{\lambda_{RT}} \right) \left\{ \frac{1+17.67f^{*6/7}}{18.67f^*} \right\}^2;$ $f^* = (1-\alpha_g)^{1.5}$ $C_{D_{dis}} < C_{D_{vis}} \rightarrow C_D = C_{D_{vis}}$ $C_{D_{vis}} < C_{D_{dis}} < C_{D_{cap}} \rightarrow C_D = C_{D_{dis}}$ $C_{D_{dis}} > C_{D_{cap}} \rightarrow C_D = C_{D_{cap}}$	Também conhecido como a lei Universal de Arraste, o modelo Kolev é aplicável para uma variedade de regimes gás-líquido onde diâmetro hidráulico é muito superior à média do tamanho das partículas.

² Algumas formulações matemáticas foram retiradas do Ansys Fluent Theory Guide em sua nomenclatura original. Neste trabalho, os subscritos p e q são referentes à fase secundária e primária, respectivamente.

AN2. Modelos disponíveis p/ o coeficiente de força de sustentação no Ansys Fluent

Modelo	C_l	Especificações
Moraga et al. (MORAGA; 1999)	$C_l = \begin{cases} 0.0767 & \varphi \leq 6000 \\ -(0.12 - 0.2e^{-\frac{\varphi}{30} \times 10^5})e^{\frac{\varphi}{3} \times 10^{-7}} & 6000 < \varphi < 5 \times 10^7 \\ -0.6353 & \varphi \geq 5 \times 10^7 \end{cases}$ $\varphi = Re_b Re_\omega$ $Re_\omega = \frac{\rho_l \nabla \times \vec{u}_l d_b^2}{\mu_l}; \quad Re_g = \frac{\rho_l \vec{u}_l - \vec{u}_g d_b}{\mu_l}$	Adequado principalmente para partículas sólidas.
Saffman-Mei (SAFFMAN; 1965, 1968)	$C_l = \frac{3}{2\pi\sqrt{Re_\omega}} C_l^* \quad \beta = 0,5 \left(\frac{Re_\omega}{Re_p} \right)$ $C_l^* = \begin{cases} 6.46 \times f(Re_p, Re_\omega) & Re_p \leq 40 \\ 6.46 \times 0.0524 (\beta Re_p)^{1/2} & 40 < Re_p < 100 \end{cases}$	Adequado principalmente para partículas sólidas esféricas.
Legendre-Magnaudet (LEGENDRE; 1998)	$C_l = \sqrt{(C_{l,lowRe})^2 + (C_{l,highRe})^2}; \quad C_{l,highRe} = \frac{1}{2} \frac{1 + 16Re_p^{-1}}{1 + 29Re_p^{-1}}$ $C_{l,lowRe} = \frac{6}{\pi^2} (Re_p Sr)^{-0.5} \frac{2.55}{(1 + 0.2 \frac{Re_p}{Sr})^{1.5}}$	Aplicável a partículas fluidas esféricas de pequeno diâmetro. Considera a transferência de momentum entre o fluxo ao redor da partícula e o fluxo de recirculação interna dentro da partícula fluida.
Tomiyama (TOMIYAMA; 1998)	$C_l = \begin{cases} \min[0.288 \tanh(0.121 Re_p), f(E\sigma)] & E\sigma \leq 4 \\ f(E\sigma) & 4 < E\sigma \leq 10 \\ -0.27 & 10 < E\sigma \end{cases}$ $f(E\sigma) = 0.00105 E\sigma^3 - 0.0159 E\sigma^2 - 0.0204 E\sigma + 0.474$ $E\sigma = \frac{g(\rho_q - \rho_p) d_h^2}{\sigma E\sigma}; \quad d_h = d_b (1 + 0.163 E\sigma^{0.757})^{1/3}$	Aplicável em bolhas deformáveis em larga escala em regimes elipsoidais e esféricos.

AN3. Modelos disponíveis para a força de dispersão turbulenta no Ansys Fluent

Modelo	\vec{F}_{td}	Especificações
Lopez de Bertodano (LOPEZ DE BERTODANO; 1991)	$\vec{F}_{td,q} = -\vec{F}_{td,p} = C_{TD} \rho_q K_q \nabla \alpha_p$	Assume que o movimento das bolhas é aproximado pela difusão térmica das moléculas de ar na atmosfera (CHUANG, HIBIKI; 2017)
Simonin-Viollet (SIMONIN, VIOLLET, 1990)	$\vec{v}_{dr} = -\mathbf{D}_{pq} \cdot \left(\frac{\nabla \alpha_p}{\alpha_p} - \frac{\nabla \alpha_q}{\alpha_q} \right)$ $\vec{F}_{td,q} = -\vec{F}_{td,p} = C_{TD} K_{pq} \frac{D_{t,pq}}{\sigma_{pq}} \left(\frac{\nabla \alpha_p}{\alpha_p} - \frac{\nabla \alpha_q}{\alpha_q} \right)$	Modela a força de dispersão turbulenta por meio de um tensor de dispersão fluido-partícula, \mathbf{D}_{qt} .
Burns et al. (BURNS et al.; 2004)	$\vec{F}_{td,q} = -\vec{F}_{td,p} = C_{TD} K_{pq} \frac{D_q}{\sigma_{pq}} \left(\frac{\nabla \alpha_p}{\alpha_p} - \frac{\nabla \alpha_q}{\alpha_q} \right)$ $D_q = D_p = D_{tq} = \frac{\mu_{tq}}{\rho_q}$	Modela a força de dispersão turbulenta pela média da força de arraste
Difusão em VOF (SOKOLICHIN et al.; 2005)	$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = \nabla \cdot (\gamma_q \nabla \alpha_q) + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) + S_q$ $\sum_{q=1}^n \nabla \cdot (\gamma_q \nabla \alpha_q) = 0$	A força de dispersão turbulenta é modelada como um termo de difusão turbulenta nas equações de frações de volume.

AN4. Modelos disponíveis p/ o coeficiente de força de sustentação no Ansys Fluent

Modelo	C_l	Especificações
Moraga et al. (MORAGA; 1999)	$C_l = \begin{cases} 0.0767 & \varphi \leq 6000 \\ -(0.12 - 0.2e^{-\frac{\varphi}{3 \times 10^5}})e^{\frac{\varphi}{3 \times 10^7}} & 6000 < \varphi < 5 \times 10^7 \\ -0.6353 & \varphi \geq 5 \times 10^7 \end{cases}$ $\varphi = Re_b Re_\omega$ $Re_\omega = \frac{\rho_l \nabla \times \vec{u}_l d_b^2}{\mu_l}; \quad Re_g = \frac{\rho_l \vec{u}_l - \vec{u}_g d_b}{\mu_l}$	Adequado principalmente para partículas sólidas.
Saffman-Mei (SAFFMAN; 1965, 1968)	$C_l = \frac{3}{2\pi\sqrt{Re_\omega}} C_l; \quad \beta = 0,5 \left(\frac{Re_\omega}{Re_p} \right)$ $C_l = \begin{cases} 6.46 \times f(Re_p, Re_\omega) & Re_p \leq 40 \\ 6.46 \times 0.0524 (\beta Re_p)^{1/2} & 40 < Re_p < 100 \end{cases}$	Adequado principalmente para partículas sólidas esféricas.
Legendre-Magnaudet (LEGENDRE; 1998)	$C_l = \sqrt{(C_{l,lowRe})^2 + (C_{l,highRe})^2}; \quad C_{l,highRe} = \frac{1}{2} \frac{1 + 16Re_p^{-1}}{1 + 29Re_p^{-1}}$ $C_{l,lowRe} = \frac{6}{\pi^2} (Re_p Sr)^{-0.5} \frac{2.55}{(1 + 0.2 \frac{Re_p}{Sr})^{1.5}}$	Aplicável a partículas fluidas esféricas de pequeno diâmetro. Considera a transferência de momentum entre o fluxo ao redor da partícula e o fluxo de recirculação interna dentro da partícula fluida.
Tomiyama (TOMIYAMA; 1998)	$C_l = \begin{cases} \min[0.288 \tanh(0.121 Re_p), f(E\sigma)] & E\sigma \leq 4 \\ f(E\sigma) & 4 < E\sigma \leq 10 \\ -0.27 & 10 < E\sigma \end{cases}$ $f(E\sigma) = 0.00105 E\sigma^3 - 0.0159 E\sigma^2 - 0.0204 E\sigma + 0.474$ $E\sigma = \frac{g(\rho_q - \rho_p) d_h^2}{\sigma} \quad E_{O_r} =; \quad d_h = d_b (1 + 0.163 E\sigma^{0.757})^{1/3}$	Aplicável em bolhas deformáveis em larga escala em regimes elipsoidais e esféricos.

AN5. Modelos de turbulência dentro do contexto κ - ε e κ - ω

Modelo Turbulento	Equações de transporte	Especificações
Mistura	$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m k) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m k) = \nabla \cdot \left(\left(\mu_m + \frac{\mu_{t,m}}{\sigma_k} \right) \nabla k \right) + G_{k,m} - \rho_m \varepsilon + \Pi_{k_m}$ $\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \varepsilon) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m \varepsilon) = \nabla \cdot \left(\left(\mu_m + \frac{\mu_{t,m}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{K} (C_{1\varepsilon} G_{k,m} - C_{2\varepsilon} \rho_m \varepsilon) + \Pi_{\varepsilon_m}$	Aplicável para fluidos com densidades próximas, onde se pode considerar as propriedades e velocidades de misturas.
Disperso	$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q k_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{U}_q k_q) = \nabla \cdot \left(\alpha_q \left(\mu_q + \frac{\mu_{t,q}}{\sigma_k} \right) \nabla k_q \right) + \alpha_q G_{k,q} - \alpha_q \rho_q \varepsilon_q + \alpha_q \rho_q \Pi_{k_q}$ $\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \varepsilon_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{U}_q \varepsilon_q) = \nabla \cdot \left(\alpha_q \left(\mu_q + \frac{\mu_{t,q}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_q \right) + \alpha_q \frac{\varepsilon_q}{K_q} (C_{1\varepsilon} G_{k,q} - C_{2\varepsilon} \rho_q \varepsilon_q) + \alpha_q \rho_q \Pi_{\varepsilon_q}$	Recomendado para concentrações diluídas da fase secundária, onde as características dessa fase podem ser obtidas a partir da média da fase primária.
Para cada fase	$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q k_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{U}_q k_q) = \nabla \cdot \left(\alpha_q \left(\mu_q + \frac{\mu_{t,q}}{\sigma_k} \right) \nabla k_q \right) + \left(\alpha_q G_{k,q} - \alpha_q \rho_q \varepsilon_q \right) + \sum_{l=1}^N K_{lq} (C_{lq} k_l - C_{ql} k_q) - \sum_{l=1}^N K_{lq} (\vec{U}_l - \vec{U}_q) \cdot \frac{\mu_{t,l}}{\alpha_l \sigma_l} \nabla \alpha_l + \sum_{l=1}^N K_{lq} (\vec{U}_l - \vec{U}_q) \cdot \frac{\mu_{t,l}}{\alpha_l \sigma_l} \nabla \alpha_q + \Pi_{k_q}$ $\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \varepsilon_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{U}_q \varepsilon_q) = \nabla \cdot \left(\alpha_q \left(\mu_q + \frac{\mu_{t,q}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_q \right) + \frac{\varepsilon_q}{K_q} [C_{1\varepsilon} \alpha_q G_{k,q} - C_{2\varepsilon} \alpha_q \rho_q \varepsilon_q + C_{3\varepsilon} \left(\sum_{l=1}^N K_{lq} (C_{lq} k_l - C_{ql} k_q) - \sum_{l=1}^N K_{lq} (\vec{U}_l - \vec{U}_q) \cdot \frac{\mu_{t,l}}{\alpha_l \sigma_l} \nabla \alpha_l + \sum_{l=1}^N K_{lq} (\vec{U}_l - \vec{U}_q) \cdot \frac{\mu_{t,l}}{\alpha_l \sigma_l} \nabla \alpha_q \right)] + \Pi_{\varepsilon_q}$	Apropriado para escoamentos onde a troca interfacial de turbulência é significativa. Computacionalmente mais custoso por adicionar duas equações de transporte ao modelo (ao lado).

9. REFERÊNCIAS

ANAGBO P. E.; BRIMACOMBE J. K. Plume Characteristics and Liquid Circulation in Gas Injection through a Porous Plug. **Metallurgical Transactions B**, v. 21B, 1990.

ANSYS Fluent Theory Guide. Release 15.0. ANSYS, Inc. Southpointe. 275 Technology Drive. Canonsburg, PA 15317. ANSYS, Inc. is certified to ISO.

ANSYS Fluent User's Guide. Release 15.0. ANSYS, Inc. Southpointe. 275 Technology Drive. Canonsburg, PA 15317. ANSYS, Inc. is certified to ISO.

AKITA, K.; YOSHIDA, F. Bubble Size, Interfacial Area, and Liquid-Phase Mass Transfer Coefficient in Bubble Columns. **Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.**, 13, 84–91, 1974.

AKTAR, A.; PAREEK, V.; TADÉ, M. CFD Simulations for Continuous Flow of Bubbles through Gas-Liquid Columns: Application of VOF Method. **Chemical Product and Process Modeling**, v. 2, article 9, 2007.

BAMBAKIDIS, G. Metal Hydrides. **Wright State University**, Dayton, Ohio, 1980.

BANNENBERG, N.; BERGMANN, B.; GAYE, H. Combined decrease of Sulphur, Nitrogen, Hydrogen and Total Oxygen in only one Secondary Steelmaking Operation. **Steel Research** **63**, v. 10, p. 431 – 437, 1992.

BESAGNI, G.; INZOLI, F.; ZIEGENHEIN, T. Two-Phase Bubble Columns: A Comprehensive Review. **ChemEngineering**, 2018.

BESAGNI, G.; INZOLI, F.; GALLAZZINI, L. On the Scale-up Criteria for Bubble Columns. **Petroleum**, in Press, 2017.

BOORSTEIN, W. M.; PEHLKE, R. D. Measurement of Hydrogen Solubility in Liquid Iron Alloys Employing a Constant Volume Technique. **Metallurgical Transactions**, v 5, 1974.

BRUNS, A. D. B.; FRANK, Th.; HAMILL, I.; SHI, J.-M. The Favre Averaged Drag Model for Turbulent Dispersion in Eulerian Multi-Phase Flows. **Fifth International Conference on Multiphase Flow**, ICMF-2004, Yokohama, Japan. 2004.

CHAO, B.T. Motion of Spherical Gas Bubbles in a Viscous Liquid at Large Reynolds Numbers. **Phys. Fluids**, 5, 69–79, 1962.

CHUANG, T.; HIBIKI, T. Interfacial Forces used in Two-Phase Numerical Simulation. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.113, 741-754, 2017.

CLIFT; GRACE; WEBER. Bubbles, Drops, and Particles. **Technical Report. Academic Press**. 1978.

DEEN, N. G.; SOLBERG, T.; HJERTAGER, B. H. Large Eddy Simulation of the Gas-Liquid Flow in a Square Cross-Sectioned Bubble Column. **Chemical Engineering Science**, v.56, 6341-6349, 2001.

- DIONISIO, R. P. Simulação Tridimensional de uma Coluna de Bolhas: Diferentes Abordagens Geométricas e de Modelagem. **Universidade Estadual de Campinas**, 2008.
- EKAMBARA, K.; DHOTRE, M. T. CFD Simulation of Bubble Column. **Nuclear Engineering and Design**. V. 240, p. 963-969, 2010.
- FRUEHAN, R. J. Overview of Steelmaking Processes and Their Development. **The AISE Steel Foundation**, p. 1 – 12, 1998.
- GAVRILJUK, V. Carbon, Nitrogen and Hydrogen in Steel: Similarities and Differences in their Effect on Structure and Properties. **Journal of Heat Treatment and Material**, 2010.
- GEMELLO, L.; PLAIS, C.; AUGIER, F.; MARCHISIO, D. Population Balance Modelling of Bubble Columns Under the Heterogeneous Flow Regime. **Chemical Engineering Journal**, 372, p. 590-604, 2019.
- GESTRICH, W.; KRAUSS, W. Die spezifische Phasengrenzfläche in Blasenschichten. **Chem. Ing. Tech.**, 47, 360–367, 1975.
- GUNJI, K.; ONO, K.; AOKI Y. The Effects of Various Elements on the Solubility of Hydrogen in Liquid Pure Iron. **Trans. Nat. Res. Inst. Met (Jpn.)**, 1964.
- HIGBIE, R. The Rate of Absorption of a Pure Gas into a Still Liquid during Short Periods of Exposure. **Transactions of the AIChE**, 31, 365-389, 1935.
- HORVATH, A.; JORDAN, C.; LUKASSER, M.; KUTTNER, C.; MAKARUK, A.; HARASEK, M. CFD Simulation of Bubbles Columns using the VOF Model: Comparison of Commercial and Open Source Solvers with an Experiment. **Chemical Engineering Transactions**, v.18, 2009.
- IGUCHI, M.; KAWABATA, H.; NAKAJIMA, K.; MORITA, Z. Measurement of Bubble Characteristics in a Molten Iron Bath at 1600°C using an Electroresistivity Probe. **Metallurgical and Materials Transactions B**, v. 26B, p. 57 – 74, 1995.
- IGUCHI, M.; CHIHARA, T. Water Model Study of the Frequency of Bubble Formation under Reduced and Elevated Pressures. **Metallurgical and Materials Transactions B**, v. 29B, p. 755 – 761, 1998.
- ILEGBUSI, O. J.; SZEKELY, J. The Modeling of Gas-Bubble Driven Circulations Systems, **ISIJ International**, vol. 30, (9), 1990, pp. 731-739.
- ISHII, M. Two-fluid model for two-phase flow. **2nd International Workshop on Two-phase Flow Fundamentals**. RPI, Troy, NY. 1979.
- JOHANSEN, S. T.; BOYSAN, F. Fluid Dynamics in Bubble Stirred Ladles: Part.II. Mathematical Modeling. **Metallurgical Transactions B**, v. 19B, 1988.
- KARNAUKHOV MM., MOROZOV AN. The solution of hydrogen in molten iron and its alloys with titanium, niobium, and tantalum. **Izv. Akad. Nauk SSSR, Otd. Tekh. Nauk**, 1948.

KAROONI, F.; WYNNE, B. P.; TALAMANTES-SILVA, J.; PHILLIPS, S. Hydrogen Degassing in a Vacuum Arc Degasser using Three-Phase Eulerian Method and Discrete Population Balance Model. **Steel Research**, 89, 2018.

KLEIMT, B.; CAPPEL, J.; HOFFMANN, J.; SHENG, D. J.; LANDA, S. Dynamic Process Models for on-line observation of the Vacuum Tank Degassing Process. **La Revue de Métallurgie – CIT**, 2003.

KOLEV, N. I. Multiphase Flow Dynamics 2: Thermal and Mechanical Interactions. Springer, Berlin, Germany, 2nd edition. 2005.

KOR, G. J. W.; GLAWS P. C. Ladle Refining and Vacuum Degassing. **The AISE Steel Foundation**, p. 661 – 713, 1998.

LAMONT, J. C.; SCOTT, D. S. An Eddy Cell Model of Mass Transfer into the Surface of a Turbulent Liquid. **AIChE Journal**, v.16, 1970.

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. Lectures in Mathematical Models of Turbulence. **Academic Press**, London, England. 1972.

LEGENDRE, D.; MAGNAUDET, J. The Lift Force on a Spherical Bubble in a Viscous Linear Shear Flow. **J. Fluid Mech.** 368. 81–126. 1998.

LIU, Y.; ERSSON, M.; LIU, H.; JONSSON, P. G.; GAN, Y. A Review of Physical and Numerical Approaches for the Study of Gas Stirring in Ladle Metallurgy. **Metallurgical and Materials Transactions B**. v. 50B, 2018.

LLANOS, C. A.; GARCIA-HERNANDEZ, S.; RAMOS-BANDERA, J., A.; BARRETO, J.; SOLORIO-DIAZ, G. Multiphase Modelling of the Fluidynamics of Bottom Argon Bubbling during Ladle Operations. **ISIJ International**, v. 50, p. 396-402, 2010.

LOPEZ DE BERTODANO, M. Turbulent Bubbly Flow in a Triangular Duct. **Ph.D. Thesis. Rensselaer Polytechnic Institute**, Troy, New York. 1991.

LOU, W.; ZHU, M. Numerical Simulation of Gas and Liquid Two-Phase Flow in Gas-Stirred Systems Based on Euler-Euler Approach. **Metallurgical and Materials Transactions B**, 2013.

MAEKAWA, S.; NALAGAWA, Y. The Effect of Some Alloying Elements on the Solubility of Hydrogen in Liquid Iron. **Research Reports of the Japan Steel Works, Ltd.**, 1961.

MARCHISIO, D. L.; FOX, R. O. Solution of Population Balance Equations Using the Direct Quadrature Method of Moments, **Journal Aerosol Science**, 2004.

MILLER, D. N. Scale-Up of Agitated Vessels Gas-Liquid Mass Transfer. **AIChE Journal**, v.20, 1974.

MORAGA, F. J.; BONETTO, R. T.; LAHEY, R. T. Lateral forces on spheres in turbulent uniform shear flow. **International Journal of Multiphase Flow**. 25. 1321–1372. 1999.

- MORI, K.; SANO, M.; SATO. Size of Bubbles Formed at Single Nozzle Immersed in Molten Iron, **T. ISIJ**, pp. 553-561, 1979.
- MORSI, S. A.; ALEXANDER, A. J.. An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow Systems. **J. Fluid Mech.** 55(2). 193–208. September 26 1972.
- NUNIS, A. L.; RIBEIRO, T. R.; FERREIRA NETO, J. B.; LEITE, M. V.; BADARACO, R. C.; SERANTONI, C. R. Model for Deshydrogenation during Secondary Steelmaking. **Iron and Steel Technology Conference and Exposition**, 2015, Ohio.
- OETERS, F. Metallurgy of Steelmaking. **Woodhead Publishing**, Cambridge, England, 1994.
- PFLEGER, D.; BECKER, S. Modeling and Simulation of the Dynamic Flow Behavior in a Bubble Column. **Chemical Engineering Science**, v. 56, 2001.
- RABHA, S.; SCHUBERT, M.; HAMPEL, U. Regime Transition in Viscous and Pseudo Viscous Systems: A Comparative Study. **AIChE Journal**, 60, 3079–3090, 2014.
- RZEHAK, R.; KREPPER, E.; LIFANTE, C. Comparative Study of Wall-Force Models for the Simulation of Bubbly Flows. **Nuclear Engineering and Design**, 253, p. 41-49, 2012.
- SAFFMAN, P. G. The Lift on a Small Sphere in a Slow Shear Flow. **J.Fluid Mech.** 22. 385–400. 1965.
- SAFFMAN, P. G. Corrigendum to: "The Lift on a Small Sphere in a Slow Shear Flow". **J.Fluid Mech.** 31. 624. 1968.
- ŞAL, S.; GÜL, Ö.F.; ÖZDEMİR, M. The Effect of Sparger Geometry on Gas Holdup and Regime Transition Points in a Bubble Column Equipped with Perforated Plate Spargers. **Chem. Eng. Process. Process Intensif.**, 70, 259–266, 2013.
- SANTOS, C. M. Simulação Tridimensional com Sistema Gás-Líquido em Colunas de Bolhas. **Universidade Estadual de Campinas**, 2005.
- SARRAFI, A.; MÜLLER-STEINHAGEN, H.; SMITH, J.M.; JAMIALAHMADI, M. Gas Holdup in Homogeneous and Heterogeneous Gas-Liquid Bubble Column Reactors. **Can. J. Chem. Eng.**, 77, 11–21, 1999.
- SATO, Y.; SEKOGUCHI, K. Liquid Velocity Distribution in Two-Phase Bubble Flow. **International Journal of Multiphase Flow**, v.2, p. 79-95, 1975.
- SCHILLER, L.; NAUMANN, Z. **Z. Ver. Deutsch. Ing.** 77. 318. 1935.
- SCHWARZ, M. P. Bubble Induced Turbulence in Two-Fluid Simulation of Bubbly Flow. **The 26th International Symposium on Transport Phenomena**, Leoben, Austria, 2015.
- SHENG, Y. Y.; IRONS, G. A. Measurement and Modeling of Turbulence in the Gas/Liquid Two-Phase Zone during Gas Injection. **Metallurgical Transactions B**, v. 24B, 1993.

- SIMONIN O.; VIOLLET P. L. Modeling of Turbulent Two-Phase Jets Loaded with Discrete Particles. **Phenomena in Multiphase Flows**. 259–269. 1990.
- SIMONIN, O.; VIOLLET, P. L. Predictions of an Oxygen Droplet Pulverization in a Compressible Subsonic Coflowing Hydrogen Flow. **Numerical Methods for Multiphase Flows**. FED91. 65–82. 1990.
- SMITH, B. L. On the modelling of bubbles plumes in a liquid pool. **Applied Mathematical Modelling** **22**, p. 773 – 797, 1998.
- SOKOLICHIN, A.; EIGENBERGER, G.; LAPIN, A. Simulation of Buoyancy Driven Bubbly Flow: Established Simplifications and Open Questions. **Journal Review, AIChE Journal**. 50:1. 24–45. January 2005.
- STENMARK, E. On Multiphase Flow Models in ANSYS CFD Software. **Chalmers University of Technology**, Sweden, 2013.
- TACKE, K. H.; SCHUBERT, H. G.; WEBER, D. J.; SCHWERDTFEGER, K. Characteristics of round vertical gas plume jets. **Metallurgical Transactions B**, v. 16, p. 394 - 402, 1985.
- THOMAS, B. G.; DENISOV, A.; BAI, H. Behavior of Argon Bubbles during Continuous Casting of Steel. **ISS 80th Steelmaking Conference**, p. 375-384, 1997.
- THORAT, B. N.; JOSHI, J. B. Regime Transition in Bubble Columns: Experimental and Predictions. **Exp. Therm. Fluid Sci**, v. 28, p. 423-430, 2004.
- TOMIYAMA, A. Struggle with computational bubble dynamics. **Third International Conference on Multiphase Flow**, Lyon, France. June 8–12, 1998.
- TOMIYAMA, A. Drag, Lift and Virtual Mass Forces Acting in a Single Bubble. **Third International Symposium on Two-Phase Flow Modeling and Experimentation**, Pisa, Italy, 2004.
- TOMIYAMA, A.; TAKAMASA T. Three-Dimensional Gas-Liquid Two-Phase Bubbly Flow in a C-Shaped Tube. **Ninth International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-9)**. San Francisco, CA. 1999.
- TROSHKO, A. A.; HASSAN, Y. A. A Two-Equation Turbulence Model of Turbulent Bubbly Flow. **International Journal of Multiphase Flow**. 22(11). 1965–2000. 2001.
- TURKDOGAN, E. Rate Phenomena: Estimation of Bubble Size for Uniformly Dispersed Bubbles in the Steel Bath, **Fundamentals of steelmaking: The Institute of Materials**, pp. 74-81, 1996.
- VAN DIERENDONCK, L.; FORTUIN, J.; VENDERBOS, D. The specific contact area in gas-liquid reactors. **In Proceedings of the 4th European Symposium on Chemical Reactor Engineering**, Brussels, Belgium, pp. 205–215, 1968.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method, Second Edition, **Pearson Education**, 2007.
- WANG, L.; LEE, H.; HAYES, P. A New Approach to Molten Steel Refining Using Fine Gas Bubbles, **ISIJ International**, vol. 36, (1), pp. 17-24, 1996.

- WEINSTEIN, M.; ELLIOT, J. F. **Trans. Metall. Soc. AIME**, 1963, v. 227, p. 382.
- WILCOX, D. C. Turbulence Modeling for CFD. DCW Industries, Inc. La Canada, California. 1998.
- XIE, Y.; ORSTEN, S.; OETERS F. Behaviour of Bubbles at Gas Blowing into Liquid Wood's Metal, **ISIJ International**, vol. 32, (1), pp. 66-75, 1992.
- XU, Y.; ERSSON, M.; JONSSON, P. Numerical Simulation of Argon Bubble Rising in Molten Metal under a Laminar Flow. **Steel Research International**, v. 85, 2014.
- XU, Y. A Study of Bubbles Behavior in a Liquid Steel Bath. **School of Industrial Engineering and Management**, 2015.
- YU, S.; LOUHENKILPI, S. Numerical Simulation of Dehydrogenation of Liquid Steel in the Vacuum Tank Degasser. **The Minerals, Metals, and Materials Society and ASM International**, 2012.
- ZHANG, D.; DEEN, N. G.; KUIPERS, J. A. M. Numerical Simulations of the Dynamic Flow Behavior in a bubble column: a Study of Closures for Turbulence and Interface Forces. **Chemical Engineering Science**, v. 61, 2006.