

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

CECILIA MAGESKI MADEIRA SANTOS

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO EFEITO HIDRODINÂMICO NA CORROSÃO
EM ACIDENTES DE LINHAS EM TUBULAÇÕES**

VITÓRIA
2012

CECILIA MAGESKI MADEIRA SANTOS

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO EFEITO HIDRODINÂMICO NA CORROSÃO
EM ACIDENTES DE LINHAS EM TUBULAÇÕES**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Márcio Ferreira Martins.

VITÓRIA

2012

CECILIA MAGESKI MADEIRA SANTOS

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO EFEITO HIDRODINÂMICO NA CORROSÃO
EM ACIDENTES DE LINHAS EM TUBULAÇÕES**

Dissertação apresentada ao programa da Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade do Espírito Santo, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia mecânica.

Aprovada em 17 de Dezembro de 2012.

COMITÊ EXAMINADOR

Prof. Dr. Márcio Ferreira Martins, - Orientador
Universidade Federal do Espírito Santo

Prof. Dr. Marcelo Camargo S. de Macêdo, - Co-orientador
Universidade Federal do Espírito Santo

Prof. Dr. Flávio José da Silva, - Examinador interno
Universidade Federal do Espírito Santo

Prof. Dr. Fábio Alfaia da Cunha, - Examinador externo
Universidade de Brasília

VITÓRIA

2012

Agradecimentos

À Deus que me deu saúde e vida com abundância para que conseguisse realizar este trabalho.

À minha mãe que cuidou, me apoiou, acreditou em mim durante todas as etapas da minha vida, me sustentou por muitos anos e me proporcionou chegar até aqui.

Ao meu esposo que esteve ao meu lado, sendo meu companheiro compreensivo e amigo, me incentivando e me motivando durante o período de estudo e desenvolvimento deste trabalho.

Ao amigo Mário pelas dicas de programação e suporte intelectual essenciais para elaboração deste trabalho.

Ao Ramon pela pelo ensino do CFX e linguagem de programação no Latex.

Aos demais companheiros de mestrado.

Ao Prof. Márcio pela orientação na parte de CFD, pela atenção dedicada nas muitas dificuldades encontradas na programação para que o sucesso deste fosse alcançado.

Ao Prof. Marcelo pela orientação na parte de corrosão, pela atenção nas análises de dados tão importante para a realização, sem o qual não concluir o trabalho.

Aos funcionários e professores do PPGEM que diretamente e indiretamente ajudaram na minha caminhada no mestrado.

Ao auxílio financeiro do PRH-29, FINEP, CNPQ, CAPES.

Agradeço imensamente....

Resumo

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO EFEITO HIDRODINÂMICO NA CORROSÃO EM ACIDENTES DE LINHAS EM TUBULAÇÕES

O impacto de partículas em paredes internas de componentes de fluxo, tais como tubos, conexões, válvulas e bombas podem resultar no aumento da corrosão devido à contínua remoção dos "protetores de corrosão", assim como devido à erosão do material base constituinte destes componentes, especialmente nas partes em que é projetado o fluxo. O comportamento hidrodinâmico no escoamento de fluidos corrosivos é um fenômeno importante para diversas aplicações das indústrias. Nesse caso, o fator limitante é a presença de oxigênio dissolvido na solução e a transferência de oxigênio para a superfície concernente aos efeitos de corrosão. A Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) pode ser utilizada para calcular a difusão do oxigênio no fluxo e sua transferência para a superfície reagente. O presente trabalho apresenta os resultados de simulações via CFD para o comportamento hidrodinâmico de um fluido em uma contração, bem como a difusão do oxigênio no fluxo e a transferência de oxigênio para a superfície de modo a estimar a perda de massa da superfície, utilizando dois modelos de escoamento turbulento (Modelo RNG $k - \varepsilon$ e SST $k - \omega$) em uma geometria com contração-expansão. As simulações, em seguida, foram validadas utilizando trabalhos experimentais presentes na literatura.

Palavras-chave: corrosão, erosão, turbulência, escoamento, CFD.

Abstract

NUMERICAL SIMULATION OF EFFECT HYDRODYNAMIC IN CORROSION ACCIDENTS LINES IN PIPES

The impact of particles in internal wall of flow components, such as tubes, connections, valves and pumps results in increased corrosion due to the continuous removal of the protective layers of corrosion, and to the erosion of the base material, especially in the parts that the flow is projected. The hydrodynamic behavior in corrosive fluid flow is an important phenomenon for various applications of industries. In this case, the limiting factor is the presence of dissolved oxygen in the solution and the transfer of oxygen to the surface on effects of corrosion. The Computational Fluid Dynamics (CFD) can be used to compute this diffusion of oxygen in the stream and its transfer to the surface reaction. This paper presents the results of simulations via CFD for hydrodynamic behavior of a fluid after a expansion as well as oxygen diffusion in the flow and transfer of oxygen to the surface in order to estimate the mass loss from the pipe surface, using two models turbulent flow (Modelo RNG $k - \varepsilon$ e SST $k - \omega$) in contraction-expansion geometry. The simulations were validated after using the experimental work present in the literature.

Keywords: corrosion, erosion, turbulence, flow, CFD.

Lista de Figuras

1	Componentes de tensão num volume de controle.	p. 12
2	Camada Limite.	p. 14
3	Subcamada viscosa da camada limite turbulenta.	p. 15
4	Domínio físico do problema para uma expansão.	p. 24
5	Domínio físico do problema para uma contração-expansão.	p. 24
6	Malha referente à Hidrodinâmica.	p. 35
7	Teste de <i>comprimento de saída</i> (L_d) para a Hidrodinâmica.	p. 35
8	Teste de malha para a Hidrodinâmica.	p. 36
9	Malha referente à Hidrodinâmica mais corrosão.	p. 37
10	Teste do comprimento de saída (L_d) para a perda de massa referente à Hidrodinâmica mais corrosão.	p. 38
11	Comprimento de desenvolvimento.	p. 38
12	Gráfico $u^+ X y^+$	p. 39
13	Teste de malha para a hidrodinâmica nas regiões a 8D, 12D e 17D à jusante da expansão.	p. 40
14	Teste de Malha para a Perda de Massa (Seção 1-região à montante da contração; Seção 2-região da contração; Seção 3-região à jusante da expansão).	p. 41
15	Gráfico y^+ para a Malha 3 utilizada para simular o transporte de espécies.	p. 41
16	Perfis de entrada do escoamento.	p. 44

17	Comparação dos resultados com os dados experimentais (FOUNTI; KLIPFEL, 1998) para a velocidade axial à jusante da expansão (regiões à 9 mm, 50 mm e 75 mm).	p. 44
18	Comparação dos resultados com os dados experimentais (FOUNTI; KLIPFEL, 1998) para a velocidade axial à jusante da expansão (regiões à 100 mm, 150 mm e 200 mm).	p. 45
19	Comparação dos resultados com os dados experimentais (FOUNTI; KLIPFEL, 1998) para a energia cinética turbulenta à jusante da expansão (regiões à 9 mm, 50 mm e 75 mm).	p. 46
20	Comparação dos resultados com os dados experimentais (FOUNTI; KLIPFEL, 1998) para a Energia Cinética Turbulenta à jusante da expansão (regiões à 100 mm, 150 mm e 200 mm).	p. 46
21	Comprimento de recirculação para os Modelos RNG $k - \epsilon$ e SST $k - \omega$	p. 47
22	Linhas de correntes de velocidade geradas à jusante da expansão referentes aos modelos RNG $k - \epsilon$ (abaixo) e SST $k - \omega$ (acima).	p. 47
23	Comparação dos resultados de simulação com os dados experimentais de Lotz e Postlethwaite (1990) para a corrosão com concentração nula de partículas e, com e sem a presença de filme protetor.	p. 48
24	Comparação do resultado do modelo de CFD com dados experimentais de erosão-corrosão com concentração de partículas em 2% por volume de areia no escoamento de Lotz e Postlethwaite (1990) com filme protetor removido	p. 50
25	Perda de massa para tubulação de parede lisa e com rugosidade de 1mc, 5mc e 10mc.	p. 51
26	Variação dos parâmetros hidrodinâmicos e a perda de massa à montante da contração.	p. 52
27	Variação dos parâmetros hidrodinâmicos e a perda de massa à jusante da expansão.	p. 54
28	Resolução da camada limite hidrodinâmica.	p. 55

29	Resolução da camada limite de concentração de espécie.	p.55
30	Comparação dos campos de concentração de espécie os modelos RNG $k - \varepsilon$, à esquerda, e SST $k - \omega$, à direita, na mesma escala à jusante da expansão.	p.56
31	Zona de recirculação para os modelos RNG $k - \varepsilon$ e SST $k - \omega$	p.57
32	Linhas de correntes de velocidade geradas para os modelos RNG $k - \varepsilon$ (acima) e SST $k - \omega$ (abaixo).	p.58

Lista de Tabelas

1	Comparação entre dois tipos de escoamentos	p.7
2	Regime de escoamento de acordo com número de Reynolds	p.15
3	Constantes da camada Log-Law	p.17
4	Constantes do modelo de turbulência $k - \varepsilon$	p.19
5	Constantes do modelo de turbulência RNG $k - \varepsilon$	p.21
6	Constantes do modelo de turbulência $k - \omega$	p.21
7	Constantes do modelo de turbulência SST $k - \omega$	p.22
8	Condições de entrada para a Hidrodinâmico	p.26
9	Condições de entrada para a Hidrodinâmica mais corrosão	p.26
10	Malhas utilizadas para Hidrodinâmica	p.36
11	Malhas utilizadas para Hidrodinâmica mais corrosão	p.39
12	Dados referentes às malhas	p.42

Sumário

1	INTRODUÇÃO	p.1
1.1	Estado da Arte	p.3
1.2	Objetivo	p.9
2	FORMULAÇÃO FÍSICA E COMPUTACIONAL	p.10
2.1	Teoria Clássica da Mecânica dos Fluidos	p.10
2.1.1	Equações Governantes do escoamento	p.10
2.1.1.1	Equação da Continuidade	p.11
2.1.1.2	Equação da Quantidade de Movimento	p.11
2.1.1.3	Equação da Conservação de Espécies	p.13
2.1.2	Camada Limite	p.13
2.2	Modelos de Turbulência	p.17
2.2.1	Modelo $k - \varepsilon$ Padrão	p.19
2.2.2	Modelo LRN $k - \varepsilon$	p.19
2.2.3	Modelo RNG $k - \varepsilon$	p.20
2.2.4	Modelo $k - \omega$	p.21
2.2.5	Modelo SST $k - \omega$	p.21
2.3	Equação do Transporte de Espécies Turbulento	p.22
2.4	Caracterização do Problema	p.23
2.4.1	Condições de Contorno Hidrodinâmico	p.25

2.4.1.1	Condições de Entrada	p.25
2.4.1.2	Condições de Parede	p.28
2.4.1.3	Condições de Saída e de Simetria	p.29
2.4.2	Condições de Contorno de Transferência de Massa	p.29
2.4.2.1	Condições de Entrada	p.29
2.4.2.2	Condições de Saída e de Simetria	p.30
2.4.2.3	Condições de Parede	p.30
2.5	Integração Numérica	p.30
2.6	Modelagem da Corrosão	p.31
2.7	Estudo de Convergência da Malha	p.34
2.7.1	Hidrodinâmica	p.35
2.7.2	Hidrodinâmica mais corrosão	p.37
3	RESULTADOS E DISCUSSÕES	p.43
3.1	Resultados referentes à Hidrodinâmica	p.43
3.1.1	Comprimento de Recirculação	p.45
3.2	Resultados referentes à Hidrodinâmica mais corrosão	p.47
3.2.1	Influência dos Parâmetros Hidrodinâmicos na Perda de Massa	p.51
3.2.2	Camada Limite Hidrodinâmica e de Concentração	p.53
3.2.3	Campos de Concentração de Espécie	p.56
3.2.4	Comprimento de Recirculação	p.56
4	CONCLUSÕES	p.59
4.1	Hidrodinâmica	p.59
4.2	Hidrodinâmica mais Corrosão	p.60

5 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

p.61

Referências

p.62

1 INTRODUÇÃO

A corrosão é um dos principais fatores responsáveis pela falha de diversos equipamentos e peças na indústria. A habilidade de modelar e de prever os processos de desgaste permitem a otimização da programação de paradas de manutenção e evitam, assim, paradas desnecessárias. Além disso, esta modelagem pode ser aplicada no estágio de projeto para reduzir a suscetibilidade de desgaste das partes. Devido à complexidade da corrosão e a grande quantidade de variáveis interligadas, muitas tentativas foram feitas para identificar os fatores que se relacionam ou controlam o processo de alguma variável facilmente mensurável.

Na indústria a ocorrência dos chamados "acidentes de linha" nas tubulações são comuns e a corrosão nestes locais é acentuada devido à existência de zonas de recirculação, que ocorrem antes e depois de contrações e após a expansões. A erosão-corrosão é um problema na indústria da geração de energia, do processamento e produção de óleo. O custo e segurança de ambos são considerações importantes.

O impacto de partículas em paredes internas de componentes de escoamento, tais como tubos, conexões, válvulas e bombas resulta no aumento da corrosão devido à contínua remoção dos "protetores de corrosão", assim como devido à erosão do material de base, especialmente nas partes em que é projetado o fluxo (acidentes de linha). O comportamento hidrodinâmico e da transferência de massa no escoamento de fluidos corrosivos é um fenômeno importante para diversas aplicações das indústrias, por isso se faz necessário entender como ocorre a corrosão acelerada pelo escoamento, descrevendo quais são os parâmetros importantes e como eles são determinados. A transferência de massa pode ocorrer por difusão molecular através de um sólido, e por convecção através de um fluido em movimento. Os parâmetros hidrodinâmicos são: o número de Reynolds (Re) e a tensão de cisalhamento na parede. O parâmetro que envolve a transferência de massa é o coeficiente de transferência de massa (Km).

A erosão-corrosão em fase única ou em diversas fases é uma grande preocupação para um certo número de indústrias, incluindo a de transporte de lama, a de geração de energia e a de extração de petróleo. Essa última está principalmente relacionada com o transporte de óleo das reservas no subsolo para as refinarias e antes do óleo ser processado existem um certo número de impurezas contidas nesse óleo, tais como água, dióxido de carbono, e areia. A água e o dióxido de carbono causam a corrosão na tubulação e as partículas de areias, por sua vez, causam a remoção dos filmes protetores do metal base contido na parede da tubulação, que diminuem a espessura da parede da tubulação gerando assim um possível colapso na tubulação.

Existem fortes indícios de que o comportamento hidrodinâmico ligado a um dado regime de escoamento pode causar efeitos significativos na taxa de corrosão, incluindo uma maior velocidade de transferência de massa de reagente (SILVERMAN, 1988), um aumento no cisalhamento do fluido (SILVERMAN, 1984), uma maior tendência a romper a camada de proteção quando há o fenômeno de erosão pela existência de partículas sólidas no fluido (POSTLETHWAITE; HAWRYLAK, 1974).

Em escoamentos com números de Reynolds elevados, as pequenas escalas de turbulência são difíceis de resolver numericamente. As mesmas dificuldades surgem em investigações experimentais, uma vez que o tamanho, da maioria dos sensores de medição, não é suficientemente pequeno para resolver as pequenas escalas do fluxo. Por isso, tornou-se prática comum aplicar combinadas técnicas numéricas e experimentais. Tais abordagens combinadas vêm a ser mais bem sucedidas quando um determinado parâmetro de um fluxo turbulento é o objetivo de uma investigação.

A simulação numérica atualmente é uma ferramenta importantíssima, que devido aos grandes avanços na tecnologia dos processadores dos computadores, está cada vez mais poderosa e acessível. Muitos modelos de turbulência, usados para resolver escoamentos complexos não são resolvidos analiticamente e necessitam do auxílio da CFD para a obtenção de resultados. O software utilizado para realizar a modelagem e as simulações do escoamento foi o ANSYS CFX.

Esse trabalho estima a perda de massa da superfície da tubulação, causada pela "transferência" de oxigênio contido no fluido que escoar na tubulação.

1.1 Estado da Arte

Há disponível na literatura vários estudos envolvendo corrosão em escoamento turbulento, abordando transferência de massa como fator preponderante para que ocorra o fenômeno da corrosão. Alguns desses são experimentais dando assim base para comparação dos resultados numéricos obtidos no presente trabalho.

Dentre os parâmetros determinantes, para o cálculo da transferência de massa, está o coeficiente de transferência de massa definido como $k_m = \frac{Sh \cdot D}{d}$, onde, Sh é número de Sherwood que representa o aumento da transferência de massa como resultado do movimento do fluido (convecção) em relação à transferência de massa apenas ao nível molecular (difusão), D é o coeficiente de difusão mássica, e d um fator geométrico.

Postlethwaite et al. (1986) afirmaram que a corrosão-erosão de uma tubulação de aço carbono numa solução salina com areia é controlada pela transferência de massa de oxigênio para a superfície reagente e que o papel das partículas sólidas é de prevenir a formação de uma película de filme protetor completo. Neste mesmo foco Lotz e Postlethwaite (1988) encontraram um efeito significativo da rugosidade da superfície de um duto vertical na transferência de massa de oxigênio em uma solução aquosa à base de areia. Os mesmos autores (LOTZ; POSTLETHWAITE, 1990) realizaram um estudo experimental da erosão-corrosão num escoamento, utilizando uma geometria com contração-expansão, sob condições de regime turbulento com o objetivo de elucidar a influência da geometria e da estrutura do escoamento na taxa de perda de massa e na formação de produto de corrosão (filme protetor) na parede. O estudo foi realizado para os pares de aço carbono/solução aerada, de aço carbono/gás carbônico e de aço inoxidável 304/ CO_2 , ar, nitrogênio. Os autores atribuíram, dado o que foi observado no experimento, que o aumento do transporte de oxigênio era devido ao aumento de turbulência dentro da camada limite de transferência de massa.

Além das contribuições em relação a resultados experimentais, o mesmo grupo de trabalho, agora preocupados com o estudo da influência do comportamento do fluido na transferência de massa, Nesic e Postlethwaite (1991a) modelaram um escoamento de um fluido em uma única fase e concluíram que as taxas de transferência de massa são diretamente relacionadas com o nível de turbulência próximo a parede. Os autores mostraram também que a camada de óxido de ferro formada - filme protetor -, age como uma resistência à transferência de massa. Nesic e Postlethwaite (1991b), percebendo a

necessidade da indústria em estudar fluidos contendo mais de uma fase, modelaram um escoamento multifásico (composto por água e areia) e concluíram que a perda de massa da parede de uma tubulação se dá através dos mecanismos de corrosão, e que o impacto, das partículas de areia nas paredes, é somente responsável pela remoção da película de filme protetor. As taxas de erosão foram de uma ordem de magnitude menor que as de corrosão.

Os efeitos da transferência de massa na corrosão de metais, tais como o ferro e o cobre, ao longo do comprimento de entrada de uma tubulação, foram investigados por Wang e Postlethwaite (1997). Este comprimento de entrada foi definido como sendo a distância onde a transferência de massa alcança o estado completamente desenvolvido (análoga ao desenvolvimento da camada limite hidrodinâmica). Uma das principais conclusões do trabalho, reporta que se a corrosão é controlada pela transferência de massa do oxigênio (contido no fluido) para o metal, a taxa de corrosão aumenta com o aumento do número de Reynolds, e diminui ao longo da região do comprimento de entrada.

O estudo da relação erosão-corrosão e comportamento do fluido, este último no que refere-se ao seu regime de escoamento quando turbulento, incentivou inúmeros estudos numéricos nos últimos 30 anos. Progressos consideráveis no desenvolvimento da simulação de escoamentos turbulentos foram muito facilitados devido ao desenvolvimento tecnológico, principalmente com o aumento da capacidade de processamento dos computadores. A abordagem das propriedades hidrodinâmicas de escoamento turbulento como a *Energia Cinética Turbulenta* e a *Taxa de dissipação da Energia Turbulenta* aparecem portanto como fatores influenciadores na transferência de massa. No entanto, essa influência ainda não foi completamente entendida. Em muitos trabalhos realizados, viu-se que a taxa de transferência de massa tem grande efeito na taxa de corrosão e essa taxa está diretamente relacionada ao regime de escoamento existente no duto, ou seja, se é laminar ou turbulento, se está desenvolvido (se há influência da camada limite) ou não, e se há acidentes de linha perturbando o mesmo. Para o regime turbulento existem modelos numéricos que através de simulações computacionais descrevem o comportamento do fluido. Existem fortes indícios de que o comportamento hidrodinâmico do fluido ligado a um dado regime de escoamento pode causar uma maior velocidade de transferência de massa de reagente (SILVERMAN, 1988), um aumento no cisalhamento do fluido (SILVERMAN, 1984) o que afetam a taxa de corrosão, por isso a necessidade de se relacionar a taxa de transferência de massa com o regime

turbulento.

Founti e Klipfel (1998), com a finalidade de investigar o fenômeno de colisão (partícula-partícula) em um escoamento descendente, desenvolveram um modelo com base no rastreamento simultâneo Lagrangiano de todas as partículas. Resultados computacionais com e sem a utilização do modelo de colisão são apresentados e comparados com os dados experimentais. Os resultados estabelecem que os regimes de escoamento onde colisões tornam-se significantes modificaram a energia cinética turbulenta das partículas. É mostrado que colisões partícula-a-partícula induzem o escoamento a uma pequena variação das velocidades de deslizamento de partículas do fluido e reduzem a energia cinética turbulenta da fase dispersa no fluido, principalmente na zona da camada de cisalhamento, onde a energia cinética turbulenta do fluido atinge valores máximos. As colisões entre as partículas favorecem uma redução do valor local da energia cinética turbulenta nas regiões de elevada turbulência do fluido, principalmente na zona da camada de cisalhamento do fluxo e perto das paredes do tubo.

Abdel-Aziz et al. (2010) investigaram o comportamento da transferência de massa entre líquido-sólido em tubos helicoidais sob condições de escoamento turbulento. Além disso examinaram a influência da concentração de um polímero, Poliox WSR-301, utilizado como redutor de arraste na taxa de transferência de massa nesses tubos comparando com os resultados em tubos em linha reta. A redução da taxa de transferência de massa pela adição do polímero se dá ao fato de ocorrer a redução da ação da tensão de cisalhamento no filme de óxido e de não haver o rompimento deste filme o qual ocorreria com a alta tensão de cisalhamento existente sem o polímero. Isso reduz a difusão do oxigênio em tais tubos, diminuindo a erosão-corrosão. Mostraram que a taxa de transferência de massa em tubos helicoidais é maior do que em tubos retos, e que o aumento da concentração de polímero resulta numa redução no coeficiente de transferência de massa.

Postlethwaite et al. (1992) e Nesic (2006) perceberam a necessidade das indústrias em prever a corrosão em tubulações sem a necessidade de testes em campo. Postlethwaite et al. (1992) apresentaram um modelo geral para prever a taxa de transferência de massa na parede sob condições de escoamento turbulento para uma expansão abrupta e uma contração abrupta. O modelo é baseado no $k - \varepsilon$ padrão e $k - \varepsilon$ Eddy Viscosity Model (EVM). O modelo $k - \varepsilon$ é um modelo de turbulência que utiliza além das equações governantes do escoamento duas outras equações de transporte modeladas

baseada na viscosidade turbulenta, (que é uma idealização conhecida como hipótese de Boussinesq) que são resolvidas separadamente, uma para energia cinética (k) e outra para o termo de dissipação da energia cinética (ε), considerando que os tensores de Reynolds são proporcionais aos gradientes de velocidade média. Já no modelo $k - \varepsilon$ EVM as tensões de turbulência adicionais são dadas por aumentar a viscosidade molecular com uma viscosidade turbulenta que pode ser uma simples dissipação viscosa constante. No modelo proposto a transferência de massa foi modelada por uma analogia entre os mecanismos de momento turbulento e transporte de massa através do conceito do número de Schmidt turbulento. Os autores concluíram que a taxa de corrosão local controlada pela transferência de massa pode ser realmente modelada por uma aplicação em 2-D, utilizando a teoria Baixo Número de Reynolds (LRN)(teoria que envolve a integração das equações através da subcamada viscosa, região próximo à parede em que ocorre a corrosão em uma tubulação, com o auxílio de um modelo de turbulência), por $k - \varepsilon$, em escoamento turbulento e com um modelo de transferência de massa. Além disso viram que esse método pode ser adaptado para situações onde pequenas porções do filme protetor tiverem sido removidas pelo efeito do escoamento.

O escoamento com separação da camada limite, tem importantes aplicações em diversas áreas da engenharia. Exemplos podem ser encontrados no entorno de aerofólios, lâminas de turbinas, difusores, reduções de dutos e muitos sistemas de fluxo relevantes. Esse fenômeno de separação e recolamento do fluido nada mais é que o descolamento/recolamento da camada limite hidrodinâmica. Este fenômeno gera um escoamento extremamente complexo e suas características hidrodinâmicas, de transferência de massa, entre outros são de difícil modelagem, também acredita-se ser a origem da instabilidade no escoamento, nas flutuações de pressão, nos ruídos, etc.. Além disso, esta região de recirculação do escoamento tende a melhorar a transferência de calor e massa e aumentar a mistura de fases no escoamento. O conhecimento detalhado da estrutura do escoamento é um elemento essencial para analisar os fenômenos de transporte ocorrente no escoamento.

O escoamento com expansão abrupta em um duto, ou escoamento sobre degrau, é o caso normalmente utilizado para testar a capacidade de um modelo de turbulência em simular a complexa região de recirculação (região onde ocorre a separação da camada limite) após o degrau. A análise numérica desta geometria é normalmente utilizada para avaliar o desempenho de modelos de turbulência. Com isso Durrett et al. (1988) realizaram, experimentalmente, através de LDV (Laser Doppler velocime-

try), uma tentativa de mapear o campo de velocidade radial e axial próximo a uma expansão axissimétrica em uma geometria 2-D. Avaliaram principalmente a região de recirculação após a expansão, já que nesta região ocorre uma grande variação dos níveis de turbulência, e velocidade radial é bem significativa. O modelo de Nagano-Tagawa (Y.NAGANO; TAGAWA, 1990) foi estudado e modificado por Abel et al. (1994) para prever com mais eficiência do descolamento e do recolamento da camada limite de um escoamento em regime turbulento numa geometria com expansão (com degrau). Além disso, a capacidade de quatro modelos de turbulência em prever o campo de velocidade, a energia cinética turbulenta e o comprimento da zona de recirculação foi investigada por Koronaki et al. (2001). Em geral, viram que todos os modelos previram com certa precisão o campo de velocidade à jusante do ponto de recolamento. Porém dentre os modelos escolhidos, o modelo RNG $k - \varepsilon$ (YAHKOT et al., 1992) foi o que melhor previu todos os parâmetros estudados.

Poulson (1999) mostrou diferenças importantes entre escoamentos normal linear e um escoamento contendo zonas de recirculação, ou seja, com expansão quando se trata de erosão corrosão. Estas diferenças podem ser vistas na Tabela 1.

Escoamento linear
- Transferência de massa está relacionada com a tensão de cisalhamento;
- Turbulência é criada próximo à parede;
- Se desenvolver a rugosidade isso refletirá na estrutura do escoamento;
- Transferência de massa e o gradiente de pressão aumentam;
- A taxa de erosão-corrosão aumenta.
Escoamento com acidentes de linha
- Transferência de massa não é relacionada com a tensão de cisalhamento;
- Turbulência é gerada longe da parede;
- Não há evidência de que se desenvolver a rugosidade irá aumentar a transferência de massa;
- A taxa de erosão-corrosão tende a ser constante.

Tabela 1: Comparação entre dois tipos de escoamentos

Simulações numéricas realizadas por Hasegawa e Kasagi (2009) para avaliar a taxa de transferência de massa turbulenta em uma parede sólida considerando mudanças significativas no número de Schmidt (Sc), é um número adimensional definido como a razão de difusividade de momento (viscosidade) e difusividade de massa, fisicamente relaciona a espessura relativa da camada hidrodinâmica e uma camada limite de transferência de massa. Os autores confirmaram nas simulações a dependência da taxa de

transferência de massa com o número de Schmidt, sofrendo assim uma redução mais acentuada que a correlação convencional.

Davis e Frawley (2009) estudaram a erosão-corrosão em acidentes de linha. Entre eles estão expansões e contrações. Os autores avaliaram numericamente, utilizando o CFD FLUENT v6.3, a perda de massa em uma geometria com contração-expansão com razões de 2:1 e 1:2 utilizando uma correlação para calcular a taxa de corrosão a partir da concentração como dado de saída na simulação. A correlação é do tipo:

$$CR = \frac{2 \cdot D \cdot C_{fO_2} \cdot M_{Fe} \cdot const}{\rho_{Fe} \cdot \Delta y} \quad (1.1)$$

- C_{fO_2} é a concentração de oxigênio pontual [kg/m^3];
- M_{Fe} é a massa molar do ferro [$kg/kmol$];
- ρ_{Fe} é a massa específica do ferro [kg/m^3];
- Δy a distância entre o centro da primeira célula da malha e a parede [m].

Xiong et al. (2011) selecionaram cinco modelos de turbulência, entre eles, três LRN (Low Reynolds Number) $k - \varepsilon$, (AKN (ABEL et al., 1994), HL (HWANG; LIN, 1998) e LB (LAM; BREMHORST, 1981)), um LRN $k - \omega$ (WX (WILCOX, 2006)) e o $k - \omega$ SST, utilizando altos números de Schmidt. Estes modelos são formados por duas equações e que são capazes de modelar a turbulência próximo a parede. Avaliaram tais modelos num escoamento através de uma expansão e um contração-expansão para verificar o desempenho geral dos modelos em prever a transferência de massa, mostrando assim suas aplicabilidades no estudo da Corrosão Acelerada pelo Escoamento (FAC). Chegaram a conclusão de que os modelos baseados em $k - \omega$, WX e SST, previram melhor a região de recirculação, tensor de baixo Reynolds e energia cinética turbulenta.

Apesar de a literatura disponibilizar vários trabalhos que analisam a corrosão em escoamento turbulento, poucos autores utilizam-se de CFD para prever, com melhor exatidão, a corrosão em tubulações. Percebe-se ainda que o fenômeno da transferência de massa é mais explorada, havendo poucos estudos da taxa de corrosão (perda de massa) propriamente dita. A maior parte dos trabalhos são experimentais o que certamente dificulta a análise de parâmetros e a flexibilidade da investigação. Assim a

proposta deste trabalho é analisar o escoamento de água saturada de oxigênio em uma tubulação sujeita a um regime turbulento contendo dois acidentes de linhas típicos consecutivos, uma contração seguida de uma expansão abrupta, obtendo posteriormente a taxa de corrosão e a perda de massa na parede da tubulação.

1.2 Objetivo

O objetivo do presente trabalho é estimar a perda de massa causada pela transferência de oxigênio, contido no fluido, para o metal reagente que escoar numa tubulação em fase única, através das equações propostas por Keating e Nesic (2001), para uma geometria contendo contração-expansão e validar os resultados utilizando dados experimentais obtidos por Lotz e Postlethwaite (1990). Para que isso seja possível, primeiramente se faz necessário utilizar-se de uma geometria contendo uma região de expansão para validar o modelo hidrodinâmico, e depois aplicando este modelo hidrodinâmico numa geometria contendo uma região de contração-expansão para estimar essa perda de massa na parede da tubulação. Utilizou-se para comparação dois modelos de turbulência, RNG $k - \epsilon$ (que utiliza a teoria de renormalização de grupo) (YAKHOT; ORSZAG, 1986) e SST (Shear Stress Transport) $k - \omega$ (MENTER, 1994). Além disso, o estudo de convergência da malha é realizada para previsões mais precisas. As geometrias utilizadas foram escolhidas por haver dados experimentais na literatura tanto de desgaste quanto dos parâmetros do escoamento.

2 *FORMULAÇÃO FÍSICA E COMPUTACIONAL*

2.1 Teoria Clássica da Mecânica dos Fluidos

Esta seção tem como objetivo expor o equacionamento que rege o escoamento turbulento de um fluido, o conceito de camada limite, número de Reynolds e os modelos de turbulência.

2.1.1 Equações Governantes do Escoamento

A descrição matemática do escoamento de um fluido é baseada nas leis gerais da conservação. Essas leis foram derivadas a partir do fato que, em geral, algumas medidas devem ser conservadas em um volume específico, conhecida como volume de controle.

A forma geral da conservação de um escalar qualquer, ϕ , e sua respectiva difusividade, Γ , é:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \Gamma \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S_\phi \quad (2.1)$$

Onde:

- ρ é a densidade do fluido [kg/m^3];
- t é o tempo [s];
- u é a velocidade [m/s];
- x é coordenada cartesiana [m].

2.1.1.1 Equação da Continuidade

Especifica que a massa de um sistema é constante com o tempo, ou seja, a taxa de variação da massa no volume de controle é igual ao saldo dos fluxos de massa através da superfície de controle. Considerando a condição de incompressibilidade do fluido, tratando o fluido como contínuo e descrevendo-o em termos de suas características macroscópicas, temos a equação da conservação de massa ou equação da continuidade, descrita a seguir:

$$\frac{\partial(\rho)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (2.2)$$

2.1.1.2 Equação da Quantidade de Movimento

Tal equação representa a força exercida por um fluido em escoamento permanente descrevendo a taxa de aumento da quantidade de movimento do volume do fluido que deve ser igual ao somatório de forças na partícula de fluido e pode ser escrita como:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (2.3)$$

e da hipótese de que o fluido é Newtoniano, isto é, os fluidos nos quais a tensão de cisalhamento é diretamente proporcional à taxa de deformação,

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \left(p + \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \delta_{ij} \quad (2.4)$$

obtém-se a equação de Navier-Stokes

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i \quad (2.5)$$

- μ é a viscosidade dinâmica [Pa.s];

- p é a pressão estática [Pa];
- g_i é a aceleração da gravidade [m/s^2];

A equação da conservação da quantidade de movimento (Navier-Stokes) resulta da aplicação direta da segunda lei de Newton, considerando um fluido newtoniano, isotrópico e homogêneo.

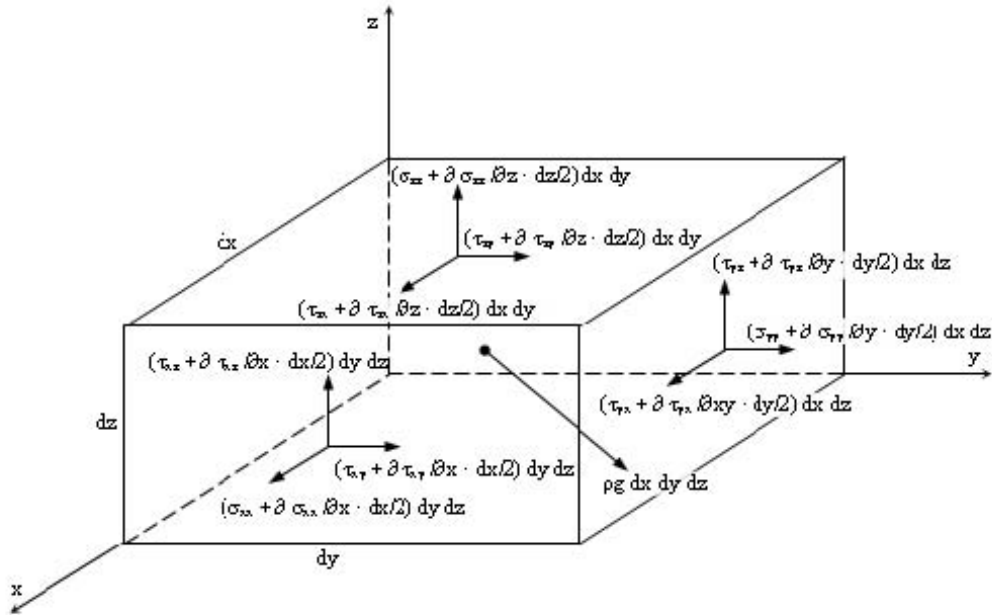


Figura 1: Componentes de tensão num volume de controle.

São desenvolvidas a partir da aplicação da conservação da quantidade de movimento e de massa a um volume de controle, como mostrado na Figura 1, as seguintes expressões para as componentes de tensões normais, equações 2.6, e tensões tangenciais dada pelas equações 2.7.

$$\sigma_{x_i} = -p - \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot u + 2\mu \frac{\delta u_i}{\delta x_i} \quad (2.6a)$$

$$\sigma_{x_j} = -p - \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot u + 2\mu \frac{\delta u_j}{\delta x_j} \quad (2.6b)$$

$$\sigma_{x_k} = -p - \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot u + 2\mu \frac{\delta u_k}{\delta x_k} \quad (2.6c)$$

$$\tau_{ij} = \tau_{ji} = \mu \left(\frac{\delta u_j}{\delta x_i} + \frac{\delta u_i}{\delta x_j} \right) \quad (2.7a)$$

$$\tau_{jk} = \tau_{kj} = \mu \left(\frac{\delta u_j}{\delta x_j} + \frac{\delta u_i}{\delta x_k} \right) \quad (2.7b)$$

$$\tau_{ki} = \tau_{ik} = \mu \left(\frac{\delta u_j}{\delta x_k} + \frac{\delta u_i}{\delta x_i} \right) \quad (2.7c)$$

2.1.1.3 Equação da Conservação de Espécies

A equação da conservação de espécies pode ser obtida aplicando a equação da conservação de massa em um volume de controle que resulta da transferência de massa e pode ser escrita como:

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j C)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[D \frac{\partial(\rho C)}{\partial x_j} \right] \quad (2.8)$$

onde C é a concentração de espécie e D difusividade de espécie no meio.

2.1.2 Camada Limite

Este item tem como objetivo apresentar de forma resumida as características de camada limite.

O conceito de camada limite foi introduzido originariamente em 1904, por Ludwig Prandtl, um alemão estudioso da aerodinâmica (FOX et al., 2004). Prandtl mostrou que muitos escoamentos viscosos podem ser analisados dividindo o escoamento em duas regiões, uma perto das fronteiras sólidas e outra cobrindo o resto do escoamento. Apenas na delgada região adjacente a uma fronteira sólida, denominada camada-limite, o efeito da viscosidade é importante. Na região fora dessa camada o efeito da viscosidade é desprezível, e o fluido pode ser tratado como não viscoso e ainda assim os resultados apresentarão um elevado grau de exatidão.

Uma melhor visualização da formação da camada limite pode ser obtida analisando-se um escoamento com velocidade uniforme sobre uma placa plana. Este fluido, na vizinhança imediata da superfície, fica sujeito à ação de forças de cisalhamento devidas

à desaceleração imposta pela placa (ver Fig. 2). Estas forças tendem a ajustar a velocidade do fluido àquela da superfície em virtude da condição de "não-deslizamento".

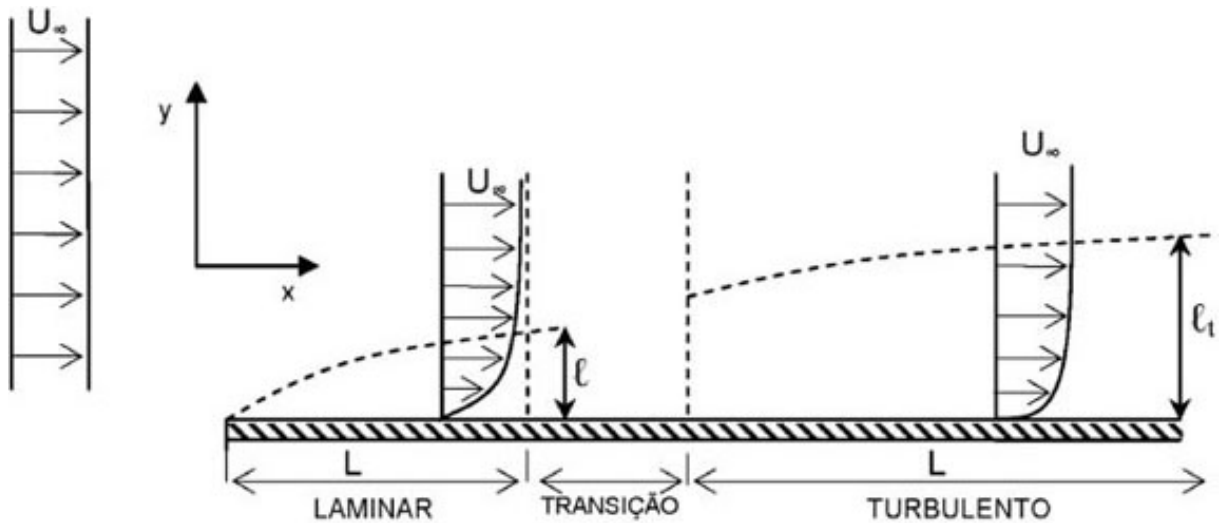


Figura 2: Camada Limite.

A seguir são apresentadas as características da camada limite:

- Em uma pequena distância (l e l_1) a partir da superfície de uma placa plana, a velocidade cresce de zero até, praticamente, a velocidade existente no escoamento teórico;
- Na camada limite, há predominância dos efeitos da viscosidade, sendo que fora dela, praticamente, essa não tem efeito sobre o escoamento;
- Quanto maior a velocidade do escoamento, menor serão o comprimento e a espessura da camada limite laminar e da sub-camada laminar;
- A pressão no interior da camada limite é determinada pelo escoamento circundante. Em uma seção da camada limite normal à superfície do corpo, a pressão pode ser considerada constante e igual a do escoamento circundante.

O escoamento na camada limite pode ser tanto laminar como turbulento. Esta camada se desenvolve inicialmente laminar e as instabilidades fazem com que ela se torne turbulenta. A Fig. 2 (lado esquerdo) mostra que uma região laminar se forma na borda esquerda da placa ("bordo de ataque"), a qual cresce em espessura, atingindo uma região de transição onde o escoamento muda de laminar para turbulento. Devido às

perturbações de velocidade na direção y , o perfil de velocidade do escoamento dentro da camada limite turbulenta é mais "achatado" que o correspondente perfil para a camada limite laminar. Na região turbulenta da camada limite a turbulência diminui em direção à parede em tal extensão que começam a predominar os efeitos laminares (viscosos). Isto sugere que mesmo na camada limite turbulenta se desenvolve uma fina subcamada laminar, onde os efeitos viscosos (moleculares) predominam sobre os efeitos de inércia, conforme mostra a Figura 3

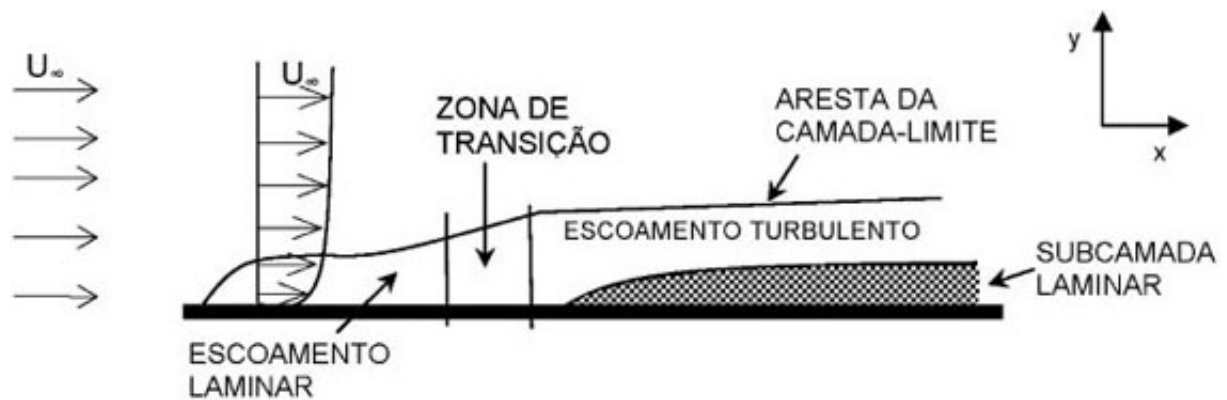


Figura 3: Subcamada viscosa da camada limite turbulenta.

Para determinar se o regime de escoamento é laminar ou turbulento devemos usar de Reynolds, que é expresso por:

$$Re = \frac{\rho U d}{\mu} \quad (2.9)$$

Onde U é a velocidade nominal do escoamento e d o diâmetro do duto.

A significância fundamental do número de Reynolds é que o mesmo permite avaliar o tipo do escoamento (a estabilidade do fluxo). O número de Reynolds característico do escoamento indica o grau de turbulência do escoamento, que afeta diretamente a taxa de cisalhamento, e conseqüentemente a transferência de massa no duto.

Laminar	$Re < 2000$
Transição	$2000 < Re < 4000$
Turbulento	$Re > 4000$

Tabela 2: Regime de escoamento de acordo com número de Reynolds

Para examinar a natureza do escoamento próximo a superfície, define-se o número de Reynolds em relação à distância da parede y como:

$$Re_y = \frac{\rho U y}{\mu} \quad (2.10)$$

Haverá, então, uma região substancial do escoamento longe da parede dominada pelas forças inerciais, uma região onde as forças inerciais e viscosas são igualmente importante e uma fina camada do qual os efeitos viscosos são importantes.

Na região próximo à superfície da tubulação, o escoamento está predisposto aos efeitos viscosos e não depende dos parâmetros de fluxo livre. A velocidade média do escoamento só dependerá da distância da parede, densidade do fluido, viscosidade dinâmica e tensão de cisalhamento na parede. Logo, de uma análise dimensional, temos:

$$u^+ = \frac{U}{u_\tau} = f\left(\frac{\rho u_\tau y}{\mu}\right) = f(y^+) \quad (2.11)$$

onde u_τ é a velocidade de cisalhamento e é expresso por:

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (2.12)$$

A Lei da Parede (Eq. 2.11) contém a definição de dois importantes números adimensionais (u^+ e y^+). A subcamada viscosa existente nos escoamentos turbulentos (Fig. 3), é na prática muito fina ($y^+ < 5$) e a relação $u^+ = y^+$ é válida. Fora da subcamada viscosa ($30 > y^+ > 5$) há uma região na qual as forças viscosas e inerciais são importantes. Nessa região a relação logarítmica válida é:

$$u^+ = \frac{1}{k} \ln(y^+) + B \quad (2.13)$$

A Equação 2.13 é chamada do inglês de camada *Log-Law* e os valores típicos para a constante de von Karman (k) e a constante B podem ser observadas na Tabela 3.

Constante	k	B
Valor	0,4	5,5

Tabela 3: Constantes da camada Log-Law

2.2 Modelos de Turbulência

Os movimentos turbulentos são caracterizados por flutuações instantâneas de velocidade, temperatura e outros escalares. Como consequência destas flutuações, o estado turbulento em um fluido contribui significativamente no transporte de quantidade de momento, de calor e de massa na maioria dos escoamentos de interesse prático e, por isso, têm uma influência determinante nas distribuições destas propriedades no campo de escoamento. Os escoamentos em rios e canais, em tubulações, na esteira de um navio ou avião, na camada limite atmosférica e a maioria das correntes oceânicas pertencem a esta categoria de movimento. Estas flutuações constituem as principais deformações do escoamento.

Devido à complexidade da natureza do escoamento, realiza-se uma decomposição das propriedades proposta por Reynolds, chamada decomposição de Reynolds, em dois termos com o objetivo de facilitar a resolução das equações de movimento do fluido. As propriedades podem ser escritas como:

$$\phi_i = \overline{\phi_i} + \phi'_i(t) \quad (2.14)$$

O escoamento turbulento pode ser então caracterizado pela superposição do valor médio de suas propriedades e de suas respectivas flutuações. É importante destacar que mesmo que o comportamento da velocidade e pressão média do fluido varie em somente uma ou duas dimensões, as flutuações sempre variam tridimensionalmente.

Utilizando da decomposição de Reynolds e substituindo na Equação 2.5, obtém-se:

$$\frac{\partial(\rho\overline{u_i})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\overline{u_i u_j})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (-p\delta_{ij} + 2\mu S_{ij} - \rho\overline{u'_i u'_j}) + \rho g_i \quad (2.15)$$

no qual δ_{ij} é o delta de Kronecker que é uma notação para matriz identidade e a taxa

de deformação, S_{ij} , pode ser definido como:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.16)$$

A Equação 2.15 possui um termo adicional em função das flutuações turbulentas que introduz novas variáveis ao problema que precisam ser determinadas para que haja um fechamento das equações. Os modelos de turbulência, então, têm a função de estimar essas novas variáveis, chamadas de tensores das tensões de Reynolds, em função de parâmetros já conhecidos.

A mais antiga proposta de modelagem da turbulência, a qual utiliza o conceito de viscosidade turbulenta, ainda constitui parte importante da maioria dos modelos de turbulência. O conceito proposto por Boussinesq em 1877 assume que o efeito da turbulência no escoamento médio pode ser estimado pela taxa média de cisalhamento. Estabeleceu uma relação entre as tensões turbulentas ($-\rho \overline{u'_i u'_j}$) e os gradientes de velocidade média do escoamento, de acordo com a equação:

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (2.17)$$

onde k é a energia cinética turbulenta definida como:

$$k = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}) \quad (2.18)$$

e μ_t é a viscosidade turbulenta definida por:

$$\mu_t = C \rho v_t l \quad (2.19)$$

sendo C uma contante adimensional, v_t [m/s] escala de velocidade turbulenta e l [m] escala de comprimento turbulenta. Conhecidos os conceitos básicos de uma escoamento turbulentos podemos então conhecer alguns modelos de turbulência, mais utilizados atualmente.

2.2.1 Modelo $k - \varepsilon$ Padrão

O modelo de turbulência $k - \varepsilon$, proposto por Launder e Spalding (LAUNDER; SPALDING, 1972), é um modelo já consolidado e largamente utilizado em aplicações industriais composto por duas equações extras de transporte para representar os efeitos de turbulência no escoamento, a equação de energia cinética turbulenta, k , e a de taxa de dissipação da energia turbulenta, ε .

As equações para k e ε estão a seguir:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \mathbf{div}(\rho k \mathbf{U}) = \mathbf{div} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_k} \mathbf{grad}(k) \right] + 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \rho \varepsilon \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \mathbf{div}(\rho \varepsilon \mathbf{U}) = \mathbf{div} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \mathbf{grad}(\varepsilon) \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.21)$$

onde $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, ρ_k e ρ_ε são constantes descritas na Tabela 4, e \mathbf{U} o vetor velocidade.

Constante	$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	C_μ	ρ_k	ρ_ε
Valor	1,44	1,94	0,09	1,0	1,3

Tabela 4: Constantes do modelo de turbulência $k - \varepsilon$

2.2.2 Modelo LRN $k - \varepsilon$

Uma das modificações do modelo $k - \varepsilon$ é o que utiliza a teoria LRN (Low Reynolds Number), ou Baixo Número de Reynolds, que resolve a subcamada viscosa existente no escoamento turbulento, região do escoamento que o modelo $k - \varepsilon$ padrão não resolve. As equações propostas pelo modelo estão a seguir:

$$\mu_t = \rho C_\mu f_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \mathbf{div}(\rho k \mathbf{U}) = \mathbf{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \mathbf{grad}(k) \right] + 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \rho \varepsilon \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \mathbf{div}(\rho\varepsilon\mathbf{U}) = \mathbf{div}\left[\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\mathbf{grad}(\varepsilon)\right] + C_{1\varepsilon}f_1\frac{\varepsilon}{k}2\mu_t S_{ij}\cdot S_{ij} - C_{2\varepsilon}f_2\rho\frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.24)$$

Neste modelo além da inclusão da viscosidade molecular as constantes C_μ , $C_{\varepsilon 1}$ e $C_{\varepsilon 2}$ estão multiplicadas por funções de amortecimento da parede f_μ , f_1 e f_2 .

2.2.3 Modelo RNG $k - \varepsilon$

O modelo $k - \varepsilon$ foi submetido a várias modificações e melhorias, dentre estas melhorias está a realizada por Yakhot e Orszag (1986) utilizando a teoria de renormalização de grupo (RNG). Neste modelo as constantes que foram derivadas empiricamente para o modelo $k - \varepsilon$ padrão são calculadas usando a teoria RNG. Esse modelo propõe para a viscosidade turbulenta a seguinte equação:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \mathbf{div}(\rho k\mathbf{U}) = \mathbf{div}\left[\alpha_k \mu_{eff} \mathbf{grad}(k)\right] + \tau_{ij}\cdot S_{ij} - \rho\varepsilon \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \mathbf{div}(\rho\varepsilon\mathbf{U}) = \mathbf{div}\left[\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \mathbf{grad}(\varepsilon)\right] + C_{1\varepsilon}^* \tau_{ij}\cdot S_{ij} - C_{2\varepsilon RNG} f_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.27)$$

com

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (2.28)$$

e

$$C_{1\varepsilon}^* = C_{1\varepsilon RNG} - \frac{\eta(1-\eta/\eta_0)}{1+\beta\eta^3} \quad \eta = \frac{k}{\varepsilon} \sqrt{2S_{ij}\cdot S_{ij}}$$

onde C_μ , $C_{1\varepsilon RNG}$, $C_{2\varepsilon RNG}$, α_k , α_ε , η_0 e β são constantes e seus valores podem ser vistos na

Tabela 5.

Constante	$C_{1\varepsilon RNG}$	$C_{2\varepsilon RNG}$	C_μ	α_k	α_ε	η_0	β
Valor	1,42	1,68	0,0845	1,39	1,39	4,677	0,012

Tabela 5: Constantes do modelo de turbulência RNG $k - \varepsilon$

2.2.4 Modelo $k - \omega$

O modelo foi proposto por Wilcox (1988), que utiliza a frequência turbulenta $\omega = \frac{\varepsilon}{k}$ como segunda variável. Também utilizando modelo de duas equações, escritas a seguir:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \mathbf{div}(\rho k \mathbf{U}) = \mathbf{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \mathbf{grad}(k) \right] + P_k - \beta^* \rho k \omega \quad (2.29)$$

onde $P_k = 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \delta_{ij}$ é a taxa de produção de energia cinética.

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \mathbf{div}(\rho \omega \mathbf{U}) = \mathbf{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \mathbf{grad}(\omega) \right] + \gamma_1 \left(2\rho S_{ij} \cdot S_{ij} - \frac{2}{3} \rho \omega \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \delta_{ij} \right) - \beta_1 \rho \omega^2 \quad (2.30)$$

A Equação 2.29 descreve a energia cinética turbulenta. As contantes correspondentes às equações 2.29 e 2.30 são apresentadas na Tabela 6.

Constante	σ_k	σ_ω	γ_1	β_1	β^*
Valor	2,0	2,0	0,553	0,075	0,09

Tabela 6: Constantes do modelo de turbulência $k - \omega$

2.2.5 Modelo SST $k - \omega$

Este modelo utiliza a mesma equação, proposta originalmente por Wilcox, para k (Eq. 2.29), porém na equação para a frequência turbulenta (ω) (Eq. 2.31) há um termo adicional se comparada à Equação 2.30, o termo de difusão transversal que surge quando se substitui $\varepsilon = k\omega$, na Equação 2.21, com o intuito de obter melhor precisão nos resultados próximos à parede.

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \mathbf{div}(\rho\omega\mathbf{U}) = \mathbf{div}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega,1}}\right)\mathbf{grad}(\omega)\right] + \gamma_2\left(2\rho S_{ij}S_{ij} - \frac{2}{3}\rho\omega\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\delta_{ij}\right) - \beta_2\rho\omega^2 + 2\frac{\rho}{\sigma_{\omega,2}}\frac{\partial k}{\partial x_k}\frac{\partial\omega}{\partial x_k} \quad (2.31)$$

Além disso as constantes foram recalculadas e são apresentadas na Tabela 7.

Constante	σ_k	$\sigma_{\omega,1}$	$\sigma_{\omega,2}$	γ_2	β_2	β^*
Valor	1,0	2,0	1,17	0,44	0,083	0,09

Tabela 7: Constantes do modelo de turbulência SST $k - \omega$

Há ainda outros modelos de turbulência, tais como: $k - \varepsilon$ não linear, LES (Large Eddy Simulation), entre outros, que possuem equações mais robustas do que os modelos aqui apresentados, porém não serão descritos devido a sua complexidade.

2.3 Equação do Transporte de Espécies Turbulento

O transporte turbulento de transferência de massa pode ser modelado similarmente usando a técnica para derivar a equação de momento:

$$\frac{\partial(\rho\bar{C})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\bar{u}_j\bar{C})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[D\frac{\partial(\rho\bar{C})}{\partial x_j} - \overline{\rho u'_j c'}\right] \quad (2.32)$$

Se pode ver que a Equação 2.32 possui concentração média de espécies (\bar{C}) e a respectiva flutuação (c'). Os termos novos obtidos correspondem fisicamente ao transporte de espécies devido à turbulência. A Equação 2.17 mostra que o transporte de momento turbulento assumido é proporcional ao gradiente médio de velocidade. Por analogia, o transporte turbulento de espécies é dado por:

$$-\overline{\rho u'_j c'} = -D_t\left[\frac{\partial(\rho C)}{\partial x_j}\right] \quad (2.33)$$

Como o transporte turbulento de momento e massa são em função dos mesmos me-

canismos, é esperado que o valor da difusividade turbulenta, D_t , seja bem próxima da viscosidade turbulenta. Essa hipótese é chamada de analogia de Reynolds. É introduzido o número de Schmidt turbulento (σ_t) que é definido como:

$$\sigma_t = \frac{\mu_t}{\rho D_t} \quad (2.34)$$

Experimentos em muitos escoamentos mostraram que a razão é normalmente próxima a unidade. Muitos códigos de CFD assumem esse ser o caso e usam valores próximos à unidade. Uma vez definido a difusividade turbulenta, temos a difusividade efetiva:

$$D_{eff} = \frac{\mu}{\rho Sc} + \frac{\mu_t}{\rho \sigma_t} \quad (2.35)$$

Combinando a Equação 2.32 e Equação 2.33, é obtida a equação de transporte de espécies turbulento:

$$\frac{\partial(\rho \bar{C})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{U}_j \bar{C})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[D_{eff} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} \right] \quad (2.36)$$

2.4 Caracterização do Problema

A proposta do presente trabalho é estimar a perda de massa em tubulações sujeitas a contrações-expansões para uma razão de aspecto (razão entre o diâmetro de entrada e de saída). Porém para validar o modelo hidrodinâmico será necessário o estudo de duas geometrias separadamente. A primeira é uma expansão abrupta com razão de aspecto 1:2. A segunda é uma contração de razão de aspecto 1,84:1 seguida por uma expansão de razão de aspecto 1:2. Essas razões de aspecto escolhidas são para facilitar a comparação com os dados experimentais existentes na literatura (LOTZ; POSTLETHWAITE, 1990).

Na solução do problema são consideradas as seguintes hipóteses simplificadoras:

1. regime permanente

2. fluido incompressível
3. simetria axial
4. condição de não deslizamento na parede
5. isotérmico
6. escoamento turbulento de perfil desenvolvido na região de entrada

Para o sistema *Hidrodinâmico* o fluido será o diesel, e para o sistema *Hidrodinâmico mais corrosão* a água.

O domínio físico para a *Hidrodinâmica* está apresentado na Figura 4 e para *Hidrodinâmica + Corrosão* na Figura 5 para uma contração-expansão abrupta.

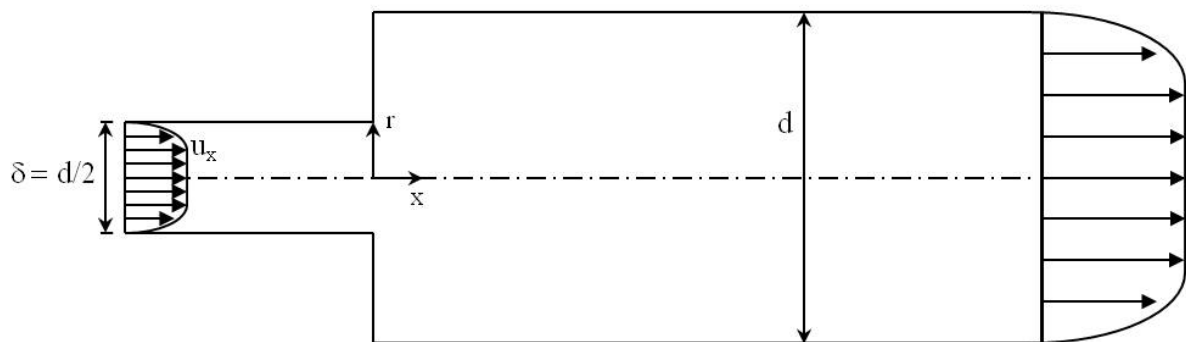


Figura 4: Domínio físico do problema para uma expansão.

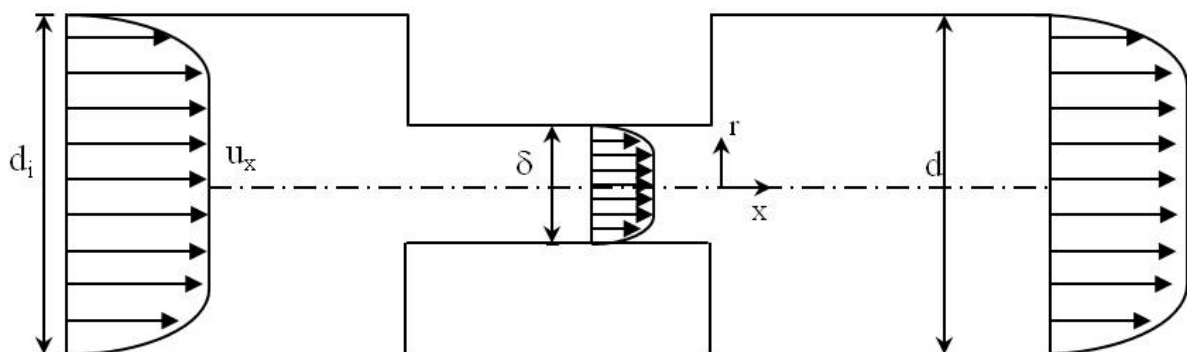


Figura 5: Domínio físico do problema para uma contração-expansão.

Para resolver o problema deve-se garantir que o *comprimento de saída*, L_d , não interfira no resultado obtido.

São resolvidas as equações de Conservação de Massa, da Conservação de Quantidade de Movimento e da Conservação de espécies.

O fluido é modelado com equações constitutivas de RNG $k - \varepsilon$ (que utiliza a teoria de renormalização de grupo) (YAKHOT; ORSZAG, 1986) e SST (Shear Stress Transport) $k - \omega$ (MENTER, 1994).

O objetivo do presente trabalho é estimar a perda de massa através das equações propostas por Keating e Nesic (2001) para uma contração-expansão e validar os resultados utilizando dados experimentais obtidos por Lotz e Postlethwaite (1990).

2.4.1 Condições de Contorno Hidrodinâmico

A escolha apropriada das condições de contorno é essencial e parte crítica para modelar o escoamento com eficácia e precisam ser especificadas. Assumiu-se que o escoamento é incompressível, isotérmico e turbulento.

2.4.1.1 Condições de Entrada

Como condição de entrada de velocidade, para obter melhores aproximações, é assumido um escoamento totalmente desenvolvido. A velocidade axial é relacionada por uma relação empírica sugerida por Prandtl para um escoamento totalmente desenvolvido em uma tubulação. Esta relação é mostrada na Equação 2.37.

$$u_x = u_p \left(1 - \frac{2r}{\delta}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.37)$$

onde δ é o diâmetro a montante da tubulação e r é a distância radial da linha de centro da tubulação. Integrando a Eq. 2.37, uma expressão que relaciona a velocidade máxima no centro da tubulação com a velocidade média pode ser adquirida e mostrada a seguir:

$$u_p = 1,224u_b \quad (2.38)$$

Além disso, velocidade radial nula foi assumida. As condições na entrada foram

especificadas para a *Sistema hidrodinâmico* e para a *Sistema Hidrodinâmico mais Corrosão* e podem ser vistas nas Tabela 8 e Tabela 9 respectivamente.

Fluido	Diesel
Velocidade Média	4,082[m/s]
Densidade	830[kgm ⁻³]
Viscosidade Dinâmica	0,0043201[kgm ⁻¹ s ⁻¹]
Diâmetro (<i>d</i>)	51[mm]
Reynolds	40x10 ³

Tabela 8: Condições de entrada para a Hidrodinâmico

Fluido	Água
Velocidade Média	4,082[m/s]
Densidade	997[kgm ⁻³]
Viscosidade Dinâmica	0,0008899[kgm ⁻¹ s ⁻¹]
Diâmetro (<i>d</i>)	42[mm]
Diâmetro entrada (<i>d_i</i>)	38,6[mm]
Comprimento região de contração	222[mm]
Coefficiente de Difusão mássica (<i>D</i>)	1,83x10 ⁻⁹ [m ² s ⁻¹]
Reynolds região de contração	242x10 ³
Reynolds região de expansão	193x10 ³

Tabela 9: Condições de entrada para a Hidrodinâmica mais corrosão

Para um escoamento totalmente desenvolvido uma variação linear da parede até a linha de centro da tubulação, onde o fluxo é livre, é assumida para a energia cinética (Eq. 2.39).

$$k = k_p + \frac{2r}{\delta} (k_{nw} - k_p) \quad (2.39)$$

onde k_p é a energia cinética máxima definida pela Equação 2.40.

$$k_p = 0,0002u_p^2 \quad (2.40)$$

e k_{nw} é o valor da energia cinética turbulenta próximo à parede e é definido como:

$$k_{nw} = \frac{u_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}} \quad (2.41)$$

A velocidade de cisalhamento na parede u_τ está definida na Seção 2.1.2 pela Eq. 2.12, onde τ_w é a tensão de cisalhamento, e uma relação entre essa tensão e a velocidade média do escoamento foi utilizada e está apresentada a seguir:

$$\tau_w = \frac{f\rho_c u_b^2}{2} \quad (2.42)$$

onde f é o fator de atrito e pode ser estimado pela equação de Blasius (WHITE, 1991) para tubulação de parede lisa.

$$f = 0,079 \left(\frac{\rho u_b d}{\mu} \right)^{-0,25} \quad (2.43)$$

A dissipação de energia turbulenta de entrada é definida como

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{\frac{3}{4}} k^{\frac{3}{2}}}{l} \quad (2.44)$$

onde l , já definida na Seção 2.1.2, é uma quantidade física relacionada com o tamanho dos grandes vórtices que contêm a energia nos escoamentos turbulentos. Em escoamentos totalmente desenvolvidos em dutos, a escala do comprimento de turbulência é restringida pelo tamanho da tubulação uma vez que os vórtices turbulentos não podem ser maiores do que a tubulação. Uma relação aproximada entre a escala de comprimento de turbulência e tamanho físico da tubulação pode ser escrita como:

$$l = 0,09\delta_h \quad (2.45)$$

O fator de 0,09 é baseado no valor máximo do comprimento de mistura num escoamento turbulento totalmente desenvolvido, e δ_h o comprimento da camada limite

hidrodinâmica.

2.4.1.2 Condições de Parede

Parede estacionária com condição de não-deslizamento foi considerada. Assim, todos os componentes de velocidade na parede são nulos.

$$\bar{u}|_w = \bar{v}|_w = \bar{w}|_w = 0 \quad (2.46)$$

Outra dificuldade que aparece em escoamentos turbulentos é a determinação da condição de contorno próxima à parede. O ANSYS CFX se utiliza de funções de parede da camada log-law, no qual essa camada foi detalhada Seção 2.1.2.

Para escoamentos com transferência de massa, que é o nosso caso, com o número de Schmidt da ordem de 500, é possível demonstrar que o comprimento da camada limite de transferência de massa (δ_{tm}) tem uma ordem de magnitude menor que a camada limite hidrodinâmica (δ_h). Isso pode ser visualizado na Equação 2.47(LEVICH, 1962). Devido à necessidade de informações sobre a camada limite e pelo fato de essa ser muito fina, necessita-se de uma boa resolução da subcamada viscosa do escoamento e, conseqüentemente, uma malha muito fina próxima à parede, da ordem de $y^+ \approx 0,1$ (POSTLETHWAITE et al., 1993).

$$\delta_{tm} = 3 \left(\frac{1}{Sc} \right)^{\frac{1}{3}} \delta_h \quad (2.47)$$

O modelo SST $k - \omega$ no ANSYS CFX oferece um modelo que muda a formulação de funções de parede para uma formulação de LRN. Essa nova formulação resolve completamente a camada limite (Seç. 2.2.2), porém aumenta significativamente o tempo de processamento. A transição do modelo de função de parede para o modelo LRN no ANSYS CFX ocorre quando se obtém um $y^+ \approx 1$.

2.4.1.3 Condições de Saída e de Simetria

O ANSYS CFX varia o campo de pressão de acordo com as condições à jusante do escoamento partindo de um valor de pressão imposto anteriormente.

Além disso restrições de saída para a equação de quantidade de movimento são dadas por condições de pressão. Em tal condição, a pressão estática é tomada para ser constante ao longo do plano de saída, originando Equação 2.48.

$$\bar{p}|_{saida} = \bar{p}|_{espec} \quad (2.48)$$

Para a condição de simetria é imposta uma restrição de fluxo espelho em ambos os lados da fronteira. Por exemplo, a velocidade perpendicular à direção do escoamento é setada como zero:

$$U_n = 0 \quad (2.49)$$

e os gradientes das variáveis escalares normal à fronteira são também setadas como zero:

$$\frac{\partial \phi}{\partial y_n} = 0 \quad (2.50)$$

na qual y_n é a direção perpendicular ao plano de simetria.

2.4.2 Condições de Contorno de Transferência de Massa

2.4.2.1 Condições de Entrada

Para a concentração de oxigênio, utilizam-se as tabelas de saturação de oxigênio na água fornecida por Lewis (2006). Essas tabelas contêm valores de concentração de oxigênio para diferentes valores de temperatura, pressão e concentração de cloreto. A configuração experimental do experimento de Lotz e Postlethwaite (LOTZ; POSTLETHWAITE, 1990) especifica que a água estava saturada com oxigênio. A uma

pressão padrão de 10kPa e a uma temperatura de 30°C, a saturação de oxigênio é dada por 7,4 mg/L. Corrigindo para uma concentração de 3% de solução salina dá uma concentração de saturação de oxigênio de 6.23 mg/L.

2.4.2.2 Condições de Saída e de Simetria

O ANSYS CFX impõe a seguinte equação para a condição de saída da concentração:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_n} = cte \quad (2.51)$$

no qual x_n é a direção perpendicular à saída e a constante geralmente é um valor diferente de zero. De maneira semelhante à modelagem hidrodinâmica, a condição de simetria é:

$$\frac{\partial \phi}{\partial y_n} = 0 \quad (2.52)$$

2.4.2.3 Condições de Parede

Na Seção 2.6 será detalhado o modelo de corrosão e nesse modelo uma das hipóteses é de que qualquer oxigênio que atingir a parede é consumido pela reação de corrosão e as partículas somente removem a camada protetora. Desta maneira, a concentração de oxigênio na parede é:

$$C_{O_2w} = 0 \quad (2.53)$$

2.5 Integração Numérica

O ANSYS CFX utiliza o método dos volumes finitos baseado em elementos, que primeiro envolve a discretização do domínio espacial, conseqüentemente a malha criada é usada para construir volumes finitos, que por sua vez são usados para conservar quantidades relevantes, tais como a massa, momento e energia (CFX - SOLVER THEORY

GUIDE, Release 13.0).

Em relação a acurácia, o ANSYS CFX usa aproximações de segunda ordem na maior parte das interações. O papel do erro é discutido em detalhe em CFX - Solver Theory Guide (Release 13.0).

Os termos de advecção são resolvidos por um esquema chamado "High Resolution", que nada mais é que um melhoramento do clássico método "Upwind Difference Scheme (UDS)".

Para todas as equações de conservação o critério de convergência adotado foi de 10^{-8} quando utilizado o modelo de turbulência SST $k - \omega$, e de 10^{-4} para o modelo de turbulência RNG $k - \varepsilon$.

2.6 Modelagem da Corrosão

Nesta seção temos o objetivo de elucidar a corrosão acelerada pelo escoamento bem como o de expor o modelo de corrosão proposto por Keating e Nesic (1999).

A corrosão acelerada pelo escoamento (FAC) é um processo pelo qual a camada de óxido protetora normalmente em aço carbono ou aço de baixa liga dissolve-se na ocorrência de um fluxo (DOOLEY; CHECAL, 2000). A camada de óxido torna-se mais fina e menos resistente à medida que a velocidade do escoamento cresce, aumentando a velocidade de remoção dessa camada de óxido, e isso eleva a taxa de corrosão no escoamento. Eventualmente, um estado de equilíbrio é atingido se as taxas de corrosão e dissolução são iguais e estáveis. Em algumas áreas, a camada de óxido pode ser tão fina que pode expor a superfície metálica causando danos à superfície de dutos.

FAC também foi definida como a corrosão resultante do efeito de turbulência devido ao escoamento de um fluido que não contém partículas sólidas em concentração suficiente e/ou tamanho para impingir sobre a superfície do metal (EFIRD, 2006). A corrosão por escoamento acelerado por partículas sólidas é denominada erosão-corrosão. A distinção é necessária por causa dos diferentes mecanismos atuando na corrosão acelerada pelo escoamento e na erosão-corrosão. O escoamento acelera a corrosão devido a magnitude da turbulência do fluido e das flutuações que ocorrem na fase líquida em contato com a superfície do metal. Estas flutuações trazem espécies corrosivas até a superfície do metal e removem os produtos de corrosão da superfície metálica. Já

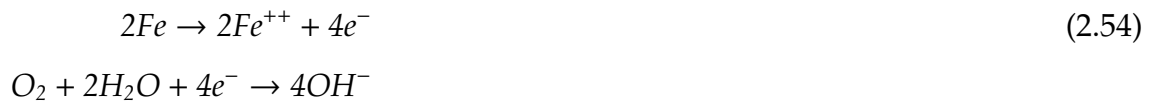
a erosão-corrosão pode ser caracterizada por descrever uma faixa de situações desde aquelas dominadas pela dissolução ou oxidação, até aquelas onde o dano mecânico ao substrato metálico predomina (POULSON, 1999).

Erosão-corrosão, também conhecida como ataque por impingimento e (sob certas circunstâncias) corrosão acelerada pelo escoamento (flow-accelerated corrosion-FAC), é definida como uma reação de corrosão acelerada pelo movimento relativo de um fluido corrosivo e a superfície do metal. É uma forma de ataque localizado que ocorre em áreas onde a intensidade da turbulência na superfície do metal é elevada o suficiente para causar a ruptura do normalmente filme superficial protetor. Como o termo erosão-corrosão sugere, a ruptura do filme pode ocorrer parcialmente por mecanismos mecânicos e parcialmente por eletroquímicos (SYRETT, 2004).

Entretanto, a erosão-corrosão pode também ocorrer apenas pela dissolução eletroquímica. Na ausência de uma contribuição mecânica para a ruptura do filme superficial protetor, a erosão-corrosão é usualmente denominada FAC. Corrosão acelerada pelo escoamento, assim como a erosão-corrosão, é definida como uma reação de corrosão acelerada pelo movimento relativo de um fluido corrosivo e a superfície do metal. Entretanto, FAC tem uma definição mais limitada que a erosão-corrosão na qual a FAC ocorreria estritamente pela dissolução eletroquímica e não envolvendo a ruptura mecânica do filme superficial (SYRETT, 2004).

Os danos causados pela FAC podem ser caracterizados como uma redução geral da espessura da parede, em vez de um ataque local. Embora FAC ocorra ao longo de uma grande área dentro de uma dada instalação, localiza-se no sentido de que frequentemente ocorre ao longo de uma área limitada de tubulação adequada devido a locais de áreas de alta turbulência.

Fatores hidrodinâmicos são muitas vezes ignorados na análise da cinética de corrosão. Por isso, um conjunto considerável de informações foi desenvolvido de modo a mostrar como a cinética ocorre e qual o caminho para calcular a perda de massa por corrosão num escoamento turbulento. Em muitos casos, a corrosão está sob controle difusional, isso implica que a taxa de corrosão pode ser determinada a partir da taxa de transferência de massa de uma espécie para o local de corrosão. Neste trabalho utilizamos do modelo de corrosão sob controle difusional do oxigênio (KEATING; NESIC, 2001). As reações podem ser escritas como:



Se o coeficiente de transferência de massa na parede é conhecido, o fluxo de espécies corrosivas pode ser determinado por:

$$J_{O_2} = k_m (C_{bO_2} - C_{wO_2}) \tag{2.55}$$

no qual k_m é o coeficiente de transferência de massa, C_{bO_2} é a concentração média de oxigênio no escoamento e C_{wO_2} é a concentração de oxigênio na parede.

No modelo de corrosão (KEATING; NESIC, 2001), assume-se que toda concentração na parede é consumida pela reação de corrosão. Desse modo o fluxo de oxigênio fica:

$$J_{O_2} = k_m C_{bO_2} \tag{2.56}$$

De acordo com a Equação 2.54 de redução do oxigênio, dois moles de ferro reagem com cada mol de oxigênio, portanto o fluxo de ferro é o dobro do fluxo de oxigênio:

$$J_{Fe} = 2k_m C_{bO_2} \tag{2.57}$$

Usando a massa molar do ferro e a sua densidade, a taxa de corrosão em $[mm/ano]$ pode ser determinada:

$$CR = \frac{2k_m C_{bO_2} M_{Fe}}{\rho_{Fe}} \times 24 \times 60 \times 365 \times 1000 \tag{2.58}$$

onde M_{Fe} é a massa molar do ferro.

Em escoamento de fluidos com geometria simples, o coeficiente de transferência de

massa pode ser calculado usando uma correlação empírica como a correlação proposta por Berger e Hau (1977) para um escoamento completamente desenvolvido. Mas para escoamentos com acidentes de linha não existem tal correlações e a única possibilidade de calcular o coeficiente de transferência de massa é através de campos de concentração já resolvidos. Se a transferência de massa entre a parede e a camada limite de transferência de massa for governada por efeitos puramente difusivos a Equação 2.54 pode ser reescrita como (DAVIS; FRAWLEY, 2009):

$$J_{O_2} = \frac{D}{\Delta y} (C_{fO_2} - C_{wO_2}) \quad (2.59)$$

onde Δy (m) é a distância do centro da primeira célula da malha até a parede, D o coeficiente de difusão mássica e C_{fO_2} a concentração de espécie no ponto. Assumindo a concentração zero na parede e combinando as Eq. 2.55 e Eq. 2.59, o coeficiente de transferência de massa (k_m) pode ser calculado via CFD e é dado por:

$$k_m = \frac{D \cdot C_{fO_2}}{\Delta y C_{bO_2}} \quad (2.60)$$

Substituindo a Equação 2.60 na Equação 2.58, temos a taxa de corrosão em função de parâmetros hidrodinâmicos, em mm/ano, exibida abaixo:

$$CR = \frac{2D \cdot C_{fO_2} \cdot M_{Fe}}{\rho_{Fe} \Delta y} \times 24 \times 60 \times 365 \times 10^3 \quad (2.61)$$

2.7 Estudo de Convergência da Malha

Para a confecção da malha, utilizou-se o software ANSYS ICEM CFD, no qual sua licença está incluída junto com o Pacote ANSYS. Por questões computacionais, a malha foi confeccionada em pseudo-2D (indica a existência de um elemento de volume na direção perpendicular ao escoamento e garantindo na simulação velocidade nula nesta direção) e reduzida em seu eixo de simetria a 1/2 tubulação, diminuindo, assim, o tamanho da malha e o tempo de processamento do programa.

2.7.1 Hidrodinâmica

A Figura 6 mostra de forma ampliada a região de expansão da *Hidrodinâmica* e podemos ver que a malha é estruturada e seu direcionamento foi feito de tal forma que possa acompanhar o escoamento do fluido para que assim as interpolações possam oferecer melhores resultados.

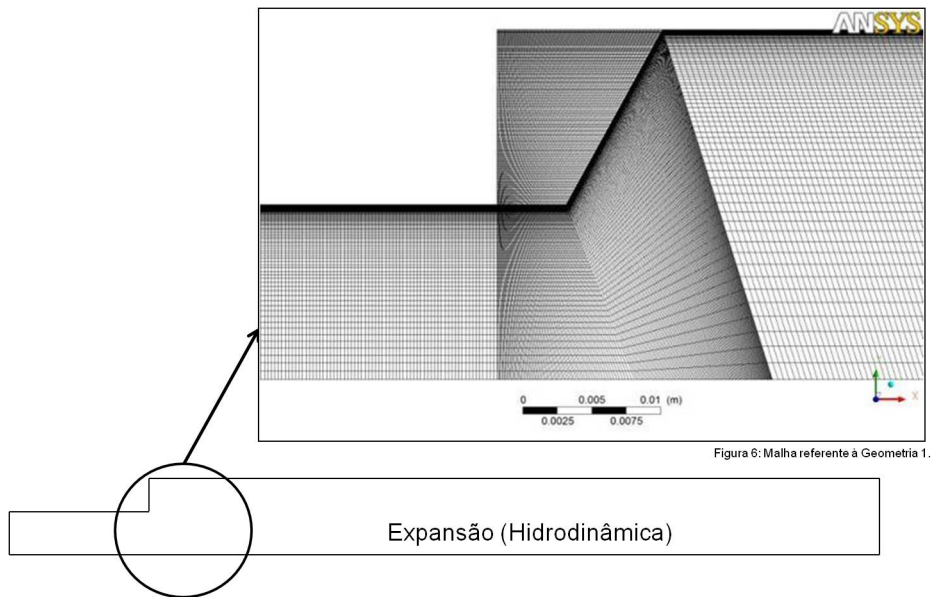


Figura 6: Malha referente à Hidrodinâmica.

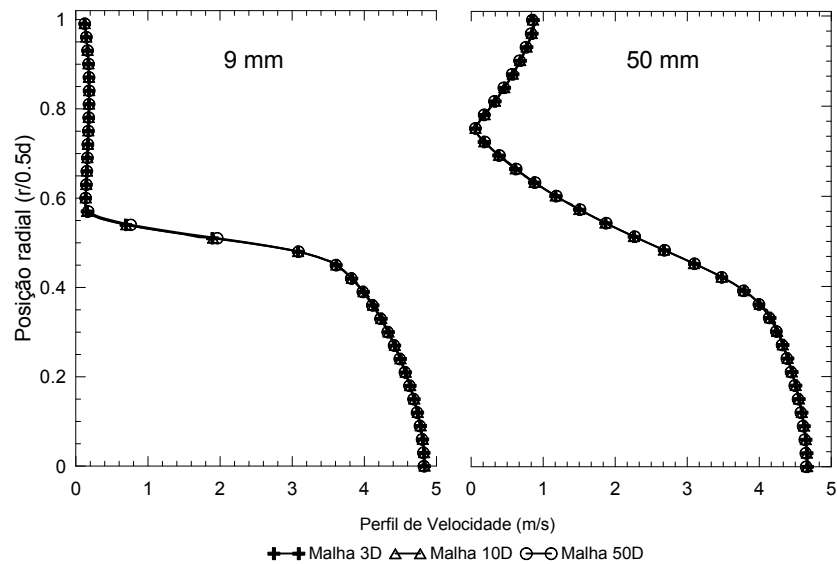


Figura 7: Teste de *comprimento de saída* (L_d) para a Hidrodinâmica.

Antes dos testes de refinamento de malha se fez necessário um teste de *comprimento de saída* da tubulação após a expansão, (L_d), para ver se há alguma interferência nos

resultados. Como podemos ver na Figura 7 os efeitos deste *comprimento de saída* são imperceptíveis para três comprimentos em duas seções dentro da região de recirculação do escoamento e por este motivo a geometria escolhida para validar o modelo computacional tem $10D$ de *comprimento de saída*.

Para se indagar os efeitos de refinamento da malha nos resultados, um estudo da convergência de malha foi realizado para certificar de que esta não influenciou nos resultados obtidos. O teste realizado, investigou malhas com quatro qualidades de refinamento de malhas diferentes. Os dados referentes a estas malhas podem ser observados na Tabela 10. Os efeitos de refinamento de malha para a velocidade axial foram desprezíveis, como mostra a Figura 8, devido ao principal fato da malha ser 2D e não necessitar de grandes quantidades de nós, fato que não pode ser observado em malhas 3D.

Malha	Número de Nós	Números de Elementos
1	475.956	393.125
2	700.711	630.000
3	879.351	792.000

Tabela 10: Malhas utilizadas para Hidrodinâmica

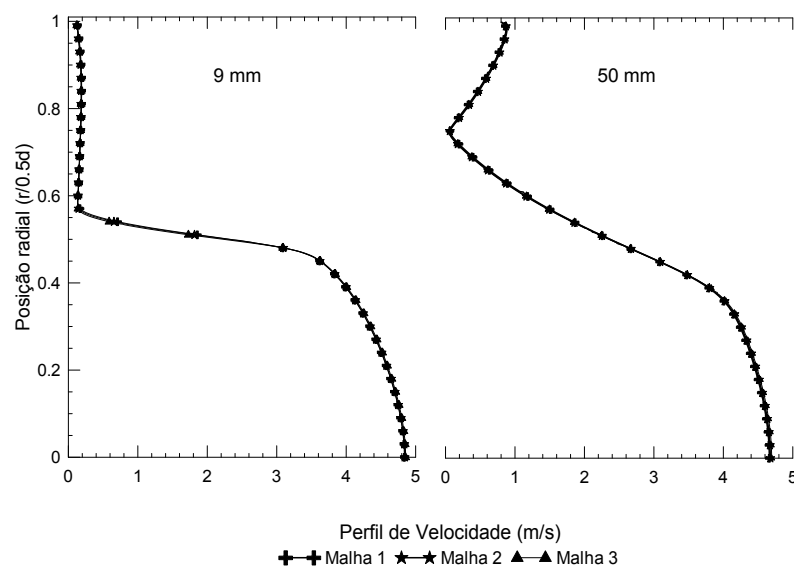


Figura 8: Teste de malha para a Hidrodinâmica.

2.7.2 Hidrodinâmica mais corrosão

O mesmo procedimento realizado com a malha referente ao sistema *Hidrodinâmico* para o estudo de convergência e influência nos resultados, também foi realizado para a malha referente ao sistema *Hidrodinâmico mais corrosão* (Fig. 9). A Fig. 9 mostra o detalhe da região de expansão na geometria composta por uma contração-expansão. A apresentação da malha foi realizada desta forma devido ao fato de não ser possível a visualização em detalhes numa figura contendo toda a geometria.

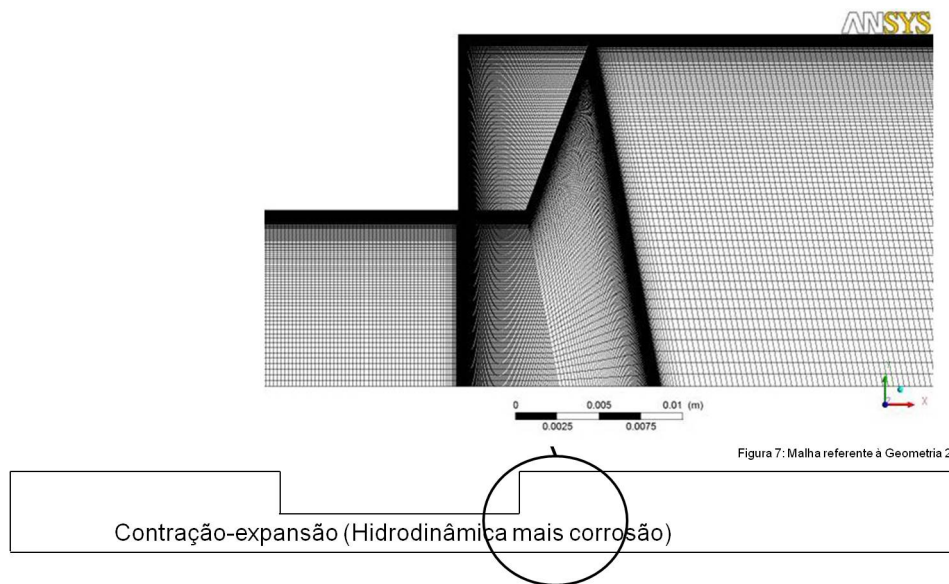


Figura 9: Malha referente à Hidrodinâmica mais corrosão.

Para a escolha do *comprimento de saída* verificou-se o comprimento de desenvolvimento do escoamento.

Duas maneiras de verificar este desenvolvimento são: pela estabilização do gradiente de velocidade na direção do escoamento (Fig. 11) e pela relação u^+ e y^+ que deve coincidir linearmente com a equação padrão da camada Log-Law (Eq. 2.13) como mostra a Figura 12.

Como pode ser visto na Figura 11 à partir do *comprimento de saída* 20D o gradiente de velocidade na direção do escoamento não sofre mais variação e também pode ser observado na Figura 12 que para este mesmo *comprimento de saída* não há divergência dos valores obtidos comparados aos valores teóricos da camada Log-Law.

Escolhido o *comprimento de saída* (20D) de modo a garantir que o escoamento esteja desenvolvido e que não mais influenciará nos resultados, investigou-se os efeitos de

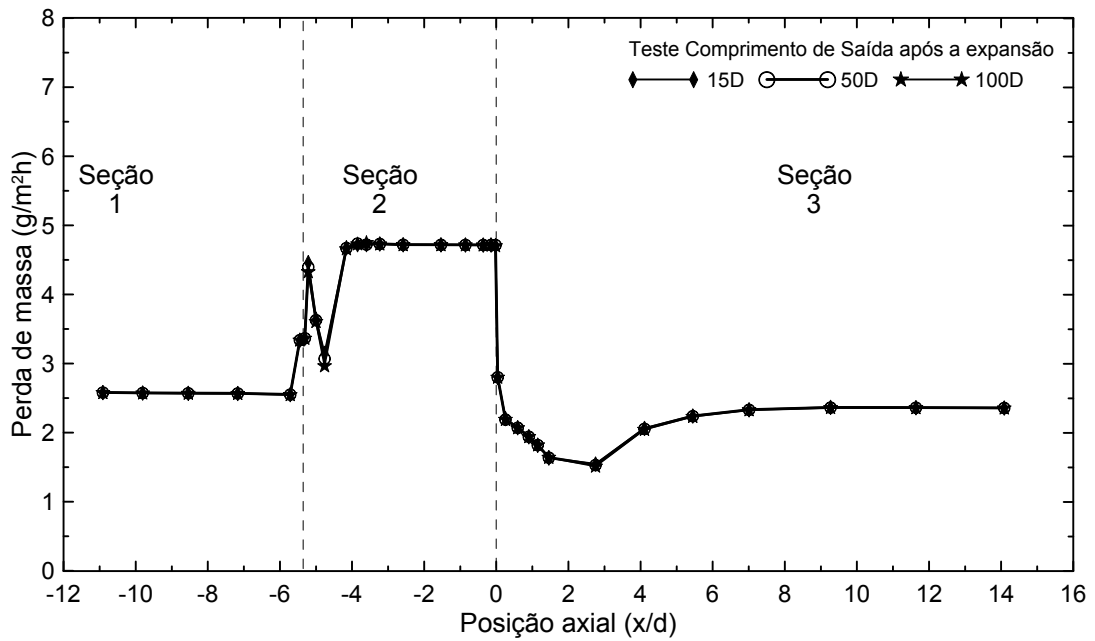


Figura 10: Teste do comprimento de saída (L_d) para a perda de massa referente à Hidrodinâmica mais corrosão.

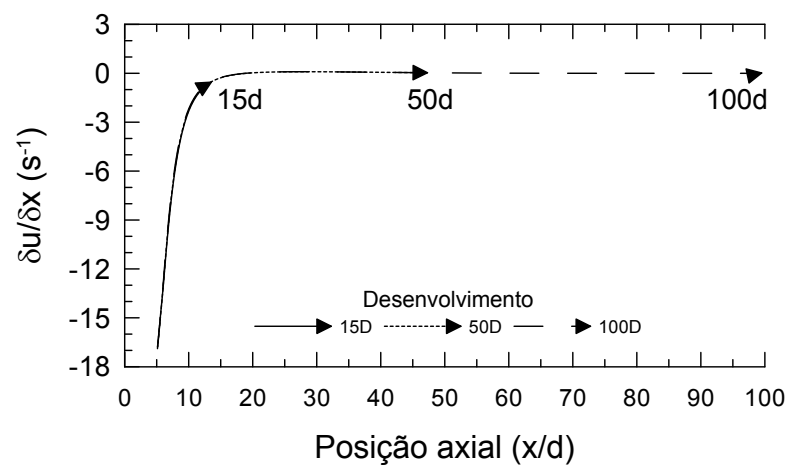


Figura 11: Comprimento de desenvolvimento.

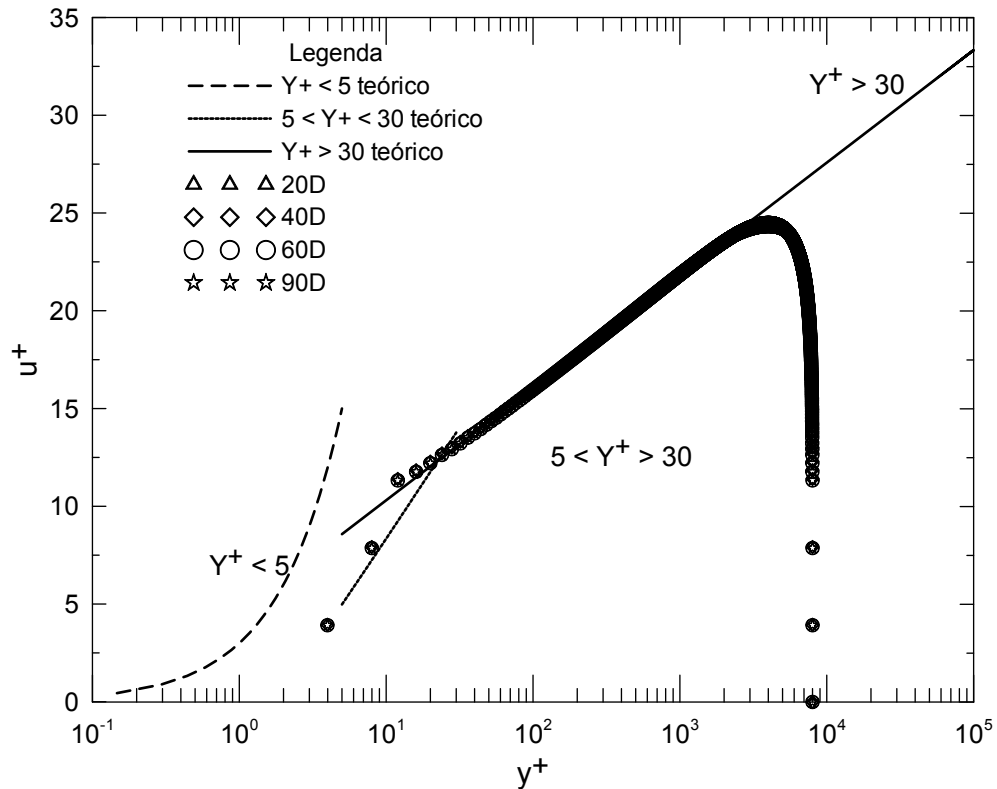


Figura 12: Gráfico $u^+ \times y^+$.

refinamento de malha.

Os testes foram feitos para 4 refinamentos de malhas e os dados referentes a estas malhas podem ser observadas na Tabela 11. Os refinamentos feitos partiram de números de nós maiores que os utilizados por Davis e Frawley (2009) em seus estudos, já que seus resultados não foram satisfatórios. Da *Malha 1* para a *Malha 2* dobrou-se o número de nós. Da *Malha 2* para a *Malha 3* elevou-se significativamente o número de nós e a razão de refinamento próximo à parede foi melhorada. Da *Malha 3* para a *Malha 4* a quantidade de nós não teve grande mudança porém a razão de refinamento próximo à parede foi indubitavelmente melhorada.

Malha	Número de Nós	Números de Elementos
1	433.524	213.679
2	882.244	437.199
3	1.450364	720.419
4	1.815.044	901.599

Tabela 11: Malhas utilizadas para Hidrodinâmica mais corrosão

Os efeitos de refinamento de malha foram verificados, tanto para os perfis de velo-

idades em várias seções da tubulação como para a perda de massa localizada na contração-expansão.

Ao se observar os perfis de velocidade à jusante da expansão na Figura 13 para três diferentes seções transversais da tubulação, não percebe-se nenhuma mudança nos perfis de velocidade a 8D, 12D, e 17D. Isto se deve ao fato de as malhas estarem em pseudo-2D, requerendo um refinamento de malha menor para que a hidrodinâmica seja resolvida completamente, o que não pode ser observado na Figura 14 que mostra a variação da perda de massa na região de contração-expansão. Da *Malha 1* para a *Malha 2*, e sequencialmente para a *Malha 3* houve significativo aumento nos valores da taxa de corrosão. Este aumento não mais pode ser visto ao se gerar os resultados para a *Malha 4*, o que nos garante que o refinamento a ser usado, de modo a garantir que a difusão de oxigênio ocorra sem interferências significativas da resolução de malha e que seja resolvido com menor tempo de simulação computacional, é o da *Malha 3*.

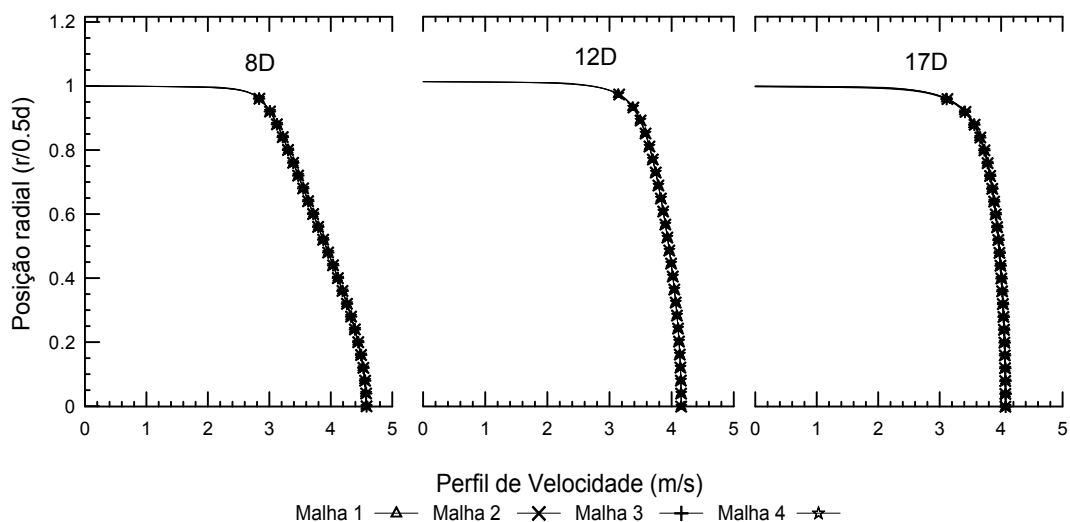


Figura 13: Teste de malha para a hidrodinâmica nas regiões a 8D, 12D e 17D à jusante da expansão.

Ao verificar a qualidade da malha próximo à parede, uma análise do parâmetro adimensional y^+ foi feita para se certificar de que esse parâmetro estivesse dentro do esperado como comentado na Seção 2.4.1.2. Na Figura 15 pode ser visto a distribuição do parâmetro adimensional y^+ obtido para essa malha e percebe-se que todos os pontos das malhas ficaram com valores abaixo do esperado ($y^+ = 0, 1$).

Assim as malhas utilizadas para as simulações das geometrias referentes à *Hidrodinâmica* e à *Hidrodinâmica mais corrosão* são apresentadas na Tabela 12, e foram escolhi-

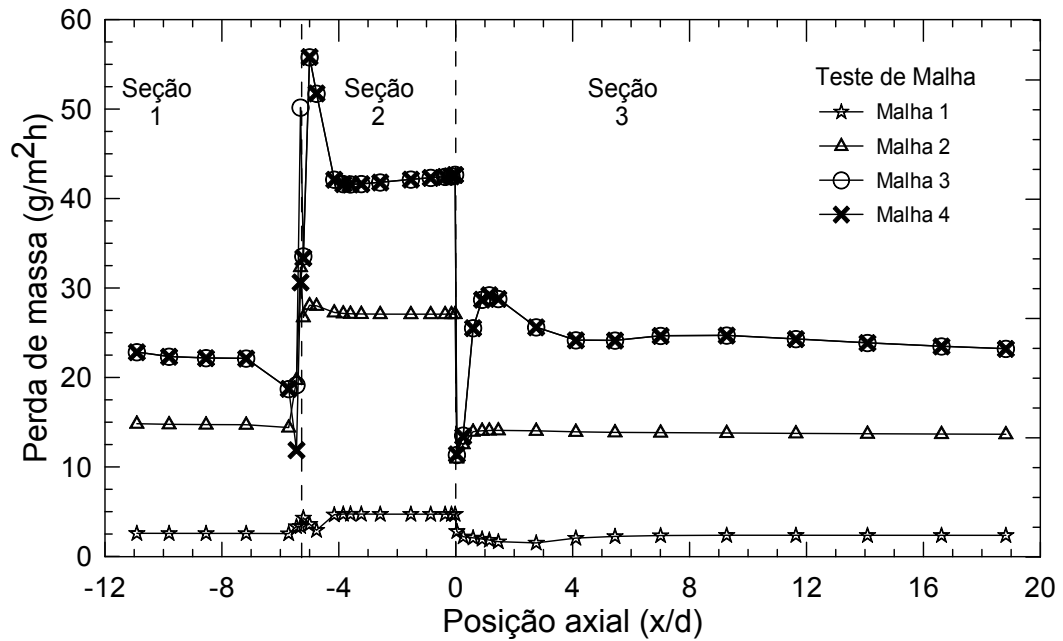


Figura 14: Teste de Malha para a Perda de Massa (Seção 1-região à montante da contração; Seção 2-região da contração; Seção 3-região à jusante da expansão).

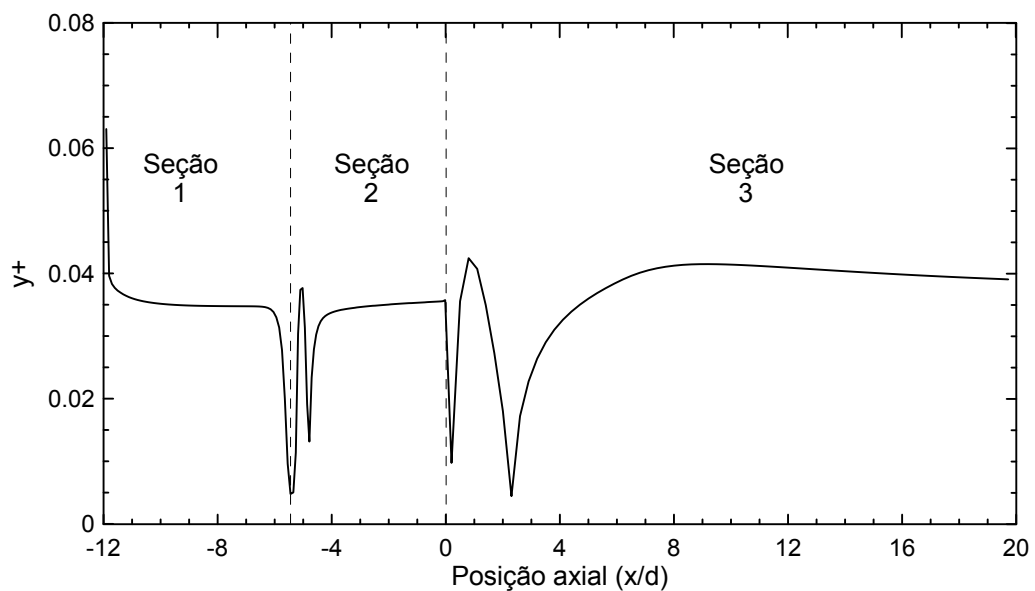


Figura 15: Gráfico y^+ para a Malha 3 utilizada para simular o transporte de espécies.

das de modo a não interferirem nos resultados, e possuírem tempos de processamentos relativamente baixos.

	Hidrodinâmica	Hidrodinâmica mais corrosão
L_d	10D	20D
Malha	2	3
Tempo processamento RNGk - ε	2min 1seg	35min
Tempo de processamento SSTk - ω	57min 13seg	2h 58min 47seg

Tabela 12: Dados referentes às malhas

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

3.1 Resultados referentes à Hidrodinâmica

A geometria do tubo com expansão súbita tem sido utilizada com frequência por vários autores para testar e avaliar modelos de turbulência. A razão para isto é que ele combina de uma região de forte de não-equilíbrio, a zona de recirculação, seguido de uma região onde o fluxo retorna ao equilíbrio. A geometria com súbita expansão também tem sido objeto de muito estudo experimental, porque pode oferecer uma visão útil e melhorar a nossa compreensão de turbulência e também devido à sua aplicação nos fluxos de interesse industrial que estão relacionados com o fenômeno da turbulência, tais como corrosão (SEDAHMED et al., 1999).

O objetivo desta seção é validar o modelo computacional numa geometria sujeita a uma expansão (*Hidrodinâmica*) através de simulações numéricas, comparando seu resultado com dados experimentais obtidos por Founti e Klipfel (1998) em seu estudo, .

Utilizando os parâmetros experimentais dados na Tabela 8 e as Equações (2.37), (2.39) e (2.44), os perfis de entrada para a velocidade, para a energia cinética turbulenta e para a dissipação de energia turbulenta são gerados e estão apresentados na Figura 16.

As Figuras 17 e 18 mostram os resultados da formulação computacional para os perfis de velocidade axial à jusante da expansão e um dos aspectos evidente nos resultados é uma pequena diferença entre os modelos RNG $k - \varepsilon$ e SST $k - \omega$ no fluxo livre, região do escoamento onde não há influência da tensão de cisalhamento. Para o perfil de velocidade axial de 9 mm e 50 mm, à jusante da expansão, os resultados foram satisfatórios em comparação com os dados experimentais e oferecem boa precisão.

Já para os perfis na posição de 75 mm, 100 mm, 150 mm e 200 mm à jusante da expansão, os valores encontrados destoaram em algumas posições radiais, porém esta variação

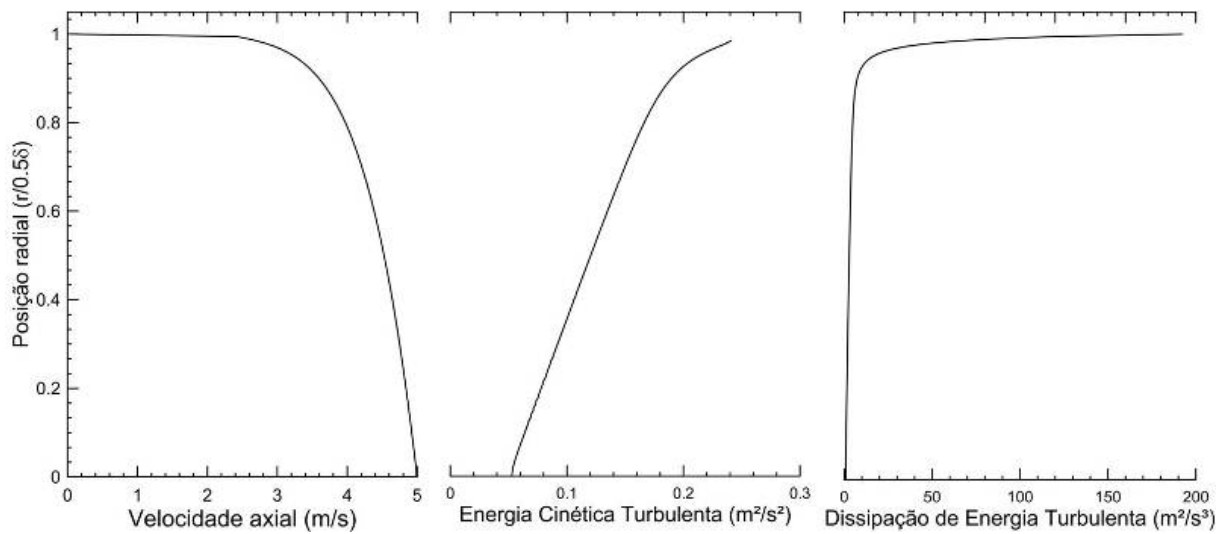


Figura 16: Perfis de entrada do escoamento.

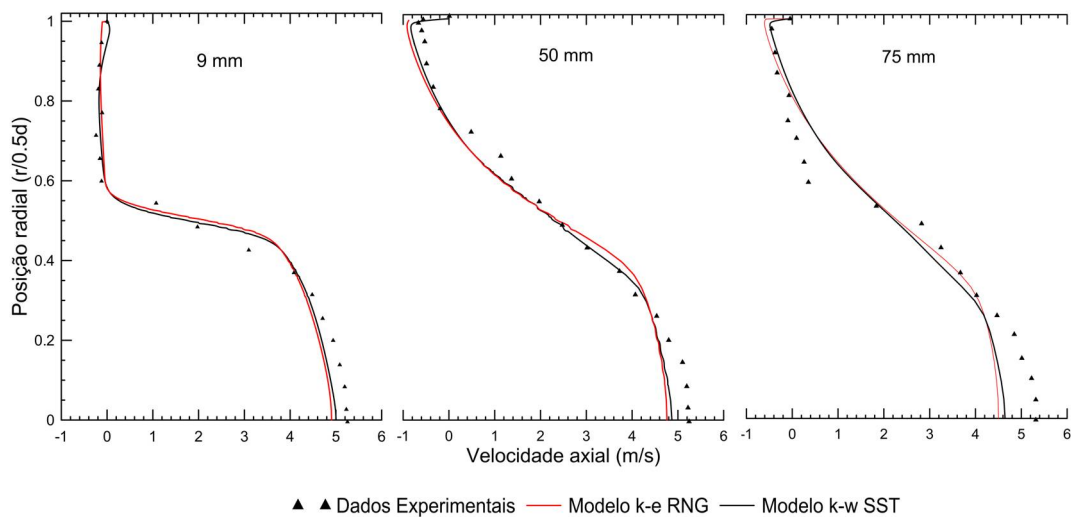


Figura 17: Comparação dos resultados com os dados experimentais (FOUNTI; KLIPFEL, 1998) para a velocidade axial à jusante da expansão (regiões à 9 mm, 50 mm e 75 mm).

foi pequena. Observou-se que este resultado encontra-se superestimado quando comparado aos experimentais. Entretanto, é perceptível que o modelo SST $k - \omega$ estimou melhor o resultado da velocidade na região próximo a parede, que é a região onde o modelo oferece melhor modelagem, e de particular interesse no presente trabalho.

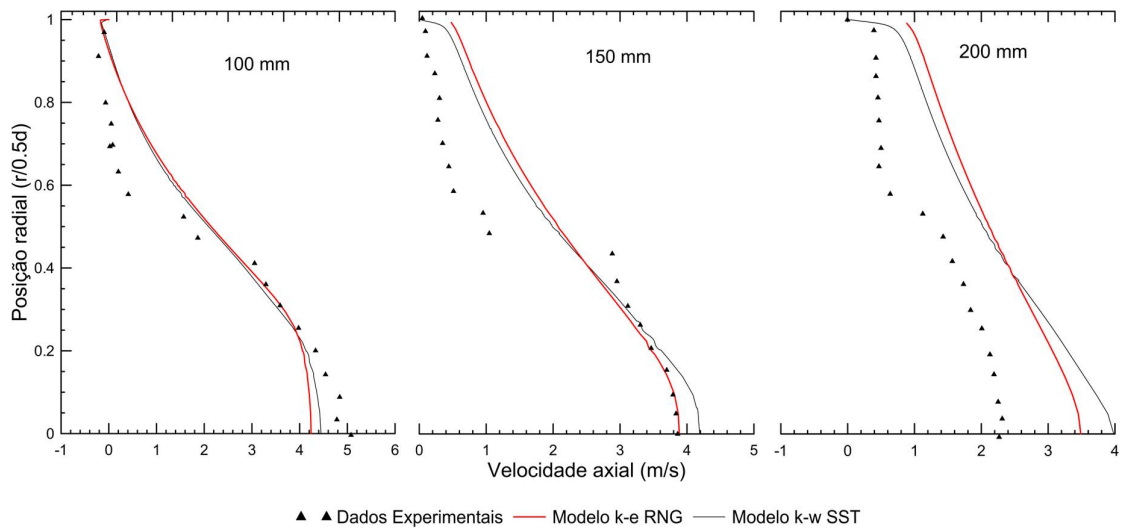


Figura 18: Comparação dos resultados com os dados experimentais (FOUNTI; KLIPFEL, 1998) para a velocidade axial à jusante da expansão (regiões à 100 mm, 150 mm e 200 mm).

As Figuras 19 e 20 mostram os perfis de energia cinética turbulenta para os modelos de turbulência utilizados nas simulações em algumas seções da tubulação, e pode-se ver que para ambos os modelos as curvas de energia cinética turbulenta são semelhantes. Porém ao se observar os dados experimentais, vê-se que há grande desvio dos resultados da simulação com tendência parecida. Um resultado não condizente era esperado devido ao fato de ambos os modelos utilizarem somente duas equações para modelar o fenômeno da turbulência, que é bem mais complexo. Porém no geral, os resultados foram satisfatórios.

3.1.1 Comprimento de Recirculação

Como o escoamento foi modelado com $L_d = 10D$, é garantido que a saída do escoamento foi modelada longe da região de recirculação. Na Figura 21 é notado que a região de recirculação tem um maior comprimento no modelo SST $k - \omega$ que também encontrou uma pequena recirculação que o modelo calculou, o que não é notado no modelo RNG $k - \epsilon$. Isso se deve pela alta capacidade do modelo SST $k - \omega$ de obter resultados

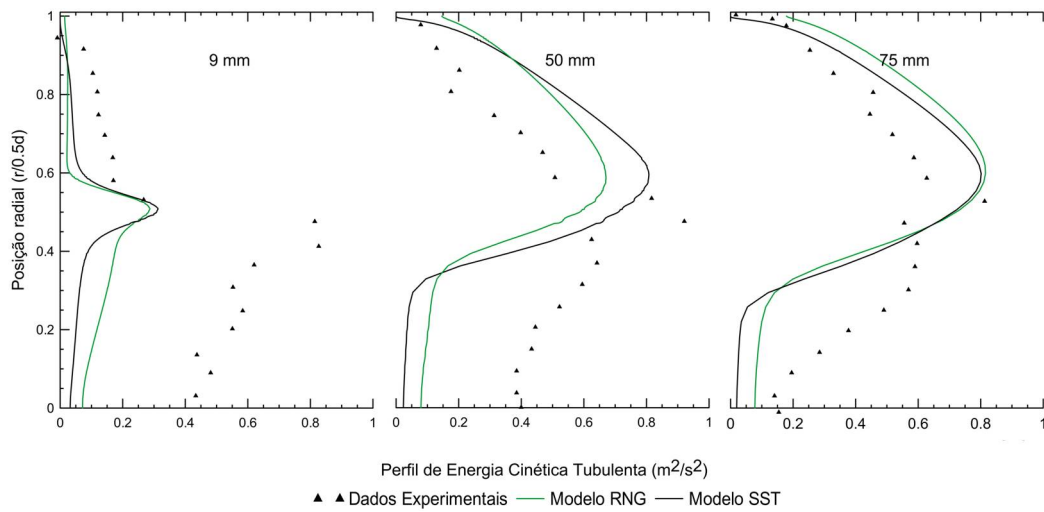


Figura 19: Comparação dos resultados com os dados experimentais (FOUNTI; KLIPFEL, 1998) para a energia cinética turbulenta à jusante da expansão (regiões à 9 mm, 50 mm e 75 mm).

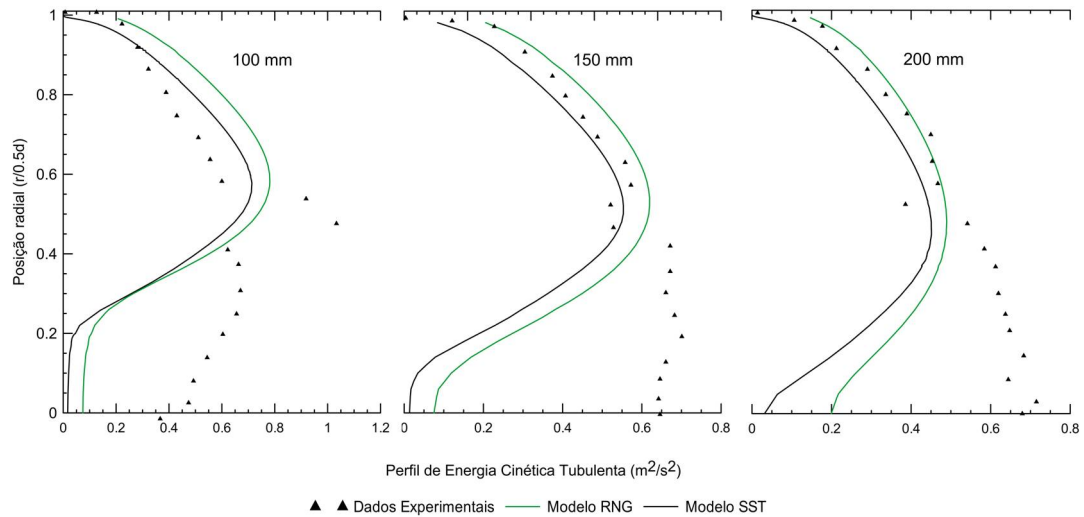


Figura 20: Comparação dos resultados com os dados experimentais (FOUNTI; KLIPFEL, 1998) para a Energia Cinética Turbulenta à jusante da expansão (regiões à 100 mm, 150 mm e 200 mm).

precisos da separação do escoamento sob gradientes de pressão adversos. A região de recirculação à jusante da expansão é mostrada em linhas de correntes na Figura 22 para ambos os modelos utilizados.

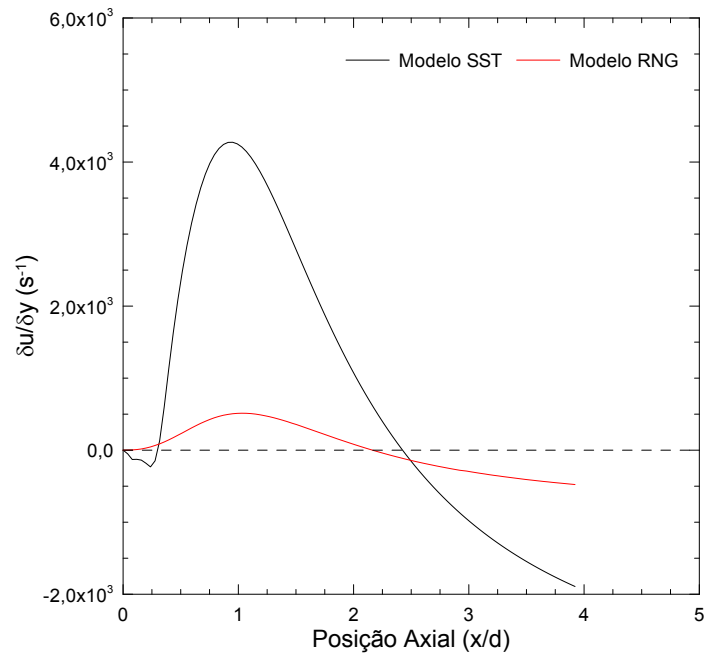


Figura 21: Comprimento de recirculação para os Modelos RNG $k - \varepsilon$ e SST $k - \omega$.

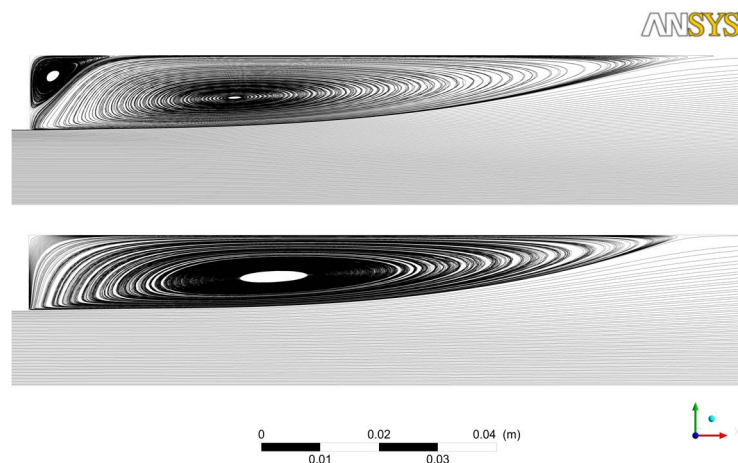


Figura 22: Linhas de correntes de velocidade geradas à jusante da expansão referentes aos modelos RNG $k - \varepsilon$ (abaixo) e SST $k - \omega$ (acima).

3.2 Resultados referentes à Hidrodinâmica mais corrosão

Nesta seção valida-se o modelo de corrosão proposta por Davis e Frawley (2009) numa geometria, composta por uma região sujeita a contração-expansão, através das

simulações hidrodinâmicas e de transporte de espécies para os modelos RNG $k - \varepsilon$ e SST $k - \omega$, comparando seus resultados com dados experimentais obtidos por Lotz e Postlethwaite (1990) em seu estudo, para um tempo de exposição de 48h.

A Equação 2.61 foi utilizada para calcular a perda de massa por corrosão em cada seção da tubulação, e esses valores estão apresentados na Figura 23. Podemos ver nesta figura que os valores para o modelo RNG $k - \varepsilon$ subestima os resultados para a perda de massa por corrosão. Fica visível que a formulação de funções de parede não estima com precisão a perda de massa por corrosão, já que na região da subcamada viscosa o transporte de espécie é totalmente difusivo pelo fato de a velocidade do fluido ser bem próxima de zero. Isto torna imprescindível que a camada limite hidrodinâmica e de concentração sejam completamente resolvidas para que os resultados sejam satisfatórios.

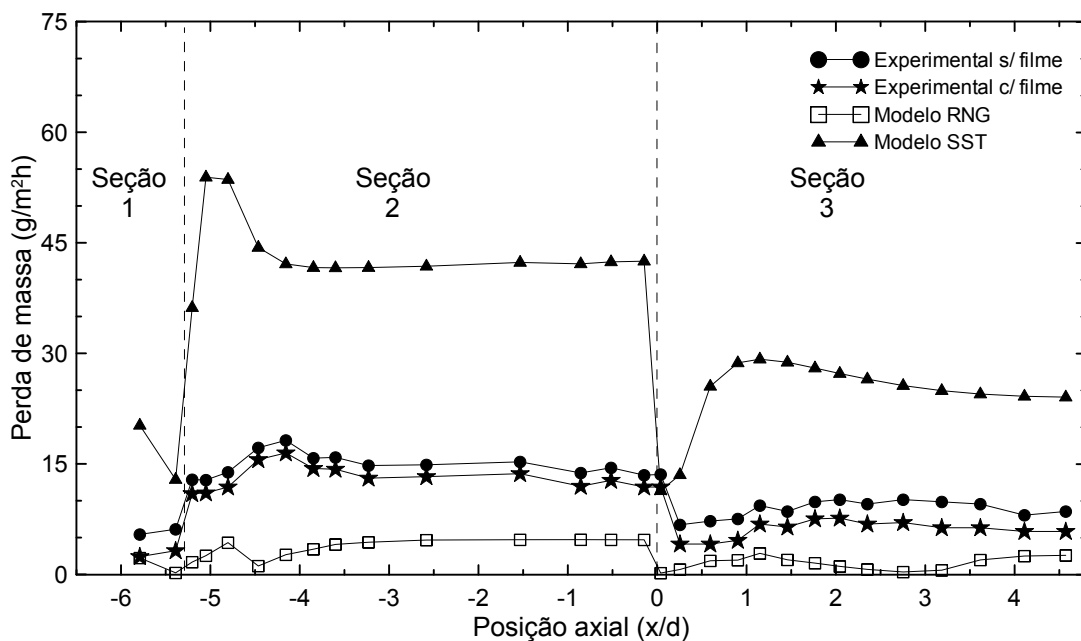


Figura 23: Comparação dos resultados de simulação com os dados experimentais de Lotz e Postlethwaite (1990) para a corrosão com concentração nula de partículas e, com e sem a presença de filme protetor.

Na Figura 23 os dados de perda de massa, quando o filme protetor ainda está presente, é um pouco menor, e mostra que com a presença de filme protetor a corrosão diminui. À medida que é removido o filme de óxido a corrosão aumenta, devido ao fato de o metal ser novamente exposto ao ataque por oxigênio, reiniciando assim a corrosão.

A presença de filme de óxido faz com que a cinética da corrosão se torne muito mais lenta do que se não tivesse o óxido, aumentando assim a taxa de corrosão aparente na tubulação, o que pode ser observado nos resultados do modelo SST $k - \omega$. Este modelo

de corrosão superestima os resultados por não estabelecer a formação deste filme de óxido, o que seria possível para simulações transientes, já que este filme varia à medida que o escoamento ocorre. Isto é verdade, porém em alguns casos o filme pode atingir uma espessura de equilíbrio, não variando à medida que o escoamento está ocorrendo. No entanto, os resultados experimentais do Lotz e Postlethwaite (1990) mostram que a espessura do filme variou (10 % e 34% de retenção em 48 horas contra 30 e 70% em 25 horas), ou seja, mesmo num escoamento sem partícula ocorre uma dissolução do filme, pois com o passar do tempo a retenção do filme diminui.

Na Figura 23 também podemos observar os dados de perda de massa, para a situação em que o filme protetor não foi removido, que mostra que com a presença de filme, a corrosão é menor (a retenção de filme é de 10 % na região de contração e de 34% à jusante da expansão). De modo que se o filme for removido a corrosão aumenta, devido ao fato de o metal ser novamente exposto ao ataque por oxigênio, reiniciando assim a corrosão.

Por causa disto, os resultados do modelo SST $k - \omega$ foram comparados aos resultados experimentais de erosão-corrosão (LOTZ; POSTLETHWAITE, 1990), num escoamento com presença de partículas no fluido, para uma exposição de 48h. Como pode ser visto na Figura 24, a taxa de corrosão estimada, em algumas posições, é comparável aos resultados experimentais obtidos num escoamento que contém partículas sólidas, o que sugere que em tais posições as partículas sólidas somente previnem a formação do filme de óxido e a taxa de perda de massa seria controlada pela dissolução do material. Outro resultado experimental que confirma isto é que nestas posições o resultado experimental antes de remover o filme é praticamente o mesmo (a retenção do filme é de 5% na região da contração e 2% à jusante da expansão).

Era esperado que a região à montante da contração (Seção 1) da tubulação fosse o ponto de máxima perda de massa pelo fato de ser o ponto com maior coeficiente de transferência de massa e também por ser a área com maior ângulo de impacto das partículas e do fluido. Nessa região o modelo não retrata este fenômeno subestimando a perda de massa num ponto, devido ao fato do modelo não considerar a erosão no cálculo da perda de massa, principalmente na superfície projetada onde a erosão é mais significativa, sendo assim a perda de massa é considerável. O fato de não haver partículas no escoamento faz com que o filme protetor, formado nas paredes da tubulação, não seja removido com eficiência, mostrando que a suposição de que

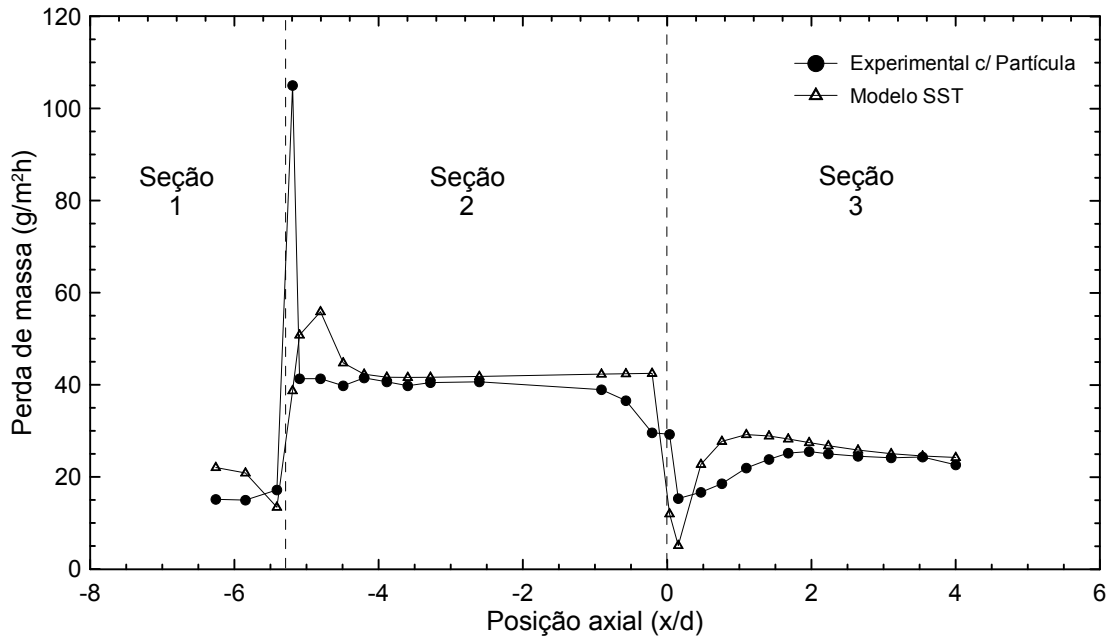


Figura 24: Comparação do resultado do modelo de CFD com dados experimentais de erosão-corrosão com concentração de partículas em 2% por volume de areia no escoamento de Lotz e Postlethwaite (1990) com filme protetor removido

as partículas presentes no fluido seriam responsáveis pela total remoção do filme de óxidos formado pelos produtos de corrosão não é válida.

Já região de contração (Seção 2) o modelo previu com eficiência a perda de massa, e na região à jusante da expansão (Seção 3), zona de grande recirculação do fluido, o modelo também estimou razoavelmente bem a taxa de corrosão, ficando na mesma ordem de grandeza e se tornando constante após a zona de recirculação do fluido, como previsto (POULSON, 1999).

Testes incluindo rugosidade na parede da tubulação com mesmas condições iniciais e de contorno também foram feitos e estão apresentados na Figura 25. Com o aumento da rugosidade na parede para 10mc, a taxa de corrosão diminuiu, o que era esperado, já que com esta rugosidade o refinamento da malha não é suficiente para resolver a camada limite de concentração, porém com rugosidades muito pequenas (1mc e 5mc) houve um pequeno incremento nesta taxa pois a turbulência nesta região é aumentada pela rugosidade da parede o que aumentaria a transferência de massa, porém a função do coeficiente de atrito não mais seria válida já que esta é aplicada a parede lisa na tubulação. Infelizmente este teste não foi de grande valia, pois haveria necessidade de mudar equações de condições de entrada e melhorar o refinamento da malha, necessitando de novos estudos de convergência de malha e novas simulações tanto

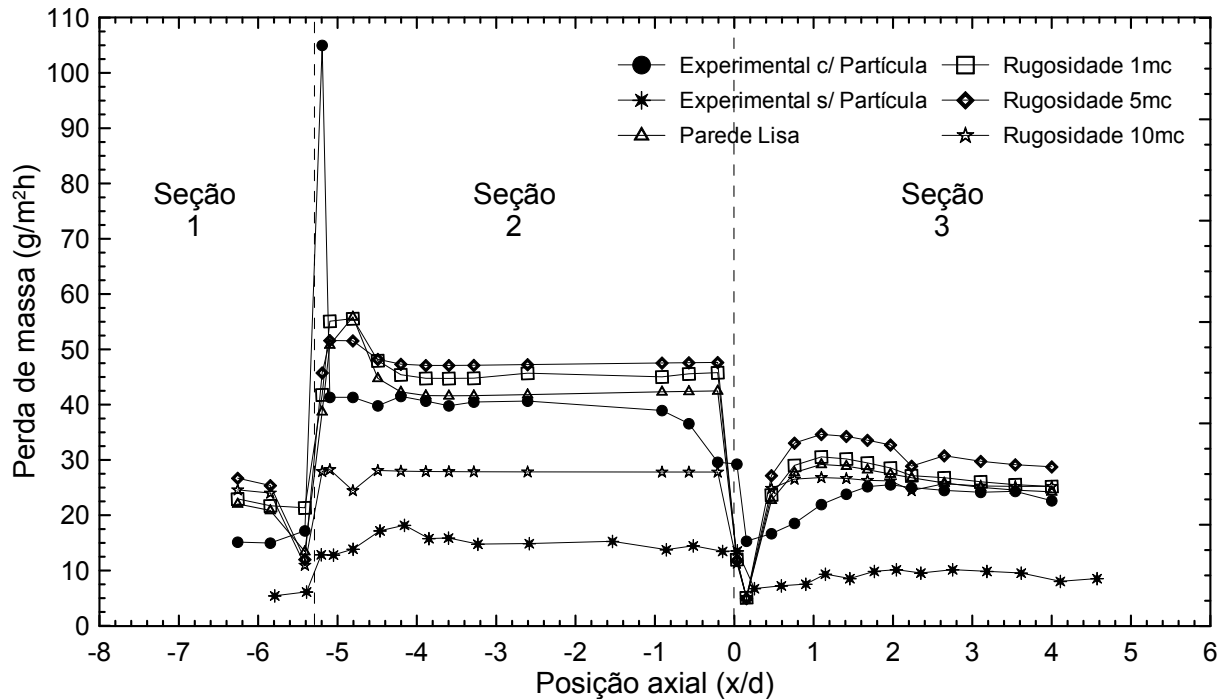


Figura 25: Perda de massa para tubulação de parede lisa e com rugosidade de 1mc, 5mc e 10mc.

para a *Hidrodinâmica mais corrosão* como para a *Hidrodinâmica* também.

3.2.1 Influência dos Parâmetros Hidrodinâmicos na Perda de Massa

Há muito tempo alegaram-se que a tensão de cisalhamento seria um parâmetro difícil de se medir localmente e que haveria pouca evidência de que ele realmente removesse fisicamente os produtos de corrosão. No entanto, existe uma objeção fundamental para a utilização da tensão de cisalhamento em prever a corrosão acelerada pelo escoamento, esta objeção foi relatada por Poulson (1999). A tensão de cisalhamento, a transferência de massa, perfil típico de perda de massa e o nível de turbulência do escoamento são mostrados esquematicamente nas Figuras 26 e 27, à montante da contração e à jusante da expansão respectivamente.

A Figura 26 mostra que a tensão de cisalhamento está relacionada com a perda de massa, com a transferência de massa e com nível de turbulência para escoamento sem acidentes de linha à montante da contração.(POULSON, 1999).

A Figura 27 mostra a comparação dos parâmetros do escoamento com a perda de massa à jusante da expansão, e pode-se perceber que a taxa de corrosão é controlada

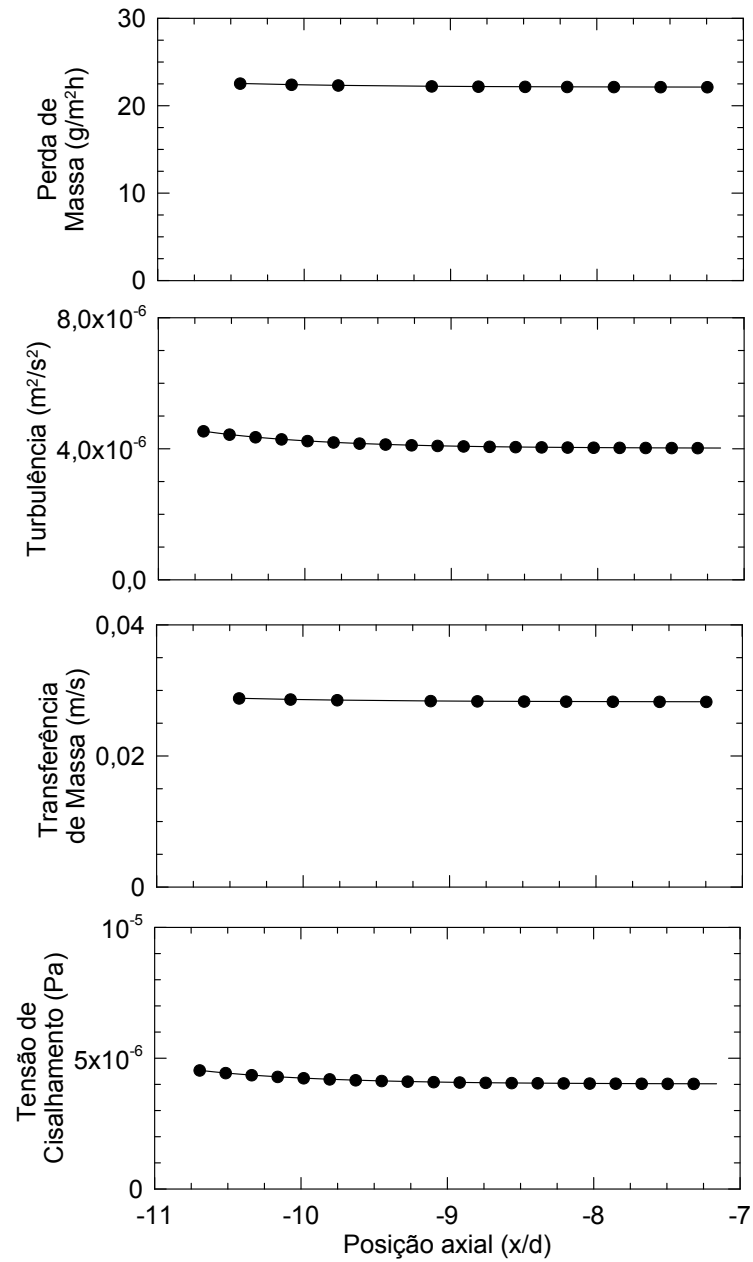


Figura 26: Variação dos parâmetros hidrodinâmicos e a perda de massa à montante da contração.

pela transferência de massa de oxigênio para a parede da tubulação (POULSON, 1999). Nota-se também que a tensão de cisalhamento na parede não segue o mesmo padrão que a perda de massa e os outros parâmetros do escoamento, chegando a um valor de zero na região de recolamento da camada limite após a recirculação. Isto leva a crer que não há uma relação intrínseca da taxa de cisalhamento com a corrosão para escoamentos em geometrias mais complexas, como naquelas em que há um descolamento do fluido (POULSON, 1999). Logo a suposição de que a tensão de cisalhamento na superfície pode ser utilizada como um parâmetro útil para prever a corrosão num escoamento onde há formação de vórtices pode ser refutada.

Porém, estas tendências levam a crer que há a possibilidade de as tensões turbulentas próxima à parede serem responsáveis pela ruptura mecânica dos produtos da corrosão, além do fato de a turbulência aumentar a taxa de transferência de massa naturalmente.

3.2.2 Camada Limite Hidrodinâmica e de Concentração

A maneira como os modelos de turbulência resolvem a região próximo à parede (camada limite) define as suas aplicabilidades. Na Seção 2.2 vimos que o modelo RNG $k - \varepsilon$ utiliza-se de funções de parede para formular os campos de velocidade e de concentração nas regiões muito próximas à parede, portanto não resolve completamente a camada limite e a sub-camada viscosa hidrodinâmica e de concentração. Já o modelo SST $k - \omega$ utiliza um modelo LRN para modelar essa região próximo à parede, assim a resolução da camada limite é completa.

A Figura 28 mostra a camada limite hidrodinâmica para regiões antes da contração, na contração e na expansão respectivamente, para o modelo SST $k - \omega$. A subcamada viscosa, região de interesse na estimativa de prever a taxa de corrosão, é completamente resolvida para valores $y^+ \approx 1$ em todas as regiões avaliadas.

De modo semelhante a Figura 29, mostra a camada limite de concentração de espécie para regiões antes da contração, na contração e na expansão respectivamente, para o modelo SST $k - \omega$. A subcamada viscosa, região de interesse na estimativa de prever a taxa de corrosão, é completamente resolvida para valores $y^+ \approx 0,1$ em todas as regiões avaliadas.

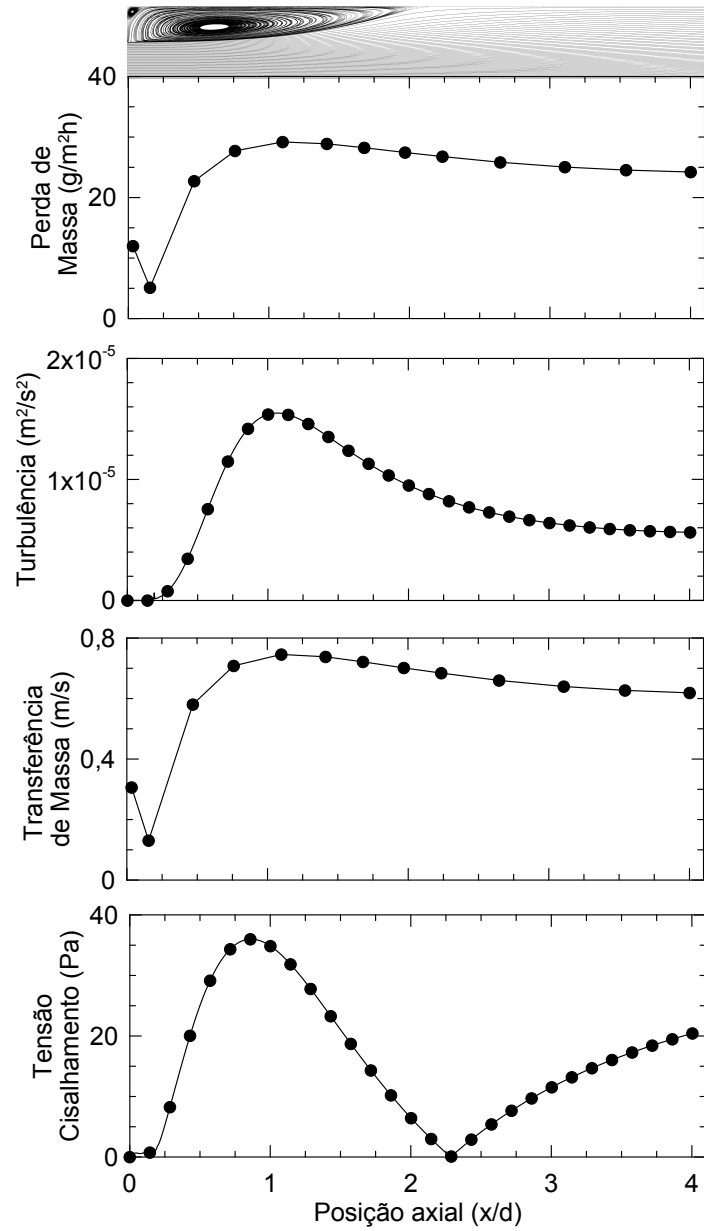
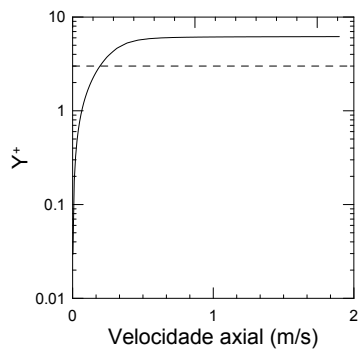
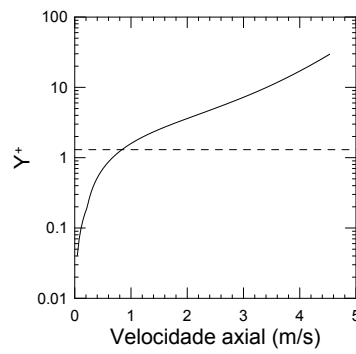


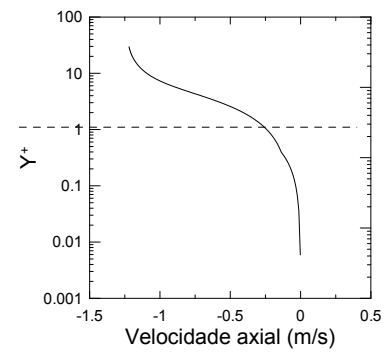
Figura 27: Variação dos parâmetros hidrodinâmicos e a perda de massa à jusante da expansão.



(a) À montante da contração (Seção 1).

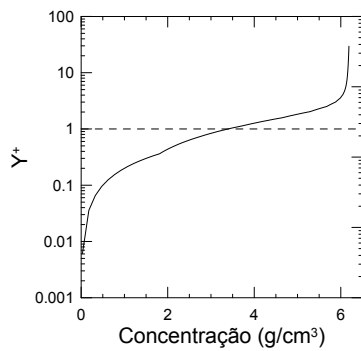


(b) Na contração (Seção 2).

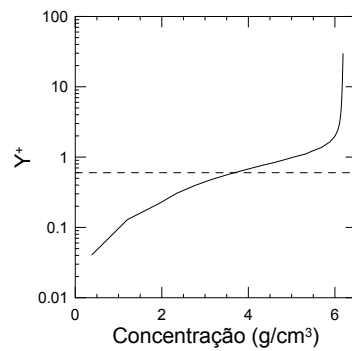


(c) À Jusante da expansão (Seção 3).

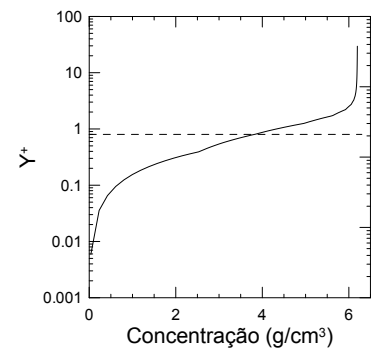
Figura 28: Resolução da camada limite hidrodinâmica.



(a) À montante da contração (Seção 1)



(b) Na contração (Seção 2)



(c) À jusante da expansão (Seção 3)

Figura 29: Resolução da camada limite de concentração de espécie.

3.2.3 Campos de Concentração de Espécie

A comparação dos campos de concentração de oxigênio pode ser observada na Figura 30 onde fica evidente que o modelo RNG $k - \varepsilon$ não resolve a camada limite de espécies por causa do tratamento usado para modelar a região próxima à parede ter uma resolução limitada. Enquanto que no modelo SST $k - \omega$ é possível observar a camada limite de espécies resolvida.

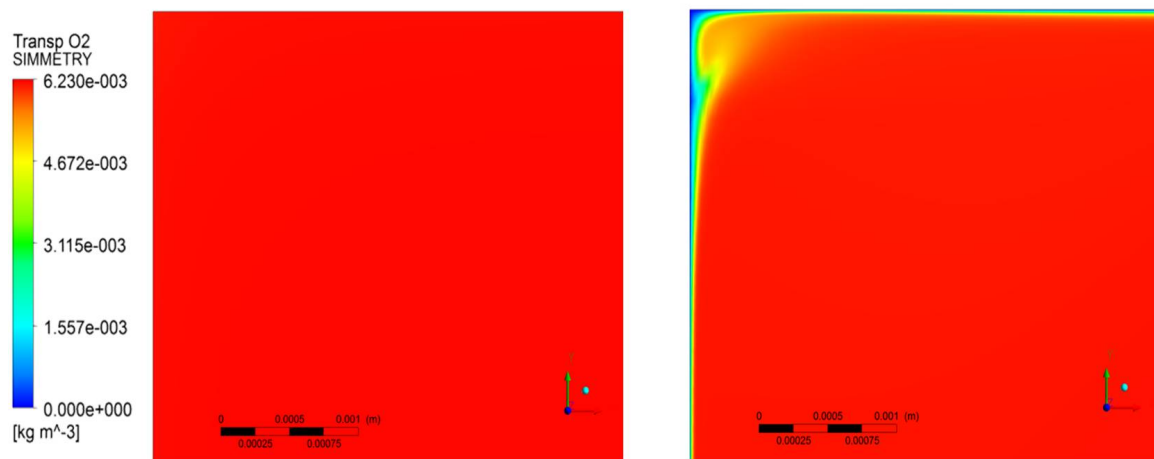


Figura 30: Comparação dos campos de concentração de espécie os modelos RNG $k - \varepsilon$, à esquerda, e SST $k - \omega$, à direita, na mesma escala à jusante da expansão.

3.2.4 Comprimento de Recirculação

A zona de recirculação gerada pelo fenômeno de separação e recolamento do fluxo é uma região de difícil modelagem por parte dos modelos de turbulência que envolve duas equações. Se o comprimento de saída (L_d) for de um tamanho que esteja nesta zona, a simulação não prosseguirá pois envolverá entrada de fluido na saída, o que não deve ocorrer pelo fato de ter que obedecer as leis da conservação. Essa postura não só afirma que o fluido não atende a condição de gradiente zero, como também se assume que há um gradiente reverso de velocidade na direção do escoamento médio como condição de saída implicando em erros relevantes de alta magnitude ((VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007)). Portanto, é imprescindível que o escoamento esteja modelado em uma região distante da recirculação e esteja preferencialmente totalmente desenvolvido na saída. O ponto de separação do fluxo nada mais é do que a separação

da camada limite e é definida como o limite entre o fluxo normal e o fluxo reverso na camada imediatamente próximo da parede, ou

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{wall} = 0 \quad (3.1)$$

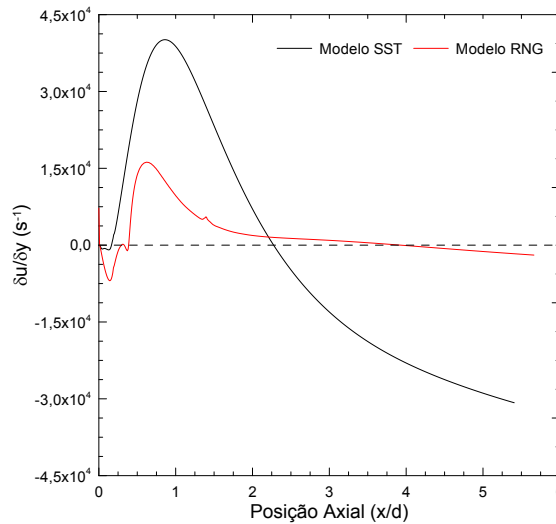


Figura 31: Zona de recirculação para os modelos RNG $k - \varepsilon$ e SST $k - \omega$.

Na Figura 31 pode ser observado o gradiente de velocidade na direção y para os modelos RNG $k - \varepsilon$ e SST $k - \omega$. Quando os gráficos para cada modelo cortam o eixo y em zero há um recolamento da camada limite hidrodinâmica. Este fenômeno diz onde as zonas de recirculação estão atuando. Ainda se percebe nesta mesma figura que o modelo SST $k - \omega$ previu de forma mais precisa a existência de dois vórtices. Isto pode ser melhor compreendido ao se observar as Figura 32, que mostra as linhas de correntes de velocidade obtidas para os modelos $k - \varepsilon$ e SST $k - \omega$ respectivamente à jusante da expansão, evidenciando os vórtices gerados pelos modelos.

O escoamento foi modelado e simulado com $L_d = 20D$, e é garantido que a saída do escoamento fique longe dessa região.

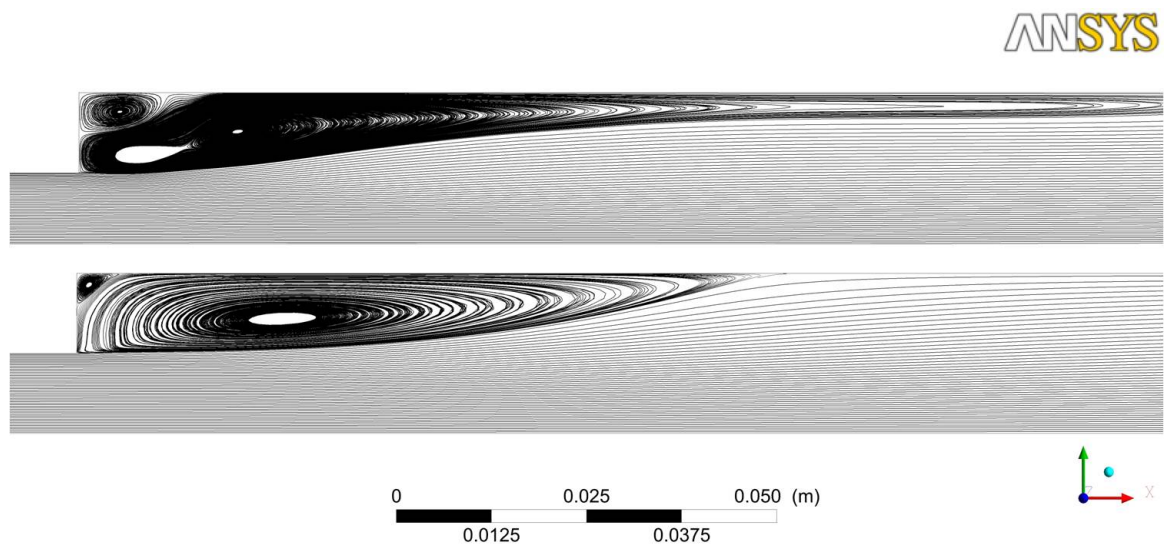


Figura 32: Linhas de correntes de velocidade geradas para os modelos RNG $k - \epsilon$ (acima) e SST $k - \omega$ (abaixo).

4 CONCLUSÕES

O objetivo do presente trabalho é o de estimar a perda de massa utilizando-se de ferramentas computacionais, como ANSYS CFX, o que foi totalmente possível. Investigou-se a habilidade de dois modelos de turbulência, aplicados ao ANSYS CFX, em estimar esta perda de massa corrosão ocasionada pelo escoamento turbulento de água saturada de oxigênio em uma geometria contendo uma contração-expansão. As conclusões foram separadas por seções, pois duas geometrias foram utilizadas com objetivos diferente focados a cada uma.

4.1 Hidrodinâmica

1. No geral, o modelo hidrodinâmico proposto oferece boa compatibilidade entre os resultados experimentais e os computacionais para os perfis de velocidade axial, com algumas discrepâncias para as posições mais distantes.
2. Para os perfis de energia cinética turbulenta, houve maior inabilidade por parte do modelo proposto devido ao fato de os modelos de turbulência serem compostos somente por duas equações para modelar o fenômeno.
3. Não houve influência das malhas confeccionadas para as simulações hidrodinâmicas, sendo assim os resultados encontrados são satisfatórios.

4.2 Hidrodinâmica mais Corrosão

1. O modelo obteve bons resultados ao ser comparado com dados experimentais contanto que para isso a camada limite hidrodinâmica e de transferência de massa sejam completamente resolvidas.
2. À jusante da expansão, maiores discrepâncias são observadas nos resultados devido às regiões de recirculação. Essas regiões são locais de difícil modelagem por parte dos modelos de turbulência de duas equações.
3. Há uma inabilidade do modelo na região de contração em estimar corretamente a perda de massa devido ao fato de o modelo não prever o impacto de partículas na superfície projetada. Nessas regiões, a perda de massa por erosão não pode ser negligenciada.

5 *SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS*

1. Melhora da malha na seção transversal do escoamento, retirando a descontinuidade e refinamento excessivo nas regiões próximo à contração e à expansão.
2. Modelos de turbulência como o Reynolds Stress Model (RSM) ou o Large Eddy Simulation (LES) poderiam prover melhores resultados na região de recirculação e para a energia cinética turbulenta por serem compostos por mais de duas equações.
3. Modelos de erosão podem ser implementados para investigar o efeito da erosão na remoção da camada protetora.
4. Modelos que acoplam a corrosão com a formação do filme de óxido podem ser implementados futuramente para investigar os efeitos causados por essa formação dos produtos da corrosão.
5. A mudança do regime de escoamento para transiente, além de ser um novo estudo, pode ser um exigência na implementação da formação de filme de óxido.
6. Aumentar o comprimento de entrada e verificar sua influência na taxa de corrosão.

Referências

- ABDEL-AZIZ, M.; MANSOUR, I.; SEDAHMED, G. Study of rate of liquid-solid mass transfer controlled processes in helical tubes under turbulent flow conditions. *Chemical Engineering and Processing*, v. 49, n. 49, p. 643–648, 2010.
- ABEL, K.; T.KONDOH; NAGANO, Y. A new turbulence model for predicting fluid flow and heat transfer in separating and reattaching flows — i. flow field calculations. *Int. J. Heat Mass Transfer*, v. 37, p. 139–151, 1994.
- BERGER, F.; HAU, K.-F.-L. Mass-transfer in turbulent pipe-flow measured by the electrochemical method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 20, p. 1185–1194, 1977.
- CFX - SOLVER THEORY GUIDE. *Ansys inc.* Release 13.0. [S.l.], Release 13.0.
- DAVIS, C.; FRAWLEY, P. Modelling of erosion-corrosion in practical geometries. *Corrosion Science*, v. 51, n. 51, p. 769–775, 2009.
- DOOLEY, R. B.; CHECAL, V. K. Flow-accelerated corrosion of pressure vessels in fossil plants. *International Journal for Pressure Vessels and Piping*, v. 77, p. 85–90, 2000.
- DURRETT, R.; STEVENSON, W.; THOMPSON, H. Radial and axial turbulent flow measurements with an LDV in an axisymmetric sudden expansion air flow. *Journal of Fluids Engineering*, v. 110, p. 367–372, 1988.
- EFIRD, K. D. Flow accelerated corrosion testing basics. *NACE International*, v. 06689, p. 12 – 16, 2006.
- FOUNTI, M.; KLIPFEL, A. Experimental and computational investigations of nearly dense two-phase sudden expansion flows. *Experimental Thermal and Fluid Science*, v. 17, p. 27–36, 1998.
- FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J. *Introdução à Mecânica dos Fluidos*. [S.l.]: LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2004.
- HASEGAWA, Y.; KASAGI, N. Low-pass filtering effects on viscous sublayer on high Schmidt number mass transfer close to a solid wall. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v. 30, n. 30, p. 525–533, 2009.
- HWANG, C.; LIN, C. Improved low-reynolds-number $k - \epsilon$ over-tilde model based on direct numerical simulation data. *AIAA J.*, v. 36, p. 38–43, 1998.
- KEATING, A.; NESIC, S. Prediction of two-phase erosion-corrosion in bends. *Second International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries*, p. 229–236, 1999.

- KEATING, A.; NESIC, S. Numerical prediction of erosion-corrosion in bends. *Corrosion Science*, v. 57, p. 621–633, 2001.
- KORONAKI, E. et al. Numerical study of turbulent diesel flow in a pipe with sudden expansion. *Applied Mathematical Modelling*, v. 25, p. 319–333, 2001.
- LAM, C.; BREMHORST, K. A modified form of the $k - \epsilon$ model for predicting wall turbulence. *Trns. ASME, J. Fluid Eng.*, v. 103, p. 460, 1981.
- LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. *Lectures in mathematical models of turbulence*. [S.l.]: London ; New York : Academic Press., 1972.
- LEVICH, V. *Physicochemical hydrodynamics*. [S.l.]: Englewood Cliff, 1962.
- LEWIS, M. E. *Dissolved Oxygen*. [S.l.]: Editor, 2006.
- LOTZ, U.; POSTLETHWAITE, J. Mass-transfer at erosion corrosion roughened surfaces. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 66(1), p. 75–78, 1988.
- LOTZ, U.; POSTLETHWAITE, J. Erosion-corrosion in disturbed two phase liquid/particle flow. *Corrosion Science*, v. 30, p. 95–106, 1990.
- MENTER, F. 2-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. , 1994. 32(8): p. 1598-1605. *Aiaa Journal*, v. 32(8), p. 1598–1605, 1994.
- NESIC, S. Using computational fluid dynamics in combating erosion-corrosion. *Chemical Engineering Science*, v. 61, p. 4086–4097, 2006.
- NESIC, S.; POSTLETHWAITE, J. Hidrodynamics of disturbed flow and erosion-corrosion. part i - single-phase flow study. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 69, p. 698–703, 1991.
- NESIC, S.; POSTLETHWAITE, J. Hidrodynamics of disturbed flow and erosion-corrosion. part ii - two-phase flow study. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 69, p. 704–710, 1991.
- POSTLETHWAITE, J.; DOBBIN, M.; BERGEVIN, K. The role of oxygen mass-transfer in the erosion-corrosion of slurry pipelines. *Corrosion*, v. 42(9), p. 514–521, 1986.
- POSTLETHWAITE, J.; HAWRYLAK, M. Erosion-corrosion in slurry pipelines. *Corrosion*, v. 30, p. 285–290, 1974.
- POSTLETHWAITE, J.; NESIC, S.; ADAMOPOLOUS, G. *Modelling local mass-transfer controled corrosion at geometrical irregularities*. [S.l.]: Copyright Trans Tech Publications, 1992. 53-62 p.
- POSTLETHWAITE, J. et al. Predictive models for erosion-corrosion under disturbed flow conditions. *Corrosion Science*, v. 35, p. 627–633, 1993.
- POULSON, B. Complexities in predicting erosion corrosion. *Wear*, v. 233-235, p. 497–504, 1999.

- SEDAHMED, G. et al. Effects of drag reducing polymers on the rate of mass transfer controlled corrosion in pipelines under developing turbulent flow. *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, v. 26, p. 531–538, 1999.
- SILVERMAN, D. Rotating cylinder electrode for velocity sensitivity testing. *Corrosion*, v. 40, p. 220–226, 1984.
- SILVERMAN, D. Rotating cylinder electrode - geometry relationships for prediction of velocity-sensitive corrosion. *Corrosion*, v. 44, p. 42–49, 1988.
- SYRETT, B. C. 'Erosion-Corrosion', *Corrosion Testing Made Easy*. [S.l.]: Volume 8, 2004.
- VERSTEEG, H.; MALALASEKERA, W. *An introduction to computational fluid dynamics : the finite volume method. 2nd ed. 2007, Harlow, England ; New York: xii, 503 p.* [S.l.]: Pearson Education Ltd, 2007.
- WANG, Y.; POSTLETHWAITE, J. The application of low reynolds number $k - \epsilon$ turbulence model to corrosion modelling in the mass transfer entrance region. *Corrosion Science*, v. 39, n. 7, p. 3190–3200, 1997.
- WHITE, F. M. *Viscous Fluid Flow*. [S.l.]: New York: McGraw-Hill., 1991.
- WILCOX, D. Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence. *AIAA Journal*, v. 26, p. 1299–1310, 1988.
- WILCOX, D. *Turbulence Modelling for CFD*. [S.l.]: DCW Industries, Inc., 2006.
- XIONG, J.; KOSHIZUKA, S.; SAKAI, M. Turbulence modeling for mass transfer enhancement by separation and reattachment with two-equation eddy-viscosity models. *Nuclear Engineering and Design*, v. 241, n. 241, p. 3190–3200, 2011.
- YAKHOT, V. et al. Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique. *Phys. Fluids, A* 4, p. 1510, 1992.
- YAKHOT, V.; ORSZAG, S. Renormalization-group analysis of turbulence. *Physical Review Letter*, v. 57(14), p. 1722–1724, 1986.
- Y.NAGANO; TAGAWA, M. An improved $k - \epsilon$ model for boundary layer flows. *J. Fluids Engineering*, v. 112, p. 48–55, 1990.