

PEDRO HENRIQUE AUGUSTO MOTA

**MODELAGEM NUMÉRICO-COMPUTACIONAL
MULTINÍVEIS DE PROCESSOS DE CORROSÃO EM
SISTEMAS FLUIDODINÂMICOS**



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA**

2023

PEDRO HENRIQUE AUGUSTO MOTA

**MODELAGEM NUMÉRICO-COMPUTACIONAL MULTINÍVEIS DE
PROCESSOS DE CORROSÃO EM SISTEMAS FLUIDODINÂMICOS**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para a obtenção do título de **DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA**.

Área de concentração: Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos.

Orientador: Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto

Coorientador: Dra. Millena Martins Villar

UBERLÂNDIA - MG

2023

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

M917 2023	<p>Mota, Pedro Henrique Augusto, 1990- Modelagem numérico-computacional multiníveis de processos de corrosão em sistemas fluidodinâmicos [recurso eletrônico] / Pedro Henrique Augusto Mota. - 2023.</p> <p>Orientador: Aristeu da Silveira Neto. Coorientadora: Millena Martins Villar. Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia, Pós-graduação em Engenharia Mecânica. Modo de acesso: Internet. Disponível em: http://doi.org/10.14393/ufu.te.2023.72 Inclui bibliografia. Inclui ilustrações.</p> <p>1. Engenharia mecânica. I. Silveira Neto, Aristeu da , 1955-, (Orient.). II. Villar, Millena Martins ,1977-, (Coorient.). III. Universidade Federal de Uberlândia. Pós-graduação em Engenharia Mecânica. IV. Título.</p> <p style="text-align: right;">CDU: 621</p>
--------------	--

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:
Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091
Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
Av. João Naves de Ávila, nº 2121, Bloco 1M, Sala 212 - Bairro Santa Mônica, Uberlândia-MG, CEP 38400-902
Telefone: (34) 3239-4282 - www.posmecanicaufu.com.br - secposmec@mecanica.ufu.br



ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-Graduação em:	Engenharia Mecânica			
Defesa de:	Tese de Doutorado Acadêmico, nº 352, PPGEM			
Data:	28/02/2023	Hora de início:	08:0	11:10
Matrícula do Discente:	11813EMC013			
Nome do Discente:	Pedro Henrique Augusto Mota			
Título do Trabalho:	Modelagem numérico-computacional multiníveis de processos de corrosão em sistemas fluidodinâmicos			
Área de concentração:	Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos			
Linha de pesquisa:	Dinâmica dos Fluidos e Transferência de Calor			
Projeto de Pesquisa de vinculação:				

Reuniu-se por meio de videoconferência a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, assim composta: Professores Doutores: João Marcelo Vedovotto - FEMEC/UFU; Louriel Oliveira Vilarinho - FEMEC/UFU; Ricardo Serfaty - PETROBRAS; Henry França Meier - FURB; Millena Martins Villar Vale (coorientadora) - FEMEC/UFU e Aristeu da Silveira Neto - FEMEC/UFU, orientador do candidato.

Iniciando os trabalhos, o presidente da mesa, Dr. Aristeu da Silveira Neto, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato, agradeceu a presença do público, e concedeu ao Discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do Discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir o senhor(a) presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente, aos(às) examinadores(as), que passaram a arguir o(a) candidato(a). Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final, considerando o(a) candidato(a):

Aprovado.

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **Aristeu da Silveira Neto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 28/02/2023, às 11:08, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Louriel Oliveira Vilarinho, Professor(a) do Magistério Superior**, em 28/02/2023, às 11:08, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Henry França Meier, Usuário Externo**, em 28/02/2023, às 11:09, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **João Marcelo Vedovotto, Professor(a) do Magistério Superior**, em 28/02/2023, às 11:09, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **ricardo serfaty, Usuário Externo**, em 28/02/2023, às 11:10, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Millena Martins Villar Vale, Usuário Externo**, em 28/02/2023, às 11:12, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **4283068** e o código CRC **1D4806DF**.

*Dedico este trabalho à minha
família, em especial aos meus
avós, pais e irmãs.*

"Pesquisar é acordar para o mundo."

Marcelo Lamy

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Deus por me guiar ao longo de toda a minha vida e por ter colocado pessoas tão especiais ao meu lado, a minha família.

Aos meus pais, Emanuel e Rosa, agradeço pelo apoio, paciência e carinho, não só neste período, mas em toda minha vida. As minhas irmãs, Ana e Isabela, pelo carinho e cumplicidade.

Ao meu orientador, Aristeu da Silveira Neto, coorientadora, Millena Martins Villar e Prof. João Marcelo Vedovoto agradeço pelo apoio, atenção, confiança e colaboração no solucionar de dúvidas e problemas que surgiram ao longo da realização deste trabalho.

Aos meus colegas de turma do MFLab gostaria de agradecer por todo o apoio, colaboração, ensinamentos, disponibilidade e conselhos.

Agradeço também ao programa, aos técnicos e ao corpo docente da Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFU por toda assistência, base teórica e estrutura concedidas. À Capes, FAPEMIG, CNPq e PETROBRAS pelo apoio financeiro.

Por fim, agradeço a todos professores, familiares, amigos e colegas que participaram da minha vida e, direta ou indiretamente, colaboraram para a execução deste trabalho.

Mota, P. H. A. **Modelagem numérico-computacional multiníveis de processos de corrosão em sistemas fluidodinâmicos.** 2023. 109 f. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

RESUMO

A corrosão acelerada pelo escoamento é um fenômeno presente em operações industriais que pode levar a falha de sistemas fluidodinâmicos e gerar perdas financeiras expressivas. Em sistemas corrosivos turbulentos industriais determinar as regiões de maior magnitude de velocidade, energia cinética turbulenta e tensões cisalhantes contribuem para identificar os locais mais suscetíveis à corrosão. No presente estudo foi aplicada a metodologia URANS para simulação do fenômeno da corrosão e da fluidodinâmica desses sistemas. Desse modo, foram resolvidas as equações de balanço de massa, de quantidade de movimento linear e de um escalar para modelagem da corrosão. Ressalta-se que para a modelagem de fechamento da turbulência foram considerados os modelos: LRN $k - \varepsilon$ AKN e $k - \omega$ SST. No presente estudo métodos multiníveis foram analisados para obter uma metodologia que proporcionasse maior eficiência computacional para o estudo do fenômeno multi-físico. O método multinível implementado no software MFSim tem como característica resolver as equações que representam os fenômenos em malhas diferentes considerando os comprimentos característicos de cada fenômeno. A aplicação do método é justificado em razão do elevado número de Sc de escoamentos turbulentos com corrosão. Na primeira análise do presente estudo considerou-se um problema de solução manufaturada para verificação do código MFSim. Após a verificação do código, o método multinível foi avaliado e observou-se uma redução dos custos computacionais em aproximadamente 90% e pequenos desvios do escalar passivo. Na segunda parte do estudo, o método multinível foi analisado nos seguintes escoamentos: expansão brusca, jatos de impacto e sobre uma esfera. Para a expansão brusca observou-se que os coeficientes de transferência de massa apresentaram um desvio desprezível considerando uma malha 16 vezes mais grossa para a fluidodinâmica. Além disso, a redução de custo computacional foi de aproximadamente 90% com o método multinível e foi possível obter resultados de coeficiente de transferência de massa com pequenos desvios considerando o uso do método da Fronteira Imersa. Na análise do escoamento de jatos de impacto foram obtidos desvios moderados do coeficiente de transferência de massa na região de estagnação. Além disso, foi possível obter boa representatividade do fenômeno multi-físico considerando uma malha 4 vezes mais grossa para a fluidodinâmica com uma redução de custo computacional de 90%. Para as simulações do escoamento sobre a esfera uma malha 4 vezes mais grossa foi definida para a fluidodinâmica, o que resultou em pequenos desvios de Sh considerando correlações usualmente aplicadas na literatura. Com relação ao método multinível, foi possível simular este escoamento com tempo de simulação aproximadamente 30% menor. Os resultados obtidos com o MFSim apontam uma redução expressiva do custo computacional com a aplicação do método multinível, tornando possível a análise de problemas industriais com menor custo computacional.

Palavras-chave: Método multinível, Corrosão acelerada pelo escoamento, método da Fronteira Imersa, expansão brusca, jato de impacto, escoamento sobre esfera.

Mota, P. H. A. **Multilevel Numerical-computational modeling of corrosion processes in fluiddynamic systems.** 2022. 109 p. Doctorate Thesis, Federal University of Uberlândia, Uberlândia.

ABSTRACT

Flow accelerated corrosion is a phenomenon observed in industrial operations that can lead to the failure of fluid dynamic systems and generate significant financial losses. In industrial turbulent corrosive systems, determining the regions of greater magnitude of velocity, turbulent kinetic energy and shear stresses contribute to identifying the most susceptible places to corrosion. In the present study, the URANS methodology was applied to simulate the phenomenon of corrosion and the fluid dynamics of these systems. Thus, the following equations were solved: mass balance, linear momentum and a scalar balance equation for corrosion modelling. It should be noted that for the turbulence closure modelling, the following were considered: LRN $k - \epsilon$ AKN and $k - \omega$ SST. In the present study, multilevel methods were analyzed to obtain a methodology that would provide greater computational efficiency for the study of this multi-physics phenomenon. The multilevel method implemented in the MFSim software has the characteristic of solving the equations that represent the phenomena in different meshes considering the characteristic lengths of each phenomenon. The application of the method is justified due to the high number of Sc of turbulent flows with corrosion. In the first analysis of the present study, a manufactured solution problem was considered to verify the MFSim code. After verifying the code, the multilevel method was evaluated, and a reduction in computational costs of approximately 90% and slight deviations from the passive scalar were observed. In the second part of the study, the multilevel method was analyzed in flows: sudden expansion, impingement jet and around a sphere. For the sudden expansion, it was observed that the mass transfer coefficients presented a minor deviation considering a mesh 16 times thicker for the fluid dynamics. Furthermore, the computational cost reduction was approximately 90% with the multilevel method, and it was possible to obtain mass transfer coefficient results with slight deviations considering the Immersed Boundary method. In the impingement jet flow analysis, moderate deviations of the mass transfer coefficient were obtained in the stagnation region. Furthermore, it was possible to get a good representation of the multi-physics phenomenon considering a mesh four times thicker for fluid dynamics with a computational cost reduction of 90%. For the simulations of the flow over the sphere, a mesh four times thicker was defined for the fluid dynamics, which resulted in slight deviations of Sh considering correlations usually applied in the literature. Regarding the multilevel method, it was possible to simulate this flow with a simulation time of approximately 30% smaller. The results obtained in MFSim point to a significant reduction in computational cost with the application of the multilevel method, making it possible to analyze industrial problems with lower computational costs.

Keywords: Multilevel method, Flow accelerated corrosion, Immersed boundary method, sudden expansion, impingement jet, flow around sphere.

LISTA DE FIGURAS

2.1	Representação esquemática do mecanismo de corrosão no aço. Fonte: Adaptado de Silverio (2019).	9
2.2	Representação esquemática do mecanismo da FAC na camada protetora. Fonte: Adaptado de Dooley (2008).	10
2.3	Diagrama de Pourbaix. Fonte: Gentil (2011).	11
2.4	Influência do pH no fenômeno da corrosão. Fonte: Adaptado de Cramer e Covino (2003).	12
2.5	Influência da concentração de oxigênio no fenômeno da corrosão. Fonte: Adaptado de Cramer e Covino (2003).	13
2.6	Dependência da temperatura em escoamentos monofásicos com presença de FAC sob diferentes condições fluidodinâmicas e condições químicas. Fonte: Dooley (2008).	14
2.7	Representação esquemática de um jato de impacto. Fonte: Adaptado de Helal et al. (2018).	16
2.8	Isosuperfícies de propriedades do escoamento e da concentração de oxigênio em um sistema fluidodinâmico com corrosão. Fonte: Adaptado de nada ().	17
2.9	Isosuperfícies de propriedades do escoamento e taxa de corrosão em um sistema fluidodinâmico com corrosão. Fonte: Adaptado de Madasamy et al. (2021a).	18
2.10	Resultados da simulação em um cotovelo de 90° com $Re = 73.684$, isosuperfícies de: a) velocidade b) pressão c) tensão cisalhante d) Energia cinética turbulenta. Fonte: Adaptado de Si et al. (2018).	22
2.11	Resultados da simulação em um cotovelo de 90° com $Re = 40.000$ considerando a seção média da tubulação: a) Vetores de velocidade b) Isosuperfície de energia cinética turbulenta normalizada. Fonte: Adaptado de El-Gammal et al. (2010).	23
4.1	Malha bloco estruturada com três níveis de refinamento corretamente agrupada.	43

4.2	Interpolação do campo de velocidade a) primeira etapa da interpolação b) segunda etapa da interpolação.	46
4.3	Fluxograma da ordem de resolução das equações de balanço sem a aplicação do método multinível.	51
4.4	Fluxograma da ordem de resolução das equações de balanço por meio do método multinível com a interpolação espacial.	52
4.5	Fluxograma da ordem de resolução das equações de balanço por meio do método multinível com o processo de interpolação espacial e temporal.	53
4.6	Fluxograma da ordem de resolução das equações de balanço por meio do método multinível com o processo de interpolação espacial.	55
5.1	Blocos de refinamento utilizados na verificação numérica.	59
5.2	Blocos de refinamento utilizados nas simulações de solução manufaturada com 32^3 volumes no nível base.	60
5.3	Representação do domínio computacional do escoamento de expansão brusca.	63
5.4	Malha computacional utilizada nas simulações de expansão brusca.	64
5.5	Isovalores de parâmetros do escoamento no regime permanente da simulação 1.	65
5.6	Perfil do coeficiente de transferência de massa na tubulação após expansão.	66
5.7	Perfil da viscosidade turbulenta e da velocidade na direção x na tubulação após expansão.	67
5.8	Malha computacional aplicada na simulação 8.	70
5.9	Isovalores de propriedades do fenômeno de expansão brusca na simulação 6.	72
5.10	Isovalores de propriedades do fenômeno de expansão brusca nas simulação 7.	73
5.11	Perfil de Sh ao longo da tubulação após a expansão brusca das simulações 6, 7 e 8.	74
5.12	Representação do domínio computacional do jato de impacto confinado.	76
5.13	Malha computacional utilizada nas simulações para o caso de jato de impacto confinado.	77
5.14	Campo de velocidade, k e ω no regime permanente no escoamento do jato de impacto confinado.	78
5.15	Resultados do perfil de velocidade na direção x para diferentes seções (x/B).	79
5.16	Análise de convergência de malha - Sh	82

5.17	Análise de convergência de malha - u/v_e	82
5.18	Perfil de Sh ao longo da placa de impacto nas simulações com e sem aplicação do método multinível.	83
5.19	Comparação do perfil da velocidade normalizada ao longo da placa de impacto nas simulações com e sem aplicação do método multinível.	84
5.20	Domínio computacional aplicado nas simulações do escoamento ao redor de uma esfera.	87
5.21	Malha computacional aplicada para resolver o escoamento ao redor de uma esfera.	88
5.22	Malha computacional da fluidodinâmica e da corrosão com a aplicação do método multinível.	90
5.23	Linhas de corrente no escoamento sobre a esfera para um tempo físico de 3,0 s.	91
5.24	Vetores de velocidade no escoamento sobre a esfera para um tempo físico de 3,0 s.	91
5.25	Campo de escalares para um tempo físico de 3,0 s a) $Sc = 1$ b) $Sc = 10$	93

LISTA DE TABELAS

1.1	Plantas de energia nuclear e fósil com eventos de corrosão acelerada pelo escoamento.	2
2.1	Correlações de Sh para diferentes tipos de escoamento. Fonte: Mazhar (2013).	15
3.1	Constantes e condições de contorno dos modelos LB e AKN	35
5.1	Normas L_2 e razão de convergência para verificação numérica.	59
5.2	Normas $L_2 - c$ obtidos nas simulações de solução manufaturadas com e sem o método multinível.	61
5.3	Tempo computacional das simulações de solução manufaturada com e sem o método multinível.	61
5.4	Dados da malha referente às simulações com método multinível.	64
5.5	Comparação dos tempos computacionais com aplicação do método multinível para simulações de expansão brusca.	68
5.6	Dados da malha utilizados para análise do método da Fronteira Imersa.	70
5.7	Comparação dos tempos computacionais com aplicação do método multinível para simulações do jato de impacto.	85
5.8	Comparação do adimensional respectivo ao comprimento da bolha de recirculação.	92
5.9	Comparação do coeficiente de arrasto C_d com e sem aplicação do método multinível.	92
5.10	Comparação do Sh com estudos da literatura.	94
5.11	Comparação dos tempos computacionais com aplicação do método multinível.	95

LISTA DE SÍMBOLOS

SÍMBOLOS GREGOS

- α - difusividade do escalar;
 α_0 - coeficiente de discretização do tempo $t - \Delta t$;
 α_1 - coeficiente de discretização do tempo t ;
 α_2 - coeficiente de discretização do tempo $t + \Delta t$;
 β - coeficiente do modelo $k - \omega$ SST;
 β^* - coeficiente do modelo $k - \omega$ SST;
 ε - Taxa de transformação viscosa;
 Δt - passo de tempo;
 ΔV - volume lagrangiano;
 Δx - comprimento da malha na direção x;
 Δy - comprimento da malha na direção y;
 Δz - comprimento da malha na direção z;
 μ - viscosidade dinâmica do fluido;
 μ_t - viscosidade dinâmica turbulenta;
 ν - viscosidade cinemática do fluido;
 ν_t - viscosidade cinemática turbulenta;
 ρ - massa específica do fluido;
 σ - coeficiente dos modelos $k - \omega$ SST e LRN $k - \varepsilon$ AKN;
 τ_{ij} - tensor de Reynolds;
 ω - dissipação específica;

SÍMBOLOS LATINOS

- a - coeficiente do modelo $k - \omega$ SST, coeficiente do método de interpolação espacial;
 b - coeficiente do método de interpolação espacial;
 c - escalar passivo, coeficiente do método de interpolação espacial;
 \bar{c} - escalar médio;
 C_L^* - escalar auxiliar para multi-forçagem direta;

U^* - Velocidade auxiliar para multi-forçagem direta;
 C - condição de CFL;
 D_h - função interpolação/distribuição;
 E_h - potencial da corrosão;
 f_i - termo fonte de força euleriano;
 f_{ic} - termo fonte na equação de balanço do escalar;
 F_i - força no ponto lagrangiano - equações de quantidade de movimento linear;
 F_{ic} - força no ponto lagrangiano - equação de balanço do escalar;
 F_1 - função de hibridização do modelo k - ω SST;
 $f_{\epsilon 1}$ - função de amortecimento do modelo LRN k - ϵ AKN;
 $f_{\epsilon 2}$ - função de amortecimento do modelo LRN k - ϵ AKN;
 f_{μ} - função de amortecimento do modelo LRN k - ϵ AKN;
 g - gravidade;
 l_b - comprimento característico de Batchelor;
 l_k - comprimento característico de Kolmogorov;
 k - energia cinética turbulenta;
 k_m - coeficiente de transferência de massa;
 L_{mn} - diferença de níveis físicos da malha da corrosão e da fluidodinâmica;
 npl - número de níveis físicos;
 p - pressão;
 P_k - termo de transferência do modelo k - ω SST;
 Pr - número de Prandtl;
 Q_j - escalar de fluxo;
 Re - número de Reynolds;
 RHS_i - termo do lado direito da equação do momentum no ponto lagrangiano;
 R_y - adimensional do modelo LRN k - ϵ AKN;
 R_{ϵ} - adimensional do modelo LRN k - ϵ AKN;
 S - Norma do tensor da taxa de deformação;
 Sc - número de Schmidt;
 Sc_t - schmidt turbulento;
 Sh - número de Sherwood;
 t - tempo físico;

t_{adv} - tempo advectivo;
 t_{dif} - tempo difusivo;
 u_i - componente da velocidade na direção i ;
 \bar{u}_i - velocidade média;
 u'_i - flutuação de velocidade em notação indicial;
 U_i - velocidade no ponto lagrangiano;
 U^* - velocidade auxiliar para multi-forçagem direta;
 v - velocidade na direção y ;
 x_i - coordenada da direção i ;
 w - velocidade na direção z ;
 y^+ - parâmetro da malha computacional.

SIGLAS

AKN - Abe, Kondoh e Nagano;
 CFL - Courant, Friedrichs e Lewy;
 DNS - Direct Numerical Simulation;
 EC - Erosão e corrosão;
 FAC - Flow Accelerated Corrosion;
 FBR - Fast Breeder Reactor;
 FI - Fronteira Imersa;
 GCR - Gas-cooled reactor;
 GDP - Gross Domestic product;
 HL - Hwang e Lin;
 LB - Lam e Bremhorst;
 LES - Large-Eddy Simulation;
 LRN - Low Reynolds Number;
 $NACE$ - National Association of Corrosion Engineers;
 $PHWR$ - Pressurized Heavy-Water Reactor;
 PWR - Pressurized Water Reactor;
 $RANS$ - Reynolds Average Navier Stokes;
 $RBMK$ - Reaktor Bolshoy Moshchnosty Kanalny;

RSM - Reynolds Stress Models;

URANS - Unsteady Reynolds Average Navier Stokes;

VVER - Water-water Energetic Reactor.

OPERADORES

Δ - variação;

∂ - derivada parcial;

∇ - operador divergente;

\int - integral

Σ - somatório.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	x
LISTA DE TABELAS	xiii
LISTA DE SÍMBOLOS	xiv
CÁPITULO I - Introdução	1
1.1 Motivação	1
1.2 Objetivos	5
1.3 Estrutura da tese	6
CÁPITULO II - Revisão bibliográfica	8
2.1 Corrosão induzida pelo escoamento	8
2.1.1 Condições químicas da água	11
2.1.2 Temperatura	13
2.1.3 Material	14
2.1.4 Escoamento turbulento	15
2.2 Modelagem numérico-computacional da corrosão induzida pelo escoamento . .	19
2.3 Métodos multiníveis	27
CÁPITULO III - Modelo matemático	30
3.1 Formulação diferencial para a fluidodinâmica e corrosão	30
3.2 Formulação para a turbulência	31
3.2.1 Modelo de fechamento $k - \epsilon$	33
3.2.2 Modelo de fechamento $k - \omega$ SST	36
3.3 Formulação diferencial para a fronteira imersa fluidodinâmica	37
3.4 Formulação diferencial para a fronteira imersa corrosão	39

3.5	Modelagem da corrosão	40
CÁPITULO IV - Modelagem numérico-computacional		42
4.1	Modelagem computacional	42
4.2	Interpolação do campo de velocidade	46
4.3	Interpolação temporal do campo de velocidade	51
CÁPITULO V - Resultados e discussão		57
5.1	Verificação	57
5.2	Verificação do método multinível	59
5.3	Expansão brusca	62
5.3.1	Escoamento de expansão brusca com $Re = 21.000$ e $Sc = 1.460$	62
5.3.2	Escoamento de expansão brusca com $Re = 10.000$ e $Sc = 1,0$	68
5.4	Jato de impacto confinado	74
5.4.1	Análise da fluidodinâmica	75
5.4.2	Análise da corrosão	80
5.5	Escoamento ao redor de uma Esfera	86
CÁPITULO VI - Conclusões e perspectivas		97
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS		102

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

Segundo Gentil (2011) a corrosão pode ser definida como um processo espontâneo de transferência de massa que ocorre devido às reações químicas ou eletroquímicas, que estão associadas ou não à esforços mecânicos. Os fatores que influenciam o processo da corrosão são diversos, e seu estudo é de grande importância devido aos custos adicionais em vários setores da indústria. Em 2013, a NACE International estimou o custo global da corrosão em US\$ 2,505 trilhões, o que representou cerca de 3,4 % do GDP global. Além do custo financeiro, a falha de sistemas fluidodinâmicos pela corrosão também tem como consequência o aumento de riscos individuais e impactos ambientais. Desse modo, observa-se um grande custo relacionado ao fenômeno da corrosão e por isso o estudo de mecanismos que influenciam no processo corrosivo são importantes para adequação de processos na indústria.

Uma lista de acidentes na indústria devido à corrosão induzida pelo escoamento pode ser observada na Tab. 1.1. Dois acidentes mais conhecidos são os das plantas de Surry e de Mihama. O acidente da planta de Surry ocorreu em 1986 e quatro trabalhadores morreram em razão da falha. A corrosão foi observada no sistema de condensação próximo à região de curvatura da tubulação. O sistema tinha como característica um escoamento monofásico, uma temperatura de 190°C, uma velocidade de 5,5 m/s e o condicionamento químico da água foi realizado com amônia e hidrazina ($\text{pH}_{25^\circ\text{C}}$ de aproximadamente 9,2). A região com maior corrosão foi localizada na região de entrada e na superfície interna da curva. Este acidente mostrou a necessidade de programas de inspeção para identificar a redução de espessura da tubulação. A tubulação

na região da curva apresentava uma espessura de 12,5 mm e no ponto de ruptura a espessura medida foi de 1,5 mm. Na planta de energia de Mihama a ruptura da tubulação ocorreu no Japão em 2004. A falha foi localizada após a placa de orifício em uma linha de condensação. A temperatura do fluido era de 140°C e o vazamento da água quente e do vapor levaram à morte de cinco trabalhadores. Na investigação do acidente foi indicada que a causa da ruptura foi a corrosão acelerada pelo escoamento.

Tabela 1.1: Plantas de energia nuclear e fóssil com eventos de corrosão acelerada pelo escoamento.

Data	Local	Planta	Componente - falha
1972	Saint – Laurent A -2 (França)	GCR	Tubulação – placa de orifício
1975	Phenix (França)	FBR	Tubulação – placa de orifício
1980	Fessenheim – 2 (França)	PWR	Tubulação – J
1985	Bugey – 5 (França)	PWR	Tubulação - expansão
1986	Surry – 2 (EUA)	PWR	Tubulação curva – sistema de condensação
1989	Santa Maria de Garona (Espanha)	PWR	Tubulação reta – medidor de vazão
1990	Loviisa – 1 (Finlândia)	PWR	Tubulação reta – medidor de vazão
1991	Millstone – 2 (EUA)	PWR	Tubulação curva
1991	Almaraz – 1 (Espanha)	PWR	Tubulação - T
1992	Dukovany (República Checa)	VVER	Tubulação curva
1993	Loviisa – 2 (Finlândia)	PWR	Tubulação - medidor de vazão
1993	Fessenheim – 2 (França)	PWR	Venturi
1996	Gravelines – 3 (França)	PWR	Tubulação – válvula de checagem
1997	Fort Calhoun (EUA)	PWR	Tubulação curva
2000	Fessenheim – 2 (França)	PWR	Tubulação – válvula
2004	Mihama 3 (Japão)	PWR	Tubulação - placa de orifício
2004	Zaporozhye – 4 (Russia)	VVER	Tubulação curva
2005	Fukushima Daini – 1 (Japão)	BWR	Tubulação reta – placa de orifício
2005	Smolensk – 2 (Russia)	RBMK	Tubulação – válvula
2006	Kakrapar – 2 (Índia)	PHWR	Tubulação – placa de orifício

Adaptado de Ritter (2020).

Nos acidentes detalhados na Tab. 1.1 as regiões de maior desgaste são observadas em locais onde o escoamento é mais complexo. Nos sistemas de placas de orifício observa-se o desenvolvimento de um escoamento instável, que induz um escoamento com elevados gradientes de

propriedades associadas à turbulência na região parietal. Em tubulações com curvas, observa-se a formação de escoamentos secundários que resultam em maiores magnitudes de velocidade na região interna ou externa da curva. Em ambos fenômenos a taxa de corrosão é intensificada em locais específicos e geralmente são associadas às propriedades do escoamento: velocidade, energia cinética turbulenta e tensões de cisalhamento. Dentre os estudos que buscam analisar a corrosão nestes sistemas destaca-se a utilização de modelos de fechamento que podem calcular com acurácia as taxas de desgaste em condições operacionais específicas.

Na análise da corrosão com métodos de dinâmica do fluido computacional são considerados métodos RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes). A utilização dessa abordagem permite uma análise direta do escoamento médio para diversas aplicações, e possui custo computacional inferior em comparação a outros métodos como LES (Large Eddy Simulation) e DNS (Direct Numerical Simulation) que necessitam de uma malha mais fina para capturar as pequenas estruturas do escoamento. Além disso, a metodologia URANS (Unsteady Reynolds Average Navier-Stokes) também pode ser utilizada para estudos da corrosão em sistemas fluidodinâmicos. A principal preocupação no uso dessas metodologias é a modelagem do escoamento nas regiões de camada limite fluidodinâmica e da corrosão.

Na modelagem fluidodinâmica/corrosão o cálculo do escoamento na região da camada limite da corrosão é um fator limitante em razão do aumento do custo computacional para análise do fenômeno multi-físico. Em processos industriais a espessura da camada limite do fenômeno da corrosão é menor do que a espessura da camada limite fluidodinâmica. No fenômeno analisado por Calculation... (1992) um escoamento com $Re = 21.000$ e $Sc = 1.460$ tem como característica uma espessura da subcamada viscosa e de transferência de massa de 150 e $5 \mu m$, respectivamente. Desse modo, a fluidodinâmica é resolvida, desnecessariamente, em uma malha mais fina, a qual aumenta o custo computacional para o cálculo da fluidodinâmica. A menor espessura da camada limite é justificada pelo elevado número de Schmidt (Sc) observado em aplicações industriais. Segundo Calculation... (1992) a relação $\delta_{sca} = \delta_{hid} / Sc^{1/3}$ pode ser aplicada para determinar as espessuras da subcamada limite de cada fenômeno e os comprimentos da malha na região parietal para modelagem de cada fenômeno.

Em razão do aumento do custo computacional na etapa do cálculo das equações que representam o fenômeno da fluidodinâmica, foi proposto no presente estudo a aplicação de uma metodologia que permite resolver os fenômenos em malhas distintas. Assim, com base nesse método as equações que representam a fluidodinâmica e a corrosão são resolvidas em malhas

adequadas para análise de cada fenômeno. O uso dessa metodologia é abordado em estudos de transferência de massa e proporcionam uma redução de custo computacional de até 75%.

No presente estudo o método de resolução das equações em malhas com características distintas na região parietal foi implementado e analisado no software MFSim, desenvolvido no Laboratório de mecânica dos Fluidos (MFLab) da Universidade Federal de Uberlândia. Em razão das características do software MFSim o método analisado no presente estudo foi nomeado como multinível. Para a implementação do método no MFSim foram implementados dois métodos de interpolação. Além disso, em algumas simulações a modificação na ordem da resolução das equações que representam cada fenômeno foi necessária.

O primeiro método de interpolação implementado no MFSim é o processo de interpolação espacial, necessário para levar as informações do campo de velocidade da malha fluidodinâmica para a malha da corrosão. Esse método é utilizado em outros estudos e permite obter um campo de velocidade que mantém as características de divergente nulo do campo de velocidade nas malhas mais finas. O segundo método de interpolação trata-se de um procedimento de interpolação temporal. Visto que a fluidodinâmica é resolvida em uma malha com características diferentes em regiões parietais da malha da corrosão, o passo temporal de ambos fenômenos também serão diferentes. Como o passo de tempo para o fenômeno do presente estudo apresenta valores maiores para a fluidodinâmica, não há necessidade em resolver as equações de balanço de quantidade de movimento linear em todos os passos de tempo. Em passos de tempos intermediários, onde a fluidodinâmica não é resolvida, um procedimento de interpolação temporal é eficaz para calcular o campo de velocidade e resolver a equação de balanço do escalar. No procedimento de interpolação temporal do campo de velocidade, primeiro calcula-se o campo de velocidade no passo de tempo $(t + \Delta t_{fluid})$. Com base nos campos de velocidade nos passos de tempo t e $(t + \Delta t_{fluid})$, um campo de velocidade pode ser obtido para tempos intermediários considerando o passo de tempo da corrosão (Δt_{fluid}) . Com isso, após obter o campos de velocidade para um tempo intermediário, a equação de balanço respectiva à corrosão é resolvida.

A partir de resultados de outros estudos, verifica-se que o método multinível não foi utilizado em problemas que consideram escoamento parietal e modelagem de fechamento de turbulência. Um dos pontos que foram analisados no presente estudo é se os métodos de interpolação espacial/temporal permitem obter um campo de velocidade adequado na região da camada limite da corrosão para resolver as equações adicionais dos modelos de fechamento

da turbulência e da corrosão sem perda de acurácia. O cálculo das propriedades associadas à turbulência é essencial para a modelagem computacional do fenômeno da corrosão, pois estão diretamente associados a parâmetros que afetam a concentração de espécies químicas nas regiões da parede.

Outro desafio é a aplicação do método multinível em simulações em que o método da fronteira imersa é aplicado. No MFSim a representação de regiões parietais a modelagem numérico-computacional em escoamentos complexos é realizada por meio de um processo forçagem considerando uma malha lagrangiana. Pode ser especificado como desafio no estudo do método multinível no MFSim, verificar se as condições de contorno estabelecidas para a velocidade em níveis físicos que apresentam volumes de maior comprimento são respeitadas na malha mais fina, que é utilizada para modelagem da corrosão/turbulência.

Além da implementação e análise dos métodos de interpolação para resolver o fenômeno multi-físico com maior eficiência computacional, uma análise inicial foi realizada no presente estudo considerando escoamentos com corrosão. No presente estudo a corrosão foi analisada em um sistema de expansão brusca e em um escoamento de jatos de impacto. Além disso, um escoamento ao redor de uma esfera com baixos valores de Re e Sc foi avaliado para analisar a implementação do método multinível em simulações com fronteira imersa.

1.2 Objetivos

O principal objetivo do presente trabalho é desenvolver uma metodologia numérico-computacional eficiente para simular fenômenos de corrosão em sistemas fluidodinâmicos. Por meio de estudos prévios sobre o tema da corrosão acelerada pelo escoamento (FAC - Flow accelerated corrosion) são observadas diferentes restrições para modelagem da fluidodinâmica e do processo corrosivo associadas às camadas limites de cada fenômeno. Esta característica possibilita a implementação de métodos multiníveis para resolver as equações de balanço com as quais modela-se o fenômeno em diferentes tempos e comprimentos característicos. Desse modo, foi proposta a aplicação de uma metodologia multinível para a simulação do fenômeno de corrosão em sistemas fluidodinâmicos com a finalidade de desenvolver um método computacional eficiente, que requer menores recursos computacionais, para avaliação do processo de degradação.

Os objetivos específicos para o desenvolvimento do presente estudo foram:

- Revisão bibliográfica a respeito da modelagem do fenômeno da corrosão em sistemas

fluidodinâmicos e métodos multiníveis;

- Estudo e desenvolvimento da metodologia multinível no contexto da plataforma MFSim;
- Verificação e validação do modelo numérico desenvolvido por meio de problemas já abordados na literatura;
- Realização de simulações por meio do modelo numérico-computacional desenvolvido, considerando problemas discutidos e avaliados em estudos de corrosão.

1.3 Estrutura da tese

A presente tese está estruturada da seguinte forma:

- Capítulo 1 - Introdução: Realizou-se uma breve introdução dos temas abordados na tese. Além disso, a motivação e os objetivos do presente estudo estão apresentados.
- Capítulo 2 - Revisão bibliográfica: Neste capítulo está apresentada a revisão da literatura acerca do tema da corrosão em sistemas fluidodinâmicos. Foram detalhados os principais fatores que afetam o processo da corrosão em escoamentos turbulentos. Além disso, estudos numérico-computacionais da corrosão induzida pelo escoamento estão descritos. Além disso, estudos que utilizam estratégias para ganhos de eficiência computacional em simulações numérico-computacionais de fenômenos multi-físicos também estão relacionadas;
- Capítulo 3 - Modelo matemático: Toda modelagem matemática utilizada no presente trabalho estão detalhadas incluindo as formulações, equações de quantidade de movimento linear, equação de escalares, fronteira imersa fluidodinâmica e de escalares. Por último, um mecanismo de corrosão foi apresentado e os principais parâmetros utilizados para análise da corrosão em escoamentos turbulentos estão descritos;
- Capítulo 4 - Modelagem numérico-computacional: Neste Capítulo está apresentada a modelagem numérico-computacional utilizada na presente tese. Estão detalhadas algumas características do código MFSim e os métodos de interpolação utilizados no método multinível.

- Capítulo 5 - Resultados e discussão: Os resultados obtidos nas simulações numérico-computacionais da corrosão em sistemas fluidodinâmicos estão detalhadas e analisadas. O método multinível foi avaliado inicialmente em um problema de solução manufaturada. Após as simulações de verificação, o método multinível foi analisado no escoamento de expansão brusca, jatos de impacto e sobre uma esfera.
- Capítulo 6 - Conclusões e perspectivas: Estão descritas as conclusões do presente estudo e as perspectivas para novos estudos dentro da plataforma MFSim.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Para diversas aplicações industriais o fenômeno da corrosão é descrito como um processo que depende diretamente da dissolução e difusão de espécies químicas em uma região próxima a uma superfície metálica. Os fatores que influenciam a corrosão em sistemas fluidodinâmicos são diversos e a análise de cada um deles é importante para controle da taxa de corrosão. O escoamento turbulento é avaliado em diversos estudos por meio de técnicas numérico-computacionais e de experimentação material. Na análise numérico-computacional, as taxas de corrosão podem ser calculadas em escoamentos complexos e, posteriormente, a metodologia pode ser aplicada na análise de alterações de parâmetros do sistema para obter uma configuração com menor taxa de desgaste. Neste capítulo foram detalhados quais parâmetros são utilizados para controle da corrosão em sistemas fluidodinâmicos. Em seguida, foi realizada uma revisão sobre estudos os quais foram analisadas as influências do escoamento na corrosão por meio de modelagem numérico-computacional. Por último, métodos multiníveis aplicados em problemas de transferência de massa foram revisados.

2.1 Corrosão induzida pelo escoamento

O fenômeno de degradação de superfícies metálicas tanto em sistemas estagnantes ou com escoamento atuante tem como característica a formação de uma camada de óxido, que atua na proteção da superfície metálica. O aumento da taxa de corrosão pode ser correlacionado a formação dessa camada de óxido, que é afetada por: propriedades químicas do meio fluido e do material metálico, temperatura e a dinâmica do escoamento. A corrosão acelerada pelo

escoamento (FAC) e a erosão-corrosão (EC) são processos de degradação de superfícies influenciados pelo escoamento. No processo de EC a corrosão é causada pela remoção do filme óxido metálico de forma mecânica. A remoção do filme induz à exposição e formação de uma nova camada de óxido, que consomem o metal base. Este fenômeno é observado em escoamentos bifásicos líquido/vapor e em escoamentos com presença de partículas sólidas em água. Para a FAC, a corrosão é causada apenas por efeitos químicos e de transferência de massa (ROBINSON; DREWS,).

Segundo Betova, Bojinov e Saario (2010), o processo de FAC consiste na produção de ferro solúvel na interface óxido/fluido e no transporte difusivo-advectivo das espécies da corrosão presentes nesta interface para o escoamento. O processo de corrosão tem como fatores limitantes a dissolução e difusão das espécies químicas presentes no filme protetor. Em escoamentos turbulentos de expansão brusca, jatos de impacto e escoamento em tubulações com curvas, existem regiões específicas onde predomina as maiores taxas de difusão. Em razão do aumento da taxa de difusão, áreas específicas de tubulações ficarão mais expostas e suscetíveis à corrosão (TREVIN, 2012).

O mecanismo da corrosão induzida pelo escoamento é descrito por Kain (2014) e Dooley (2008) e está ilustrado na Fig. 2.1. A primeira etapa no processo corrosivo refere-se à formação do filme de óxido na superfície metálica. Após a formação deste filme, o óxido se dissolve na água para a formação de Fe^{+2} . A taxa de ferro removida da superfície pode ser determinada pela taxa de difusão das espécies de ferro presentes na região de camada limite.

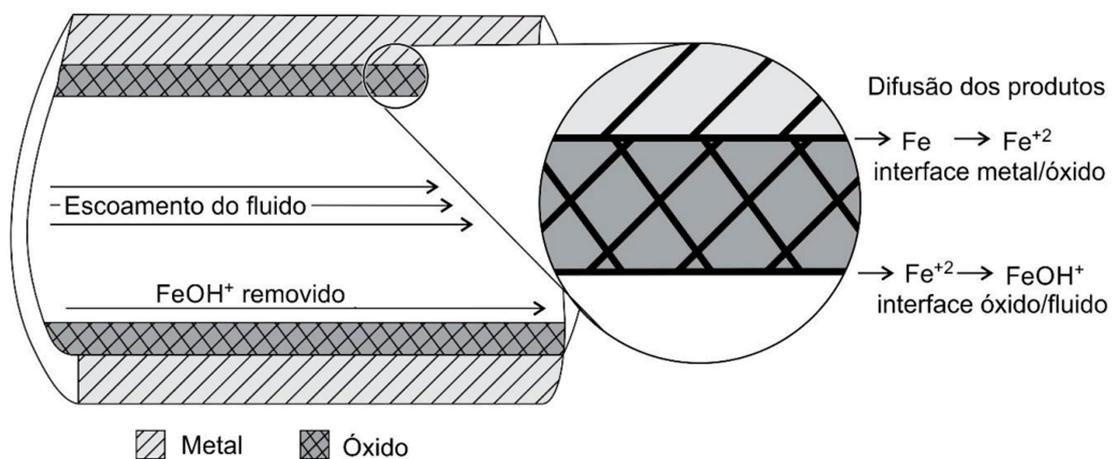
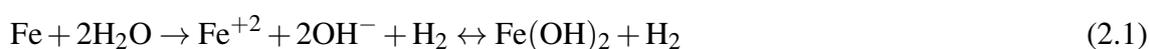


Figura 2.1: Representação esquemática do mecanismo de corrosão no aço. Fonte: Adaptado de Silverio (2019).

Na Fig. 2.1, FeOH^+ representa a espécie de Fe^{+2} hidrolisada em solução aquosa. Considerando o processo de transporte do ferro para a solução aquosa, observa-se uma relação direta da difusividade com a concentração das espécies de ferro solúveis no filme de óxido. Além disso, no fenômeno da corrosão é observada uma relação inversa entre a espessura da camada protetora do fenômeno de transferência de massa e a taxa de corrosão.

As reações que descrevem a primeira etapa da corrosão tem como característica a formação de hidróxido ferroso que é convertido em magnetita:



A dinâmica de formação da camada protetora de magnetita (Fe_3O_4) em meio não aerado é regulada pela formação de hidrogênio catódico e pela dissolução dos íons de ferro:



O mecanismo de remoção da camada de magnetita em escoamentos turbulentos está detalhada na Fig. 2.2. Por meio da Fig. 2.2, Dooley (2008) buscou representar como escoamentos turbulentos afetam o processo corrosivo.

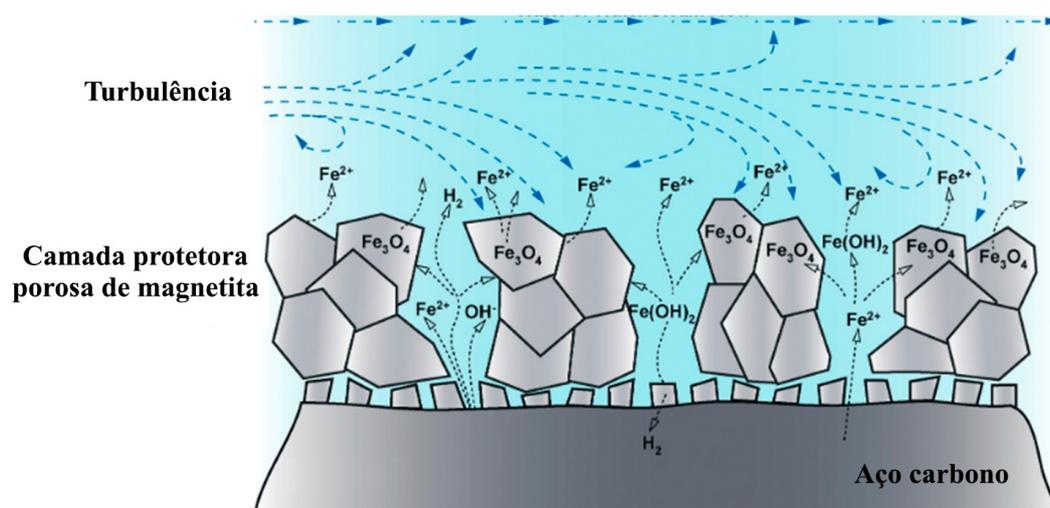


Figura 2.2: Representação esquemática do mecanismo da FAC na camada protetora. Fonte: Adaptado de Dooley (2008).

As reações químicas na interface fluido/metal apresentam características diferentes conforme alteram-se condições químicas da água como o pH. Com a mudança das condições químicas do fluido, o meio pode ser caracterizado como aerado. Em meios aerados diferentes reações ocorrem na interface fluido/metal. As reações das Eqs. 2.5 e 2.6 são referentes a um fenômeno da corrosão controlado pelo oxigênio em meio aerado.



Além da influência negativa do escoamento na corrosão, os fatores que influenciam na taxa de corrosão são: condições químicas da água (pH e concentração de oxigênio), temperatura, material da tubulação. Cada um dos fatores mencionados estão discutidos de forma detalhada nas próximas subseções.

2.1.1 Condições químicas da água

Variações de perda de massa em sistemas fluidodinâmicos corrosivos são observadas com a variação de pH (OH et al., 2022; REMY; BOUCHACOURT, 1992; TREVIN, 2012). Estudos experimentais mostram que o aumento do valor do pH induz a redução da taxa de corrosão. No fenômeno da corrosão as reações químicas presentes na interface fluido/metal podem ser previstas com o diagrama de Pourbaix, detalhado na Fig. 2.3.

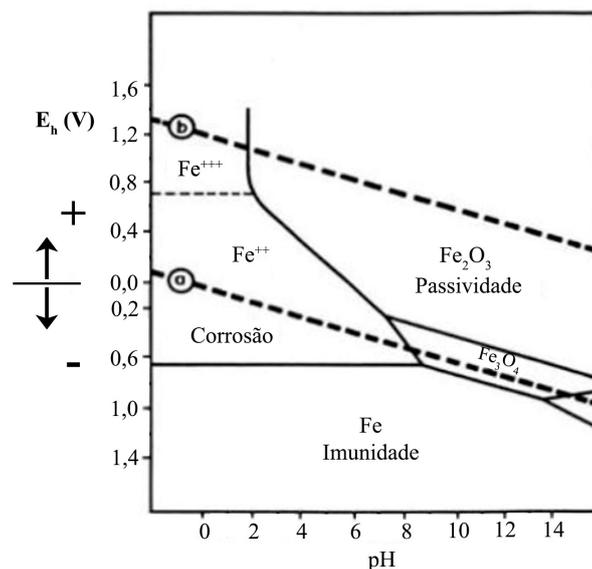


Figura 2.3: Diagrama de Pourbaix. Fonte: Gentil (2011).

No diagrama de Pourbaix o potencial e o pH da solução permitem determinar sob quais condições podem ocorrer: a corrosão, a imunidade ou a passividade. É importante ressaltar que a temperatura e a concentração de íons de ferro no equilíbrio afetam as zonas apontadas. No diagrama da Fig. 2.3 as zonas respectivas ao fenômeno da corrosão são referentes a sistemas com temperatura de 25°C.

Na Fig. 2.3 podem ser verificadas as zonas de imunidade e passividade, que levam a redução da taxa de corrosão. Em outras palavras, para valores de pH maiores que 9,0 e uma determinada faixa de potencial, a taxa de desgaste pode ser controlada. Esta característica é observada nos estudos de Oh et al. (2022) e Cramer e Covino (2003).

Os testes experimentais realizados por Oh et al. (2022) mostram que o aumento de pH de 7,0 para 9,5 induziu a redução da taxa de perda de corrosão de 0,68 mm/ano para 0,07 mm/ano, considerando um sistema com as mesmas condições de temperatura e velocidade do escoamento. A redução da taxa de corrosão mostrada por Cramer e Covino (2003) pode ser observada na Fig. 2.4. Considerando os dados de Cramer e Covino (2003), observa-se uma redução significativa da perda de massa para valores de pH maiores que 9,0 em três aplicações específicas com presença de FAC.

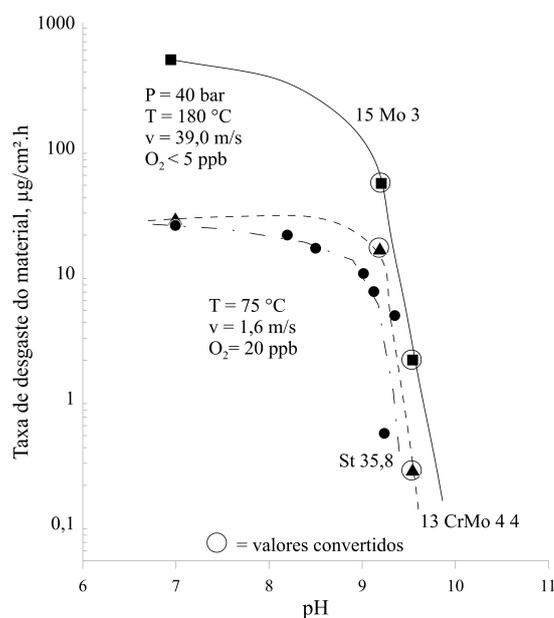


Figura 2.4: Influência do pH no fenômeno da corrosão. Fonte: Adaptado de Cramer e Covino (2003).

Outro fator associado à composição química da solução aquosa na corrosão é a concentração de oxigênio. O aumento da concentração de oxigênio indica a redução da taxa de degradação. A variação da taxa da corrosão com a variação de concentração de oxigênio pode ser observada

na Fig. 2.5. Uma redução expressiva da taxa de desgaste em soluções neutras são observadas em sistemas fluidodinâmicos com teores de oxigênio maiores que 200 ppb (parte por bilhão).

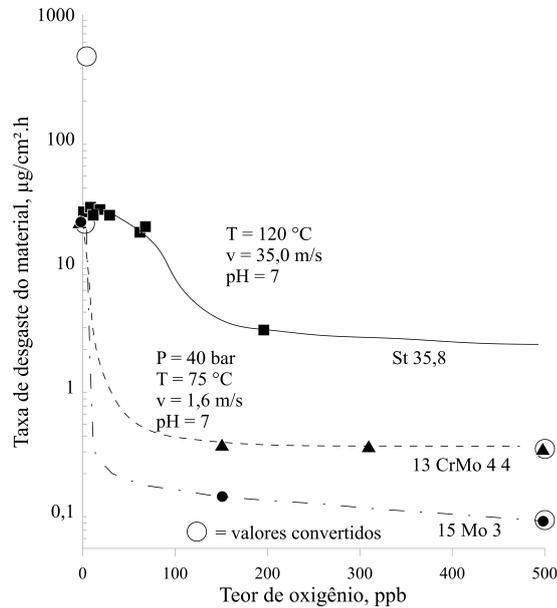


Figura 2.5: Influência da concentração de oxigênio no fenômeno da corrosão. Fonte: Adaptado de Cramer e Covino (2003).

Considerando o diagrama de Pourbaix, em uma solução de pH neutro a superfície metálica pode estar sujeita a um processo de imunidade, corrosão ou passividade. No processo de passividade ocorre a formação de Fe_2O_3 que depende da presença de oxigênio. Apesar de provocar a diminuição da perda de massa na prevenção da FAC, o aumento da concentração de oxigênio pode induzir outros mecanismos de desgaste, como a corrosão por *pitting*. Em razão dessa característica, não existem padrões definidos na literatura que indiquem a concentração ideal de oxigênio para prevenção da corrosão (LINCK, 2019).

2.1.2 Temperatura

A temperatura afeta parâmetros associados a solubilidade dos íons de ferro e o processo de transferência de massa. Como a solubilidade, difusividade e viscosidade apresentam comportamentos contrários com a mudança de temperatura no processo corrosivo, a variação de perda de massa é não linear com o aumento da temperatura. A variação das taxas de corrosão conforme a temperatura podem ser observadas na Fig. 2.6.

Por meio dos perfis de taxa de corrosão da Fig. 2.6 observa-se a ocorrência de FAC para a faixa de temperatura de 100 a 250 °C. É importante ressaltar que a faixa de temperatura varia conforme o tipo do escoamento. Em escoamentos monofásicos e bifásicos a temperatura

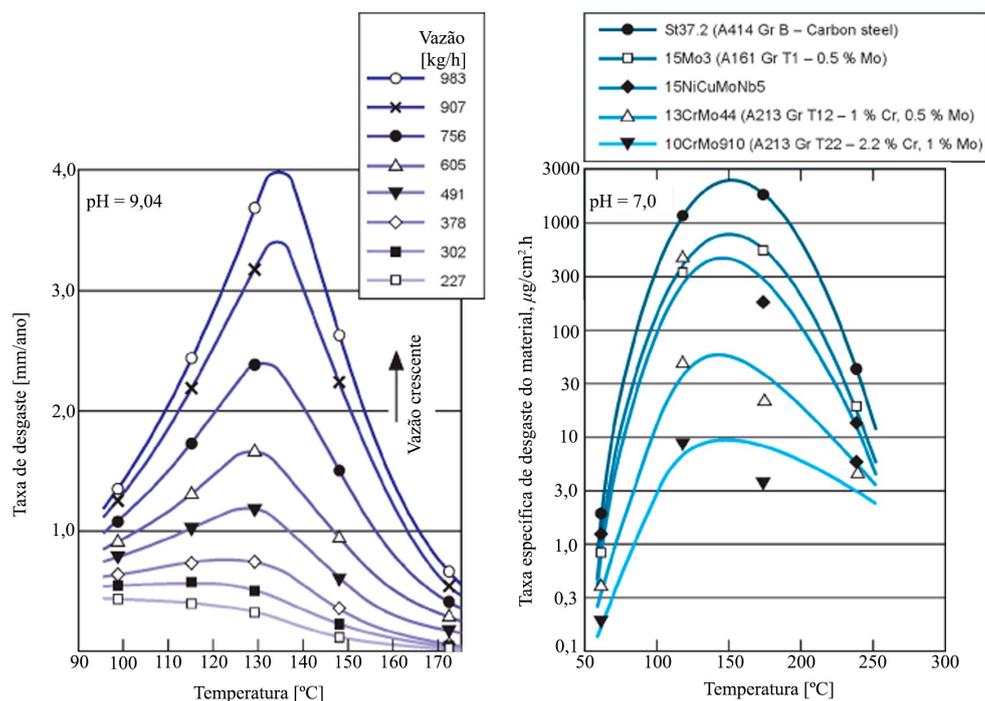


Figura 2.6: Dependência da temperatura em escoamentos monofásicos com presença de FAC sob diferentes condições fluidodinâmicas e condições químicas. Fonte: Dooley (2008).

apresenta maiores taxas de perda nas faixas de 129 a 149 °C e 149 a 199 °C, respectivamente (PORT, 1998).

2.1.3 Material

No fenômeno da corrosão induzida pelo escoamento, a análise do material utilizado é essencial para redução de taxas de desgaste em aplicações industriais. O aço carbono, que é utilizado em diversas aplicações industriais, tem nas suas composições concentrações limitadas de silício, enxofre, cobre, fósforo e manganês (CHIAVERINI, 1986). Devida à ocorrência de FAC em sistemas industriais com aço carbono, estudos mostram como a adição de outros elementos de liga têm efeitos importantes no controle das taxas de corrosão (ROBINSON; DREWS, ; REMY; BOUCHACOURT, 1992). Os elementos de liga que são usualmente aplicados são o molibidênio, cromo e cobre.

Por meio das Figs. 2.4, 2.5 e 2.6 pode ser verificada a redução da taxa de desgaste quando a liga do metal base apresenta cromo e molibidênio. É importante ressaltar que a introdução desses elementos levam à formação de novos produtos na camada de óxido e contribuem para a redução de desgaste nas aplicações industriais (BETOVA; BOJINOV; SAARIO, 2010). Segundo Kain (2014) na adição de cromo à liga metálica, a camada de óxido é constituída por $FeCr_2O_4$ e as

taxas de perda reduzem para 10% considerando um aumento de cromo de 0,03% para 0,5%.

2.1.4 Escoamento turbulento

A presença de um escoamento turbulento em problemas com FAC resulta na renovação da solução na região de formação da camada protetora, que induz uma maior capacidade de solubilizar os íons de ferro e, conseqüentemente, aumento da taxa de degradação da superfície metálica. Em razão da geometria das tubulações, a redução de espessura da parede da superfície metálica pode ser intensificada em uma região específica (PIETRALIK, 2012).

Dentre as geometrias que promovem a corrosão em uma área específica estão: válvulas, placas de orifícios, redutores de pressão, áreas com descontinuidades nas tubulações e regiões com curvas que provocam mudanças na direção do escoamento (ALLOY; PLANTS, 2014). Segundo Mazhar (2013) estão associadas à taxa de desgaste: velocidade do escoamento, tensões cisalhantes na proximidade da parede e intensidade da turbulência.

O fenômeno de transferência de massa é representado pelo adimensional Sherwood number (Sh) que pode ser obtido em função do número de Reynolds (Re) e do número Schmidt (Sc). A relação entre os adimensionais é obtida experimentalmente usando métodos eletroquímicos para o cálculo da transferência de massa em diferentes geometrias. Na Tab. 2.1 estão detalhadas as correlações de Sh para diferentes escoamentos.

Tabela 2.1: Correlações de Sh para diferentes tipos de escoamento. Fonte: Mazhar (2013).

Escoamento	Correlação	Referência
Cilindro de rotação	$Sh = 0,079Re^{0,7}Sc^{0,356}$	Eisenberg, Tobias e Wilke (1954)
Jato de impacto	$Sh_{est} = 1,12Re^{0,5}Sc^{0,33}(H/d_{ji})^{0,51}$	Tsang (1978)
	$Sh_{CL} = 0,65Re^{0,84}(x/d_{ji})^{-1,2}$	Giralt e Trass ()
	$Sh = 0,043Re^{0,84}Sc^{1,08}(d_{ji}/H)^{0,33}$	Intensification... (2007)
	$Sh = 0,306Re^{0,84}Sc^{0,997}(d_{ji}/H)^{0,337}$	Intensification... (2010)
	$Sh = 0,579Re^{0,84}Sc^{0,975}(H/d_{ji})^{0,049}$	Helal et al. (2018)
Tubulação reta	$Sh_{lisa} = 0,0165Re^{0,86}Sc^{0,33}$	Berger e Hau (1977)
	$Sh_{lisa} = 0,026Re^{0,82}Sc^{0,33}$	Poulson e Robinson (1986)
	$Sh_{rug} = 0,02Re^{0,9}Sc^{0,33}$	Wilkin, Oates e Coney (1983)
Tubulação com curva	$Sh_{max} = 0,018Re^{0,84}Sc^{0,40}$	Achenback (1976)
	$Sh_{médio} = 0,00923Re^{0,925}Sc^{0,33}$	Wilkin, Oates e Coney (1983)

Para escoamentos de cilindros de rotação a correlação definida por Eisenberg, Tobias e Wilke (1954) foi obtida por meio de experimentos que buscaram avaliar diferentes condições de corrosão com a variação da concentração de espécies, diâmetro e espessura da abertura anular. Nesse estudo observam-se mudanças no coeficiente de transferência de massa para faixas Sc e Re de 836 a 11.490 e 112 a 241.000, respectivamente. A combinação de todos os coeficientes de transferência de massa produziram um desvio médio de 8,3% considerando a variação do número de Reynolds. Eisenberg, Tobias e Wilke (1954) consideraram o diâmetro do cilindro como comprimento característico para determinar os valores de Re e Sh de cada experimento.

Em escoamentos de jatos de impacto as correlações de Tsang (1978) e Giralt e Trass () podem ser utilizadas para avaliação do fenômeno de transferência de massa. As correlações de Sh podem ser calculadas nas zonas de estagnação e de desenvolvimento da camada limite. Uma representação esquemática de um jato de impacto está detalhada na Fig. 2.7.

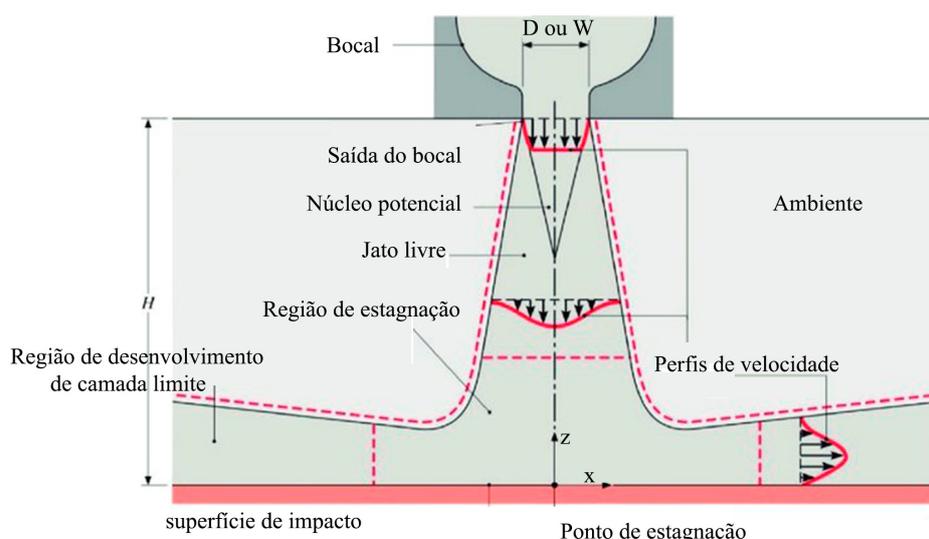


Figura 2.7: Representação esquemática de um jato de impacto. Fonte: Adaptado de Helal et al. (2018).

Os efeitos de corrosão apresentam maior intensidade em uma região próxima ao ponto de estagnação do jato, próxima à linha central do bocal de entrada na superfície de impacto. Nesta região, observa-se maior intensidade da turbulência e também maiores tensões de cisalhamento (NADA,). Um esquema representativo de um jato de impacto e campos de velocidade obtidos no estudo de nada () podem ser observadas na Fig. 2.8.

Na Tab. 2.1, as correlações de transferência de massa para escoamentos de tubulação reta podem ser observadas. Nota-se que diferentes condições de rugosidade foram avaliadas nos

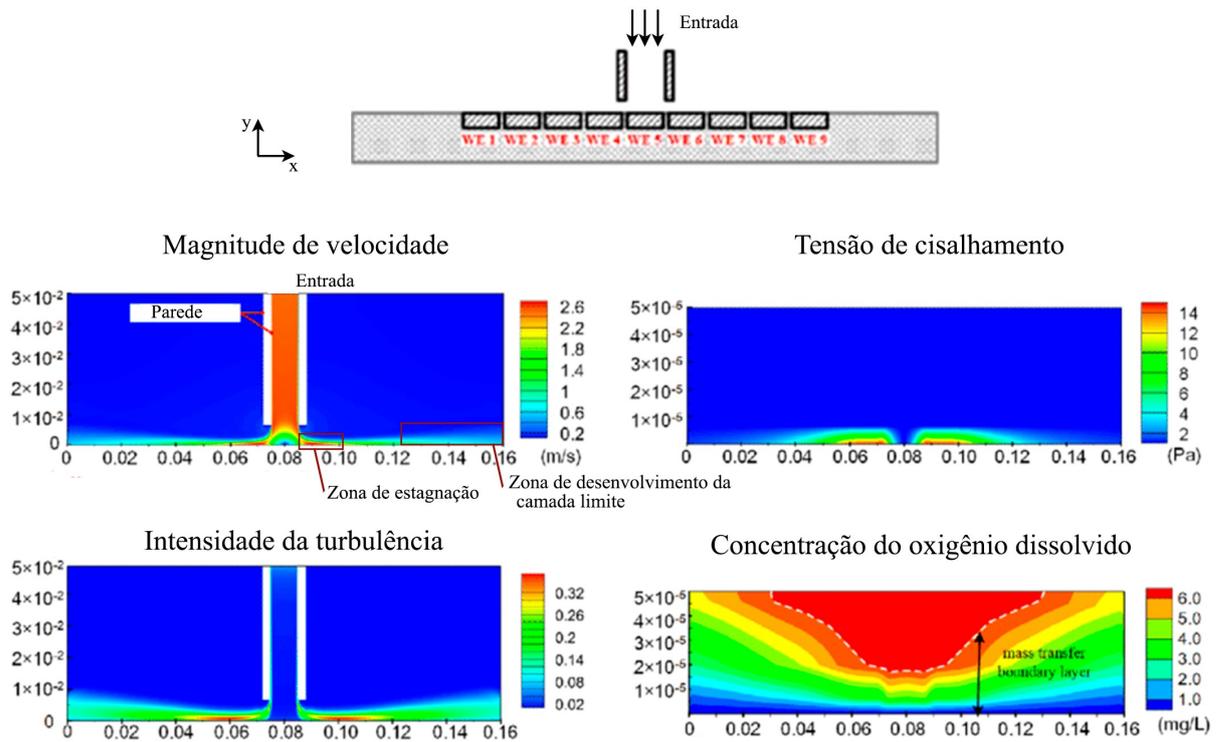


Figura 2.8: Isosuperfícies de propriedades do escoamento e da concentração de oxigênio em um sistema fluidodinâmico com corrosão. Fonte: Adaptado de nada ().

estudos de Berger e Hau (1977), Poulson e Robinson (1986), Wilkin, Oates e Coney (1983), Postlethwaite e Lotz (1988). A definição dos padrões de rugosidade da superfície metálica é importante, pois ela influencia consideravelmente a taxa de desgaste do metal. Segundo Postlethwaite e Lotz (1988), um sistema fluidodinâmico corrosivo totalmente rugoso apresenta taxas de transferência de massa de 2 até 4 vezes maior do que em superfícies lisas.

As mesmas características de rugosidade na corrosão também são avaliadas em tubulações com curvas. O processo de transferência de massa é afetado por: relação raio de curvatura e diâmetro da tubulação (r/D), ângulo de curvatura, número de Reynolds e o número de Schmidt. O estudo de Wilkin, Oates e Coney (1983) considera sistemas fluidodinâmicos com raios de curvatura longos e Achenback (1976) considerou tubulações com raio de curvatura pequeno. A variação da taxa de corrosão com o gradiente de propriedades do escoamento foi avaliada por Madasamy et al. (2021a) em uma tubulação com curva de 58° e um alongamento de 4 vezes o diâmetro. As isosuperfícies de velocidade, tensão de cisalhamento e de taxa de corrosão podem ser observados na Fig. 2.9.

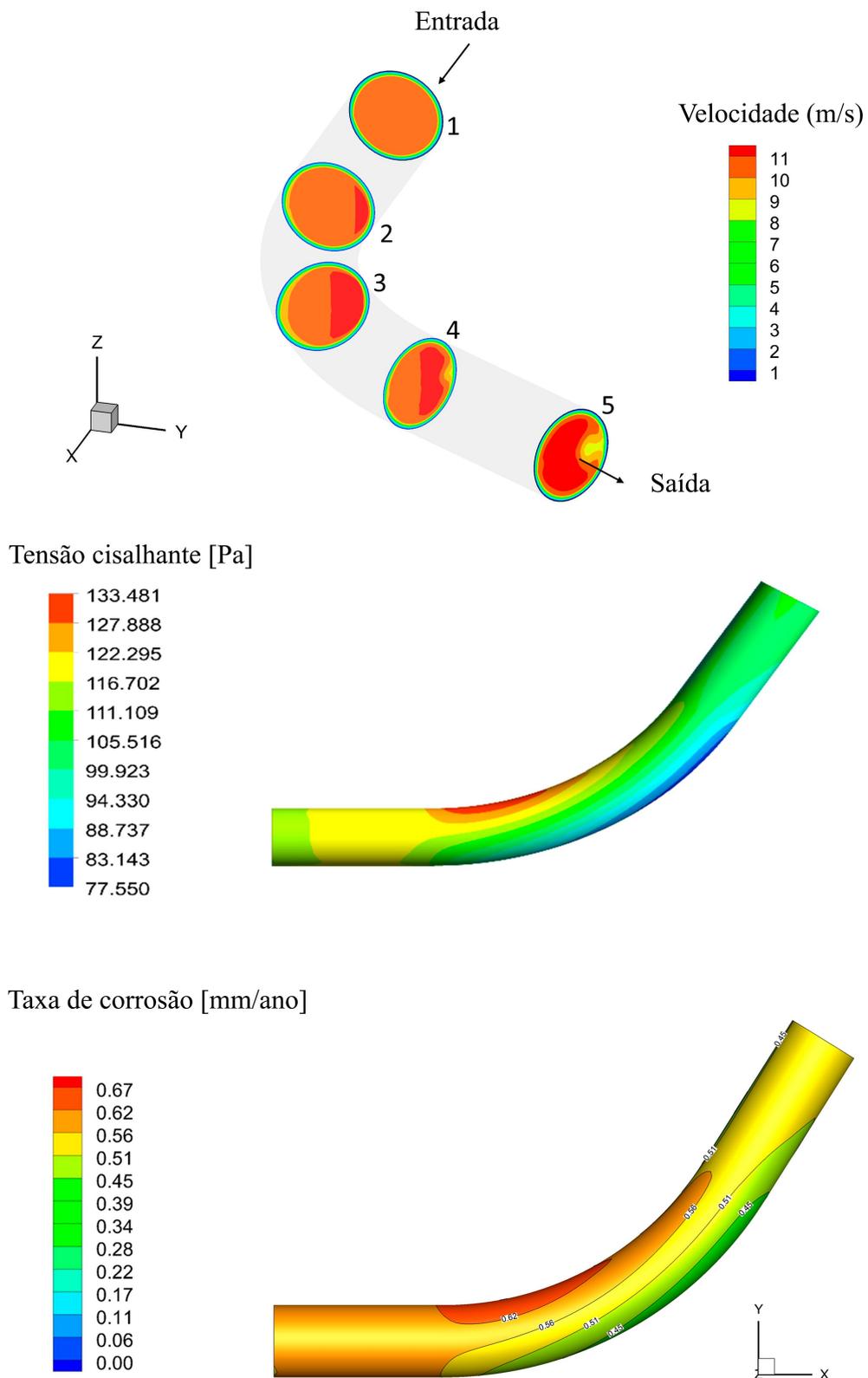


Figura 2.9: Isosuperfícies de propriedades do escoamento e taxa de corrosão em um sistema fluidodinâmico com corrosão. Fonte: Adaptado de Madasamy et al. (2021a).

Assim como observado em escoamentos de jatos de impacto, Madasamy et al. (2021a) mostra que as maiores taxas de corrosão estão presentes nas regiões de maior tensões cisalhantes. É importante ressaltar que a taxa de corrosão foi estimada a partir da correlação de Chilton-Colburn e apresentou um desvio de 15% considerando resultados experimentais. A correlação de Chilton-Colburn também é frequentemente aplicada em estudos de transferência térmica. A analogia pode ser aplicada em ambos os fenômenos devido à similaridade entre eles, sendo que os dois são representados pelo transporte advectivo-difusivo de um escalar. Apesar disso, o uso da correlação deve ser limitado para determinadas condições do fenômeno da corrosão em sistemas fluidodinâmicos. A corrosão pode gerar mudanças na morfologia de superfícies e provocar alterações no fenômeno de transferência de massa considerando um longo período de análise. Outro ponto negativo apresentado no uso da analogia Chilton-Colburn é a diferença da camada limite dos fenômenos da corrosão e de transferência térmica. Enquanto o número de Prandtl (Pr) para fenômenos de transferência térmica é menor que 10, o número de Schmidt típico em escoamentos com corrosão apresentam-se na faixa de 100 até 3000 (MAZHAR, 2013).

2.2 Modelagem numérico-computacional da corrosão induzida pelo escoamento

Para problemas em que o fenômeno de corrosão é influenciado pelo escoamento, Poulson (1993) define parâmetros hidrodinâmicos que possuem um papel importante no controle das taxas de corrosão, sendo eles: velocidade, tensão de cisalhamento na parede, intensidade da turbulência e o coeficiente de transferência de massa. A análise desses parâmetros é recorrente em estudos para mitigar a taxa de degradação em sistemas fluidodinâmicos. A modelagem numérico-computacional apresenta-se como uma alternativa para determinar regiões com maiores taxas de degradação e permite quantificar com acurácia as taxas da corrosão para diversas aplicações em que a corrosão é influenciada pelo escoamento.

Em aplicações industriais, o escoamento turbulento é predominante nos sistemas fluidodinâmicos corrosivos. Em problemas de mecânica dos fluidos, a turbulência é utilizada para descrever escoamentos que possuem flutuações no campo de propriedades do escoamento e são dependentes do tempo e da posição no espaço. A turbulência também é caracterizada pela multiplicidade de estruturas turbilhonares, sendo que o aumento da largura da banda de estruturas a serem calculadas é associado à maior turbulência no escoamento, ou seja, ao aumento do número de Reynolds.

O estudo de escoamentos turbulentos pode ser realizado por meio das equações de balanço de massa, movimento linear e balanço de um escalar passivo. Entretanto, estas equações são utilizadas no estudo de escoamentos simples, laminares e para fenômenos com baixos números de Reynolds. Para escoamentos turbulentos não é possível obter uma solução analítica do problema devido às não linearidades destas equações. Assim, métodos numérico-computacionais como o DNS (Direct Numerical Simulation) podem ser aplicados. Com o método DNS é possível calcular todas as estruturas da turbulência. Entretanto, dependendo do escoamento, a solução se torna inviável em razão dos recursos computacionais exigidos para calcular as pequenas estruturas da turbulência. Uma forma encontrada para resolver problemas turbulentos foi através da proposta de Boussinesq, que elaborou o conceito de viscosidade turbulenta. Este parâmetro é utilizado para representação da tensão no escoamento considerando um modelo similar ao que é utilizado para modelagem da tensão viscosa molecular.

Uma classe de modelagem aplicada na modelagem numérico-computacional de escoamentos turbulentos que utiliza o conceito de viscosidade turbulenta é a Simulação de Grandes Estruturas, do inglês Large Eddy Simulation (LES). Por meio dessa metodologia as grandes estruturas são calculadas e as pequenas estruturas da turbulência são modeladas. Neste método a banda de pequenas estruturas podem apresentar comprimentos característicos menores do que o comprimento de malha. Em comparação à modelagem realizada com DNS, os custos computacionais com LES são menores. Além disso, mesmo aplicando malhas grossas, as simulações realizadas com LES permitem obter o comportamento transiente do escoamento ao longo do meio fluido.

Outros modelos surgiram a partir do conceito de média temporal das equações de balanço, que foi proposto em 1895 por Boussinesq-Reynolds. Esta classe de modelos é denominada equações de Navier-Stokes médias, do inglês Reynolds-averaged Navier-Stokes equations (RANS). A partir dessas equações o comportamento médio de um escoamento turbulento é modelado. Nos modelos de classe RANS, equações diferenciais de balanço de propriedades da turbulência permitem o cálculo da viscosidade turbulenta. Uma das características desse modelo é que as equações são calibradas empiricamente, com base em um escoamento particular. Assim, modelos RANS podem não ser aplicáveis em qualquer tipo de escoamento. Por exemplo, em um modelo da classe RANS o escoamento turbulento em escoamentos cisalhantes livres podem ser calculados com acurácia. Entretanto, este modelo pode não apresentar solução precisa para problemas que envolvem uma camada limite formada em superfícies sólidas.

Quando considera-se a derivada temporal das equações aplicadas no método RANS, a metodologia *Unsteady Reynolds Navier – Stokes* (URANS) é obtida. Com isso, um comportamento transiente com flutuações que apresentam uma tendência ao escoamento médio podem ser capturadas. Porém, observa-se que os modelos URANS são formulados e calibrados a partir de escoamentos estáveis, próximos à condição de equilíbrio. Com a introdução da derivada temporal, estes modelos possibilitam calcular um regime de escoamento instável, onde o espectro é parcialmente resolvido e parcialmente modelado. Como os modelos RANS foram definidos para calcular, estatisticamente, todo o espectro turbulento, a combinação entre as partes modeladas e resolvidas do espectro podem resultar em uma representação deficiente do fenômeno em modelos URANS.

Dentre modelos de fechamento da turbulência aplicados para o estudo da corrosão em sistemas fluidodinâmicos podem ser mencionados: $k - \omega$ SST, LRN $k - \epsilon$, RNG $k - \epsilon$, e $k - \epsilon$ padrão com funções de parede. Os modelos de fechamento URANS mencionados consideram a resolução de duas equações de balanço adicionais para modelagem de fechamento da turbulência. Além disso, os modelos permitem determinar diretamente o campo médio de propriedades referentes à fluidodinâmica e corrosão. A escolha do melhor modelo de fechamento para modelagem da corrosão em sistemas fluidodinâmicos depende: do tipo de aplicação e da acurácia do modelo no cálculo do escoamento na região da subcamada viscosa na região de camada limite. A modelagem do escoamento na região de camada limite é necessária para modelar corretamente os efeitos da difusividade de espécies químicas da corrosão na região parietal.

É importante ressaltar que alguns estudos consideram apenas a modelagem computacional da fluidodinâmica para realizar uma avaliação qualitativa da corrosão. Estes estudos têm como objetivo calcular os parâmetros de velocidade, tensão de cisalhamento na parede e intensidade da turbulência no escoamento e determinar quais locais estão suscetíveis a uma maior taxa de desgaste. A associação de parâmetros do escoamento com a corrosão foi estudada por Si et al. (2018), El-Gammal et al. (2010) e Ajmal, Arya e Udupa (2019) em cotovelos de 90° através de experimentos materiais e simulação computacional sem considerar equações de balanço do escalar para modelagem do processo advectivo-difusivo de espécies químicas da corrosão.

Si et al. (2018) estudaram um escoamento com $Re = 73.684$ e uma tubulação de aço carbono. Para a modelagem da turbulência foi aplicado o modelo RNG $k - \epsilon$ com a função de parede padrão. Por meio da modelagem da turbulência foram calculadas a velocidade, pressão,

tensão de cisalhamento e energia cinética turbulenta. O campo médio das propriedades obtidas através da modelagem numérico-computacional pode ser observada na Fig. 2.10. Por meio da simulação computacional, Si et al. (2018) observaram que o perfil do componente radial de velocidade permite determinar locais onde haverá maior ou menor perda de material pelo processo corrosivo. As regiões que resultaram em maior taxa de degradação foi na superfície externa da curva. Além disso, as regiões com maior taxa de desgaste foram associadas à maior magnitude da energia cinética turbulenta. Esse mesmo padrão foi observado no estudo de HWANG, JIN e KIM (2009).

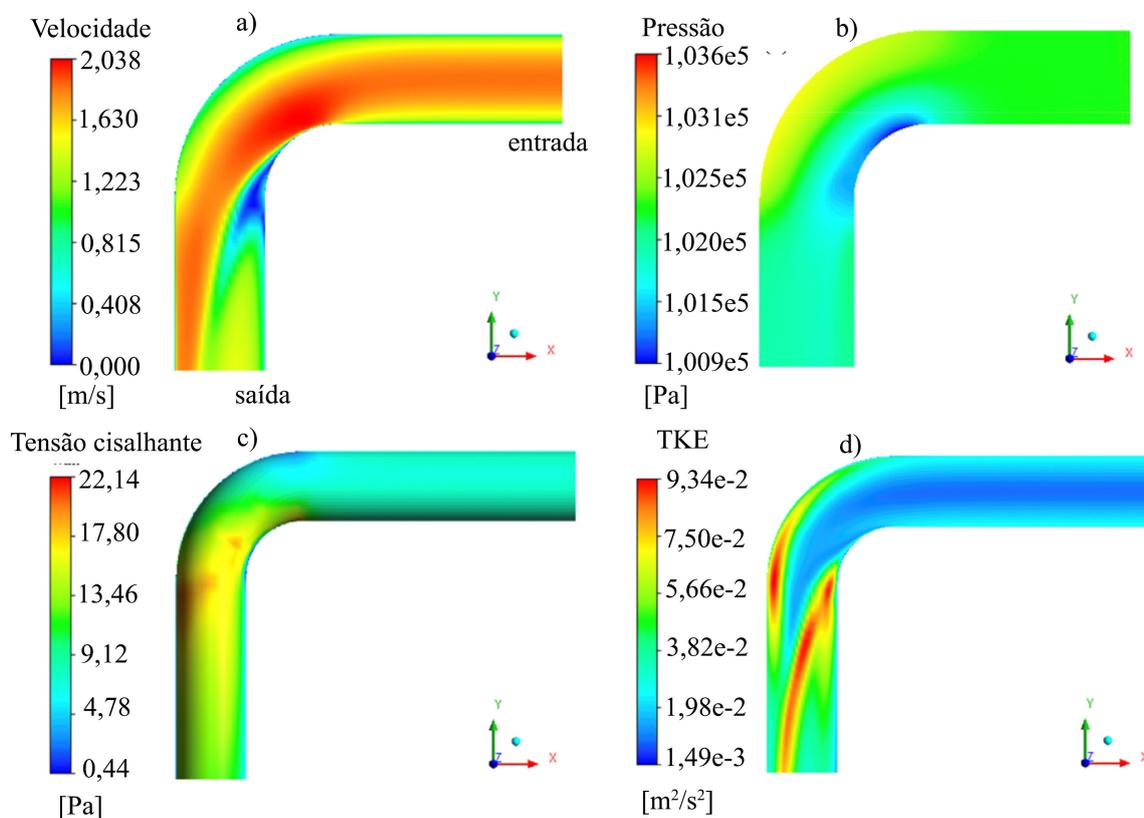


Figura 2.10: Resultados da simulação em um cotovelo de 90° com $Re = 73.684$, isosuperfícies de: a) velocidade b) pressão c) tensão cisalhante d) Energia cinética turbulenta. Fonte: Adaptado de Si et al. (2018).

Os efeitos fluidodinâmicos na corrosão também foram avaliados por El-Gammal et al. (2010) considerando um escoamento com $Re = 40.000$ e uma tubulação de hidrocal. El-Gammal et al. (2010) utilizaram o modelo de fechamento RSM com funções de parede padrão. Os autores associaram a taxa de corrosão considerando a energia cinética turbulenta e tensões cisalhantes no escoamento nas regiões de raio interno e externo do cotovelo de 90°. As isosuperfícies

das propriedades fluidodinâmicas podem ser observados na Fig. 2.11. Por meio do método experimental e da simulação El-Gammal et al. (2010) observaram que os padrões de desgaste da tubulação foram mais intensos na superfície interna da curva e coincidiram com a região de maior intensidade de energia cinética turbulenta normalizada.

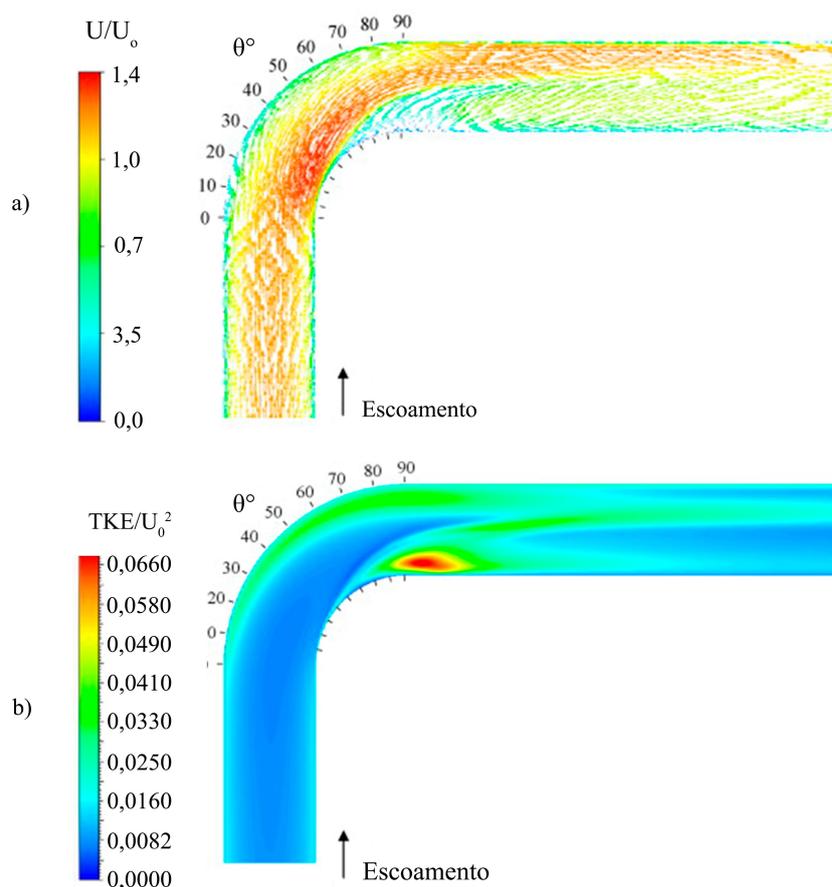


Figura 2.11: Resultados da simulação em um cotovelo de 90° com $Re = 40.000$ considerando a seção média da tubulação: a) Vetores de velocidade b) Isosuperfície de energia cinética turbulenta normalizada. Fonte: Adaptado de El-Gammal et al. (2010).

No estudo realizado por Ajmal, Arya e Udupa (2019), a corrosão acelerada pelo escoamento foi estudada por meio de experimentação numérica e material para um escoamento com $Re = 180.451$ em uma tubulação de aço. O modelo de fechamento da turbulência aplicado nas simulações foi o $k - \epsilon$ padrão. Ajmal, Arya e Udupa (2019) concluíram que a taxa de corrosão está associada a elevadas tensões de cisalhamento e velocidades do escoamento na superfície de raio interno do cotovelo de 90° .

Observa-se por meio desses estudos que diferentes locais de corrosão máxima foram obtidos nos estudos de escoamentos em cotovelos de 90° . Esse comportamento pode ser explicado pelas

diferentes relações entre o diâmetro interno da tubulação e o raio de curvatura do cotovelo nos estudos, que alteram a dinâmica do escoamento na região da curva. A abordagem numérico-computacional nestes estudos foi essencial para determinar quais variáveis da fluidodinâmica podem ser utilizadas para estimar as regiões de maior desgaste.

Um método verificado para estimar a taxa de corrosão sem a modelagem do fenômeno de transferência de massa da corrosão baseia-se na aplicação de correlações empíricas. Essa estratégia foi aplicada por Madasamy et al. (2021a), que analisou um escoamento com tubulação em curva com $Re = 3,4 \times 10^8$ e $Sc = 13,34$. O escoamento foi modelado por meio do modelo $k - \epsilon$ com a função de parede escalável. Por meio da correlação de Chilton-Colburn e resultados de simulações numérico-computacionais foi determinada a taxa de desgaste ao longo da tubulação curva. Os resultados da taxa de corrosão apresentaram desvios menores que 5% considerando resultados de experimentos materiais. Um segundo estudo, foi realizado por Madasamy et al. (2021b). Neste estudo, um escoamento em curva com $Re = 284.000$ e $Sc = 95,7$ foi analisado com o mesmo modelo de fechamento da turbulência. Os desvios obtidos foram de 15% considerando como referência, resultados experimentais. O elevado desvio pode ter sido explicado devido à correlação de Chilton-Colburn ter sido obtida para escoamentos de transferência térmica, que possuem número de Prandtl inferiores a 10.

Mesmo obtendo resultados com elevada acurácia a partir das correlações, a aplicação de métodos numéricos computacionais com a modelagem do transporte advectivo-difusivo das espécies da corrosão é importante em razão da complexidade dos sistemas fluidodinâmicos presentes em aplicações industriais.

Calculation... (1992) estudaram o fenômeno da corrosão em um sistema de expansão abrupta, considerando a aplicação do modelo de fechamento da turbulência LRN (Low Reynolds number) $k - \epsilon$ com a função de amortecimento de Lam e Bremhorst (1981) (LB). Neste estudo avaliou-se escoamentos com números de Reynolds de $2,1 \times 10^4$ até 13×10^4 e números de Schmidt de 1.460. Além disso, os autores consideraram o estudo experimental realizado por Sydberger e Lotz (1982). A partir da modelagem numérica-computacional os autores definiram que para escoamentos com números de $Sc \gg 1$ a espessura da camada limite de concentração do escalar será menor que a espessura da camada limite fluidodinâmica. Assim, Calculation... (1992) observaram a necessidade de adotar parâmetros de parede (y^+) menores do que a unidade, ou seja, abaixo da subcamada viscosa para obtenção de respostas precisas do processo de transferência de massa. Mesmo aplicando um método para variação da constante de Sch-

midt turbulento e a função de amortecimento LB, resultados com menores erros foram obtidos apenas para os escoamentos com números de Reynolds menores que $4,2 \times 10^4$ considerando a região após o ponto de recolamento. Para simulações com número de Reynolds maiores, os valores apresentaram maiores desvios em comparação aos dados experimentais. Por último, o modelo utilizado proporcionou resultados com erros moderados na região anterior ao ponto de recolamento.

No estudo realizado por Wang (1997) observa-se a aplicação das equações de balanço de uma espécie para modelagem da corrosão de um escoamento turbulento em uma tubulação reta. Por meio do modelo de fechamento da turbulência LRN $k - \epsilon$ e da função de amortecimento desenvolvida por Abe, Kondoh e Nagano (1994), uma metodologia foi analisada para avaliação de escoamentos com Re entre 10^4 e 10^5 e Sc de aproximadamente 2000. Os resultados obtidos por meio da modelagem computacional foram satisfatórios para a faixa de Re analisada considerando o perfil do coeficiente de transferência de massa na parede.

Considerando o modelo de fechamento da turbulência LRN $k - \epsilon$, a função de amortecimento desenvolvida por Lam e Bremhorst (1981) (LB) e a equação de balanço dos escalares, Keating (1999) realizou simulações do processo de transferência de massa e da fluidodinâmica para um escoamento de expansão abrupta e um escoamento em um cotovelo de 180° de seção quadrada. As condições simuladas para o problema de expansão abrupta foram $Sc = 1460,0$ e $Re = 1,20 \times 10^4$. Enquanto isso, para o escoamento com cotovelo de 180° considerou-se: $Sc = 520$ (correspondente ao transporte de oxigênio), $Sc = 1460$ (correspondente ao transporte do ferro/ferrocianeto) e $Re = 5,67 \times 10^4$. Quanto aos resultados fluidodinâmicos, o modelo de fechamento proposto proporcionou resultados com elevados desvios quando comparados a dados experimentais. Com relação ao fenômeno de transferência de massa, desvios moderados foram observados em ambas aplicações. Os desvios moderados relacionados à taxa de perda de material se devem aos picos do coeficiente de massa nos dois fenômenos simulados. Esta mesma característica pode ser observada no estudo de Calculation... (1992) para escoamentos com uma ampla faixa de Re .

Xiong, Koshizuka e Sakai (2011) analisaram a transferência de massa a partir dos seguintes modelos: LRN $k - \epsilon$, LRN $k - \omega$ e $k - \omega$ SST. Os autores compararam os resultados obtidos em três situações distintas: para um escoamento totalmente desenvolvido em uma tubulação, em um degrau e em uma tubulação com orifício central. Para as diferentes aplicações o escoamento foi caracterizado por $Sc \approx 1000$. Xiong, Koshizuka e Sakai (2011) definiram que a relação para

modelagem do Sc_t para escoamentos simples e também para escoamentos com recolamento e separação. Outra contribuição no estudo de Xiong, Koshizuka e Sakai (2011) foi quanto à aplicação de funções de amortecimento nos modelos de turbulência. Foram avaliadas as funções de amortecimento propostas por Lam e Bremhorst (1981) (LB), Abe, Kondoh e Nagano (1994) (AKN) e Hwang e Lin (1998) (HL). Assim como nos outros estudos, Xiong, Koshizuka e Sakai (2011) mostraram como a correção das propriedades ε e μ_t em regiões parietais é necessária para estimar precisamente o coeficiente de transferência de massa no processo corrosivo. Dentre os modelos de fechamento da turbulência aplicados, o que proporcionou os melhores resultados levando em consideração o perfil do coeficiente de transferência de massa foi o modelo proposto por Abe, Kondoh e Nagano (1994) (AKN).

Das, Basu e Mintz (2011) fizeram um estudo comparativo de diferentes modelos de fechamento de turbulência por meio da simulação do processo de corrosão acelerada pelo escoamento de tubulações com seções não circulares em regiões curvas de 180° . O escoamento analisado por Das, Basu e Mintz (2011) tem como característica $Sc = 540$. Os modelos de fechamento standard $k - \varepsilon$, standard $k - \omega$, $k - \omega$ SST e modelos anisotrópicos das tensões de Reynolds (RSM) foram avaliados. Das, Basu e Mintz (2011) mostram uma tendência similar no perfil de taxa de corrosão, porém, a magnitude da taxa de corrosão para cada um dos modelos foi significativa. Além disso, os resultados não foram comparados com dados de experimentos materiais.

Lin e Ferng (2014) também estudaram o fenômeno da corrosão em um cotovelo de 90° considerando o $k - \varepsilon$ padrão e o RNG $k - \varepsilon$ com tratamento de parede para a modelagem de turbulência. O escoamento simulado teve como característica: $Re = 9 \times 10^4$ e $Re = 3,9 \times 10^5$, $Sc = 2,53$. Para a modelagem da corrosão foi estabelecido $y^+ \approx 0,4$ até $1,0$. Neste trabalho, parâmetros relacionados ao fenômeno de transferência de massa foram comparados e validados considerando ensaios experimentais de um cotovelo de 90° de uma planta de energia nuclear.

Prasad et al. (2018), por meio de técnicas CFD, analisaram o processo de corrosão em um degrau, em um cotovelo de 58° e em uma placa de orifício. Para a modelagem da turbulência foi considerado o modelo de fechamento $k - \omega$ SST e o escoamento teve como característica $Sc = 43,75$ para o cotovelo de 58° . Para o degrau foi considerado um escoamento com $Sc = 866,3$ e $Re = 3 \times 10^5$, sendo que os modelos de RNG $k - \varepsilon$ e realizable $k - \varepsilon$ foram selecionados para a modelagem de fechamento da turbulência. A partir desses modelos, foram calculadas taxas de corrosão com desvios moderados considerando como referência, resultados obtidos em procedimentos experimentais.

Com base nestes estudos pode-se afirmar que diferentes parâmetros do escoamento podem ser utilizados para determinar locais de corrosão máxima e também calcular as taxa de corrosão locais com acurácia. Considerando modelos de fechamento da turbulência adequados, e uma discretização espacial do domínio que respeita os comprimentos característicos do fenômeno da corrosão, os efeitos difusivos resultantes da turbulência podem ser calculados com maior acurácia. Dentre os modelos que apresentaram maior acurácia na modelagem computacional destes fenômenos estão: $k - \varepsilon$ AKN e o modelo $k - \omega$ SST. O $k - \varepsilon$ AKN é amplamente testado em problemas de expansão abrupta. O modelo $k - \omega$ SST apresenta-se como um modelo que permite uma modelagem mais generalizada, sendo amplamente utilizado na modelagem de problemas como jato de impacto, expansão abrupta e tubulações com curvas.

2.3 Métodos multiníveis

Com base nos estudos sobre o tema da corrosão induzida pelo escoamento, observa-se que o processo de transferência de massa pode ser analisado em grandezas características espaciais e temporais diferentes em relação ao fenômeno fluidodinâmico. Esta característica está associada aos elevados valores de Sc que para essas aplicações se apresenta próximo a 1000. Calculation... (1992) indicaram que a subcamada do processo de transferência de massa controlado pelo processo de difusão molecular pode ser obtido pela relação $\delta_{sca} = \delta_{hid} / Sc^{1/3}$. Para o sistema estudado por Calculation... (1992) a subcamada viscosa apresentava-se na faixa de 150,0 μm enquanto a de transferência de massa era próxima a 5,0 μm .

Um escoamento turbulento em um canal foi avaliado considerando números de Schmidt de 0,1 até 200 por Dong, Lu e Zhuang (2003). Com o objetivo de obter as características relativas ao processo de transferência de massa turbulenta, Dong, Lu e Zhuang (2003) aplicaram o método de simulação de grandes estruturas tanto para a fluidodinâmica quanto para o fluxo de massa nos modelos de fechamento das equações de balanço. Com isso, Dong, Lu e Zhuang (2003) observaram que, para baixos e médios valores de Sc , a flutuação de concentração é elevada em todo o canal. Para altos valores de Sc , elevados gradientes de concentração foram observados em regiões próximas à parede.

Desse modo, no processo de transferência de massa para valores elevados de Sc , é possível observar uma disparidade de grandezas características necessárias para resolução da fluidodinâmica e do transporte de um escalar em regiões parietais. Para escoamentos com elevados

números de Sc , torna-se viável a implementação de metodologias numéricas que possibilitem resolver as equações de balanço do processo fluidodinâmico e da corrosão em malhas distintas para redução do custo computacional.

Desse modo, a metodologia multinível implementada tem como finalidade resolver as equações referentes à corrosão em uma malha mais refinada nas regiões próximas à parede, enquanto as equações da fluidodinâmica são resolvidas em uma malha menos refinada e adequada. Essa metodologia foi implementada nos trabalhos de Kubrak et al. (2013), Ostilla-Monico et al. (2015), Chong, Ding e Xia (2018) e Panda et al. (2019).

No estudo de Panda et al. (2019) foram realizadas simulações com aplicação de uma metodologia multinível para problemas com elevados números de Prandtl. A robustez e acurácia da metodologia multinível está demonstrada pela convecção forçada de transferência de massa sobre partículas esféricas estacionárias sob temperatura fixa. Panda et al. (2019) consideraram na aplicação da metodologia uma malha cartesiana fixa para resolver as equações de Navier-Stokes e da continuidade, enquanto a equação de balanço de um escalar foi resolvida em uma malha adaptativa, que também contribuiu para a redução da memória e recursos computacionais da simulação. Como as equações eram resolvidas em malhas distintas, um método de interpolação que mantém as propriedades do balanço de massa no campo interpolado foi aplicado para obter informações do campo de velocidade na malha utilizada para resolver o transporte dos escalares. Panda et al. (2019) avaliaram o fenômeno considerando baixos e elevados Pr , e por meio do número de Nusselt foi possível determinar uma excelente concordância entre os resultados obtidos e as correlações encontradas na literatura com a aplicação do método multinível.

Chong, Ding e Xia (2018) analisaram a aplicação de métodos multinível considerando problemas em que a difusividade do escalar é menor que a difusividade viscosa. Para estes fenômenos os autores definiram que o menor comprimento característico do fenômeno é aquele de Batchelor (l_b) quando comparada ao comprimento característico de Kolmogorov (l_k), sendo definida por: $l_b = l_k/Sc^{0,5}$. Para simulação do fenômeno os autores consideraram a aplicação de uma metodologia multinível a partir da resolução das equações de balanço em malhas distintas. Além disso, também foi implementado pelos autores um esquema de interpolação para reconstrução do campo de velocidade com divergente nulo da malha grossa para a mais fina. Chong, Ding e Xia (2018) analisaram a metodologia em um escoamento Rayleigh-Bernard convectivo e observaram uma redução computacional considerável sem perda de acurácia. É importante ressaltar que o método foi aplicado para um problema de escalar ativo sendo que o

método também poderia ser utilizado em um fenômeno de escalar passivo.

Kubrak et al. (2013) estudaram o fenômeno de absorção de oxigênio na lâmina de água devido ao escoamento gerado pelo gradiente de temperatura da superfície com a profundidade. Neste estudo foi considerado um escoamento bidimensional e foram aplicados esquemas numéricos de alta ordem para resolver a equação de balanço de um escalar passivo e equações para a fluidodinâmica em diferentes níveis. Para resolver as equações de balanço nas malhas mais finas, Kubrak et al. (2013) utilizaram o método de interpolação de quarta ordem de Lagrange com a finalidade de obter um campo de velocidade nas malhas mais finas. A aplicação da metodologia proporcionou a redução de custos computacionais e a obtenção de características específicas do fenômeno pela aplicação da metodologia *dual meshing*.

Ostilla-Monico et al. (2015) apresentaram a mesma metodologia para estudo dos escoamentos *Rayleigh Bernard* e *Double diffusive advection*. Neste estudo os autores detalham a implementação de um método multinível para resolver as equações de balanço do problema em grandezas características diferentes e, também, detalham o método adotado para projeção do campo fluidodinâmico da malha grossa para a mais fina considerando os métodos de interpolação *tricubic Hermite Spline* e *B-splines*. Para os fenômenos estudados, observou-se que ambos são satisfatórios. Porém, como o segundo resulta em um custo computacional superior, a interpolação *tricubic Hermite* apresentou-se como melhor opção para os fenômenos simulados. Assim como nos outros estudos os autores citam que o método *multiple resolution* torna-se cada vez mais vantajoso quanto maior for o número de Prandtl ou Schmidt. Os ganhos de redução no tempo de simulação proporcionados pela aplicação do método *multiple resolution* foi de aproximadamente 75%.

CAPÍTULO III

MODELO MATEMÁTICO

Neste capítulo a modelagem matemática aplicada no estudo da corrosão induzida pelo escoamento está apresentada. Foram detalhadas as equações de balanço para a quantidade de movimento linear, equação de balanço para o escalar respectiva à corrosão, equação para a modelagem da turbulência e equações para a modelagem da fronteira imersa fluidodinâmica e da corrosão.

3.1 Formulação diferencial para a fluidodinâmica e corrosão

O modelo matemático utilizado para a modelagem da fluidodinâmica baseia-se nas equações de balanço de massa, quantidade de movimento linear (Navier-Stokes). Para um escoamento incompressível e fluido newtoniano, foi considerado:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + f_i, \quad (3.2)$$

Nestas equações, são definidas como propriedade do fluido a massa específica (ρ) e a viscosidade (μ). Além disso, o escoamento tem suas características descritas com o campo de pressão (p), pelos componentes do vetor velocidade (u_i) e pelo campo de forças externas f_i .

No presente estudo, foram analisados fenômenos da corrosão em que o processo de difusão é controlado pelo oxigênio. Desse modo, no estudo da corrosão induzida pelo escoamento foi

considerada a equação de balanço de um escalar passivo. A equação de balanço do escalar respectivo ao fenômeno de transferência de massa é representado por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j c) = \alpha \frac{\partial^2 c}{\partial x_j \partial x_j} + f_{ic}. \quad (3.3)$$

em que c representa o escalar passivo, α representa a difusividade do escalar e f_{ic} é o termo de forçagem utilizado para impor as condições de contorno do escalar na fronteira imersa.

3.2 Formulação para a turbulência

Uma das características dos escoamentos turbulentos é a multiplicidade de dimensões, que podem ser associadas às topologias, dimensões e frequências de estruturas turbilhonares que coexistem no espaço e interagem entre si de forma intensa e altamente não-linear (SILVEIRA-NETO, 2020). Devido ao elevado número de graus de liberdade dos sistemas turbulentos, a prática de DNS se torna inviável em razão do alto custo computacional associado. Desse modo, outras metodologias são aplicadas para determinar características importantes de escoamentos turbulentos.

Nos modelos de fechamento de turbulência aplicados para o estudo do fenômeno da corrosão em sistemas fluidodinâmicos considera-se o conceito de filtragem, em que o espectro de estruturas do escoamento é dividido em duas bandas. O conceito foi proposto por Boussinesq e Reynolds e consistiu na aplicação do operador de média temporal nas Eqs. 3.1 e 3.2. As equações com a introdução da filtragem são representadas por:

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \overline{u_i u_j}}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \bar{f}_i. \quad (3.5)$$

Como as Eqs. 3.5 não têm solução direta em razão da presença do termo não linear $\overline{u_i u_j}$, a decomposição dos campos totais de velocidade é aplicada:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i, \quad (3.6)$$

em que \bar{u}_i representa a média e u'_i representa a flutuação no campo de velocidade. Por meio de

manipulações matemáticas obtém-se:

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \rho \overline{u'_i u'_j} \right] + \bar{f}_i, \quad (3.7)$$

Na Eq. 3.7 o termo $\overline{u'_i u'_j}$ é o tensor de Reynolds. Mesmo com a introdução do conceito de decomposição, o modelo matemático ainda não apresenta solução direta, visto que o número de incógnitas do sistema é maior que o número de equações. São incógnitas neste sistema: as velocidades médias, pressão e outros seis termos associados ao tensor de Reynolds. Com isso, modelos adicionais de fechamento devem ser aplicados. Boussinesq propôs o fechamento a partir de uma analogia com o modelo de Stokes para as tensões viscosas moleculares:

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}, \quad (3.8)$$

sendo

$$k \equiv -\frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i} = \frac{1}{2} (\overline{u' u'} + \overline{v' v'} + \overline{w' w'}), \quad (3.9)$$

a energia cinética turbulenta, μ_t a viscosidade dinâmica turbulenta e δ_{ij} o delta de Kronecker. Como a energia cinética turbulenta depende apenas do traço do tensor de Reynolds, ela é incorporada ao gradiente de pressão:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \right) = \frac{2}{3} \frac{\partial \rho k}{\partial x_i}. \quad (3.10)$$

$$\bar{p}^* = \bar{p} + \frac{2}{3} \rho k. \quad (3.11)$$

Com isso, partindo da equação média transiente de Reynolds e aplicando os conceitos detalhados têm-se as equações:

$$\frac{\partial \rho \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] + \bar{f}_i. \quad (3.12)$$

Para a equação de balanço de um escalar, a aplicação do conceito de média, resulta no surgimento de um escalar adicional:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_j \bar{c})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \right) + Q_j \right] \quad (3.13)$$

em que

$$Q_j = \overline{u_j c} - \bar{u}_j \bar{c}. \quad (3.14)$$

O termo Q_j pode ser modelado através de um modelo de gradiente-difusão (FOX, 2003):

$$Q_j = -\alpha_t \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j}. \quad (3.15)$$

Na Eq. 3.15 \bar{c} representa o campo de escalar resolvido, e α_t é o coeficiente de difusão turbulento, que pode ser determinado por

$$\alpha_t = \frac{\nu_t}{Sc_t}. \quad (3.16)$$

Com isso, a equação de balanço do escalar pode ser obtida:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u}_j \bar{c})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\alpha + \frac{\nu_t}{Sc_t} \right) \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \right) \right] \quad (3.17)$$

As Eqs 3.12 e 3.17 ainda não estão fechadas devido à presença da viscosidade turbulenta. Dentre os modelos de fechamento que dependem do conceito de viscosidade turbulenta estão os modelos a zero, uma e duas equações de balanço (SILVEIRA-NETO, 2020). Dois modelos de fechamento da turbulência URANS foram escolhidos em razão da ampla aplicação dos mesmos em estudos computacionais de fenômenos da corrosão acelerada pelo escoamento. No presente estudo foram aplicados os modelos: LRN $k - \epsilon$ AKN e o modelo $k - \omega$ SST.

3.2.1 Modelo de fechamento $k - \epsilon$

Nos modelos de fechamento $k - \epsilon$ são resolvidas duas equações de balanço adicionais às equações filtradas. Com a primeira modela-se o balanço de energia cinética turbulenta específica, k [J/kg], e com a segunda modela-se a potência específica de transformação viscosa, ϵ [W/kg]. As equações são dadas por:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k + D_k \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + P_\varepsilon + D_\varepsilon \quad (3.19)$$

Nas Eqs. 3.18 e 3.19, P e D representam processos de transformações das propriedades k e ε . As expressões σ , P e D dependem de cada modelo. Além disso, o cálculo da viscosidade turbulenta é dado por:

$$\mu_t = \rho \frac{C_\mu k^2}{\varepsilon}, \quad (3.20)$$

onde C_μ é definido como constante ou com uma função conforme o modelo $k - \varepsilon$.

As duas equações de balanço do modelo $k - \varepsilon$ também podem ser representadas por:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mu_t S^2 - \rho \varepsilon \quad (3.21)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t S^2 - \rho C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.22)$$

sendo:

$$S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \quad (3.23)$$

onde S_{ij} é o tensor taxa de deformação dado por:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.24)$$

Com estas definições μ_t pode ser calculado com a Eq. 3.26 considerando os coeficientes do modelo: $\sigma_k = 1$, $\sigma_\varepsilon = 1,3$, $C_\mu = 0,09$, $C_{\varepsilon 1} = 1,44$ e $C_{\varepsilon 2} = 1,92$. Estes coeficientes foram determinados para o modelo $k - \varepsilon$ padrão.

Para análise da corrosão há necessidade de um cálculo preciso dos escalares na região de camada limite respectiva ao fenômeno de transferência de massa. Em razão dessa característica, leis de parede devem ser consideradas para o modelo $k - \varepsilon$ padrão. A implementação das leis de parede se faz necessária, pois, o escoamento na subcamada viscosa não é adequadamente

modelado com o modelo $k - \varepsilon$ padrão.

O modelo aplicado no presente estudo para a análise da corrosão induzida pelo escoamento foi apresentado por Abe, Kondoh e Nagano (1994) (AKN) . No modelo proposto por Abe, Kondoh e Nagano (1994) são consideradas as funções de amortecimento $f_{\varepsilon 1}$ e $f_{\varepsilon 2}$ na equação de balanço de ε (Eq. 3.22) e f_{μ} na equação de viscosidade turbulenta (Eq. 3.20).

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} f_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t S^2 - \rho C_{\varepsilon 2} f_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k}, \quad (3.25)$$

$$\mu_t = \rho f_{\mu} \frac{c_{\mu} k^2}{\varepsilon} \quad (3.26)$$

Os valores dos coeficientes do modelo e as condições de contorno impostas para k e ε estão apresentados na Tab. 3.1.

Tabela 3.1: Constantes e condições de contorno dos modelos LB e AKN

Constantes	c_{μ}	σ_k	σ_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	ε_w	k_w
AKN	0,09	1,4	1,4	1,50	1,90	$2\nu k/y^2$	0

As funções de amortecimento foram calculadas com:

$$f_{\mu} = \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{R_{\varepsilon}}{14}\right) \right\}^2 \left[1 + \frac{5}{R_t^{0,75}} \exp\left\{-\left(\frac{R_t}{200}\right)^2\right\} \right] \quad (3.27)$$

$$f_{\varepsilon 1} = 1 \quad (3.28)$$

$$f_{\varepsilon 2} = \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{R_{\varepsilon}}{3,1}\right) \right\}^2 \left[1 - 0,3 \exp\left\{-\left(\frac{R_t}{6,5}\right)^2\right\} \right] \quad (3.29)$$

As variáveis adimensionais são definidas por:

$$R_t = \frac{\rho k^2}{\mu \varepsilon} \quad (3.30)$$

$$R_{\varepsilon} = \frac{y}{(\nu^3/\varepsilon)^{1/4}}. \quad (3.31)$$

3.2.2 Modelo de fechamento $k - \omega$ SST

O modelo $k - \omega$ SST proposto por Menter, Kuntz e Langtry (2003) foi desenvolvido considerando os modelos $k - \epsilon$ e $k - \omega$. As equações de balanço do modelo $k - \omega$ SST considerando o estudo de Menter, Kuntz e Langtry (2003) são:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i k)}{\partial x_i} = \tilde{P}_k - \rho \beta^* k \omega + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \omega)}{\partial x_i} = & \eta \rho S^2 - \rho \beta \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\mu + \sigma_\omega \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right] \\ & + 2(1 - F_1) \rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

em que:

$$F_1 = \tanh \left\{ \left\{ \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4\rho \sigma_{\omega 2} k}{CD_{k\omega} y^2} \right] \right\}^4 \right\} \quad (3.34)$$

$$CD_{k\omega} = \max \left(2\rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i}, 10^{-10} \right) \quad (3.35)$$

A viscosidade turbulenta é avaliada da seguinte forma:

$$\nu_t = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, SF_2)}, \quad (3.36)$$

onde S é o módulo do tensor taxa de deformação e F_2 uma segunda função de hibridação, definida por:

$$F_2 = \tanh \left\{ \left[\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right) \right]^2 \right\} \quad (3.37)$$

Um limitador é utilizado no termo P_k para evitar a transferência excessiva de energia em regiões de estagnação:

$$\tilde{P}_k = \min(P_k, 10\beta^* \rho k \omega), \quad P_k = \mu_t S^2, \quad S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right).$$

Todas as constantes são obtidas por meio da hibridação entre as constantes correspondentes

dos modelos $k - \varepsilon$ e $k - \omega$. Este processo é feito através de relações do tipo:

$$\eta = \eta_1 F_1 + \eta_2 (1 - F_1) \quad (3.38)$$

As constantes para o modelo $k - \omega$ SST são:

$$\begin{aligned} \eta_1 = 5/9, \quad \beta_1 = 3/40, \quad \sigma_{k1} = 0,85, \quad \sigma_{\omega1} = 0,5, \quad \beta^* = 0,09, \\ \eta_2 = 0,44, \quad \beta_2 = 0,0828, \quad \sigma_{k2} = 1,0, \quad \sigma_{\omega2} = 0,856. \end{aligned}$$

3.3 Formulação diferencial para a fronteira imersa fluidodinâmica

No método da fronteira imersa, duas malhas independentes são utilizadas para rerepresentar uma estrutura sólida em um fluido. A malha na qual as equações que os fenômenos da fluidodinâmica e da corrosão são representadas é denominada euleriana. A segunda malha é denominada lagrangiana e representa as geometrias imersas no escoamento. A metodologia da fronteira imersa utilizada no presente estudo baseia-se no trabalho de Wang e Ruuth (2008) e é denominada multi forçamento direta. Uma descrição mais detalhada do método é apresentada nos trabalhos de Vedovoto, Serfaty e Neto (2015) e Melo (2017).

Com base no método de forçamento direta de Uhlmann (2005) observa-se a imposição de forças no domínio euleriano provenientes da velocidade da fronteira imersa. As forças nos pontos lagrangianos são determinadas a partir das equações de Navier-Stokes

$$F_i = \frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + RHS_i, \quad (3.39)$$

em que

$$RHS_i = \frac{\partial \rho U_i U_j}{\partial X_j} + \frac{\partial p}{\partial X_i} - \frac{\partial}{\partial X_j} \left[\mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial X_j} + \frac{\partial U_j}{\partial X_i} \right) \right] \quad (3.40)$$

Nas Eqs. 3.39 e 3.40 as variáveis em maiúsculo são respectivas às propriedades do escoamento e posição avaliadas nos elementos de malha lagrangiana. As variáveis f_i , u_i e x_i representam as componentes de força, velocidade no meio fluido e posição na malha euleriana, respectivamente.

Por meio da derivada temporal da Eq. 3.39, obtém-se

$$F_i(\vec{X}, t) = \frac{\alpha_2 U_i^{t+\Delta t} - \alpha_1 U_i^t + \alpha_0 U_i^{t-\Delta t}}{\Delta t} + RHS_i^t, \quad (3.41)$$

em que α_0 , α_1 e α_2 representam os coeficientes da discretização temporal. Para o método da fronteira imersa aplicado, o parâmetro U_i^* é subtraído e adicionado ao termo temporal da Eq. 3.41.

$$F_i(\vec{X}, t) = \frac{\alpha_2 U_i^{t+\Delta t} - \alpha_1 U_i^t + \alpha_0 U_i^{t-\Delta t} - U_i^* + U_i^*}{\Delta t} + RHS_i^t. \quad (3.42)$$

No passo posterior, o princípio da superposição é aplicado para resolver a equação anterior em duas partes

$$\frac{U_i^* - \alpha_1 U_i^t + \alpha_0 U_i^{t-\Delta t}}{\Delta t} + RHS_i^t = 0, \quad (3.43)$$

$$F_i(\vec{X}, t) = \frac{\alpha_2 U_i^{t+\Delta t} - U_i^*}{\Delta t}, \quad (3.44)$$

em que $U_i^{t+\Delta t}$ representa a velocidade desejada para a fronteira. Em outras palavras, para uma fronteira estacionária seu valor é nulo, e para uma fronteira em movimento o seu valor é igual a velocidade da fronteira.

Para determinar os componentes de velocidade U_i^* nos pontos lagrangianos, a interpolação dos componentes de velocidade u_i^* é realizada nas células eulerianas mais próximas de cada ponto lagrangiano. A interpolação é definida por:

$$U_i^*(\vec{X}) = \sum_{\Omega} D_h(\vec{x} - \vec{X}) u_i^*(\vec{x}) \Delta x \Delta y \Delta z, \quad (3.45)$$

Na Eq. 3.45, D_h representa a função interpolação. No presente trabalho, a função cúbica, definida por Griffith e Peskin (2005), foi utilizada para interpolação/distribuição. Após o cálculo da força em cada ponto lagrangiano, a distribuição da força é realizada nas células eulerianas mais próximas.

$$f_i(\vec{x}) = \sum_{\Gamma} D_h(\vec{x} - \vec{X}) F_i(\vec{X}) \Delta V_{\Gamma} \quad (3.46)$$

em que ΔV_{Γ} representa o volume lagrangiano. Com isso, os componentes de velocidade nas

células eulerianas podem ser calculadas:

$$f_i = \frac{\alpha_2 (\rho u_i)^{n+1} - \alpha_2 \rho u_i^*}{\Delta t} \Rightarrow u_i^{n+1} = u_i^* + \frac{f_i \Delta t}{\alpha_2 \rho}. \quad (3.47)$$

Em resumo, no método da multi-forçagem direta calcula-se a velocidade no ponto lagrangiano, em seguida calcula-se a força no ponto lagrangiano e em um último passo esta força é distribuída no domínio euleriano. Ressalta-se que o procedimento é realizado de forma iterativa até que um valor de resíduo mínimo desejado seja estabelecido.

3.4 Formulação diferencial para a fronteira imersa corrosão

Na solução da fronteira imersa da corrosão foi aplicado o mesmo método utilizado para a fronteira imersa da fluidodinâmica. Entretanto, na fronteira imersa da corrosão parte-se da equação de balanço do escalar. O termo de forçagem f_{ic} , foi definido para definição da interface imersa.

$$f_{ic}(\vec{x}) = \sum_K F_{ic}(\vec{x}_K) D_h(\vec{x} - \vec{x}_K) \Delta V(\vec{x}_K), \quad (3.48)$$

Como a condição de primeira espécie é aplicada para imposição da concentração na interface imersa, a forçagem no ponto lagrangiano é determinada de forma similar a parte dinâmica. Desse modo, o escalar é calculado no ponto lagrangiano com a equação de interpolação:

$$C_L^* = \sum_{\Omega} c^* D_h(x_i - x_K) h^3. \quad (3.49)$$

Em seguida, os termos da forçagem são calculados pela equação:

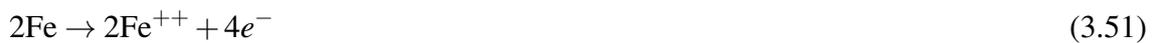
$$F_{ic}(\vec{X}, t) = \rho D_c \frac{\alpha_2 c^{t+\Delta t} - C_L^*}{\Delta t} \quad (3.50)$$

em que $c^{t+\Delta t}$ é o valor do escalar desejado na interface imersa e D_c é a difusividade do escalar.

Com o cálculo da forçagem, a distribuição pode ser realizada por meio da Eq. 3.48, permitindo o cálculo do escalar na malha euleriana. Assim como observado no método de fronteira imersa fluidodinâmica, o procedimento é realizado de forma iterativa até que o critério de parada seja estabelecido.

3.5 Modelagem da corrosão

Como a corrosão é observada em diversas aplicações, não é possível definir apenas um modelo para análise computacional. Levando em consideração o estudo de Keating (1999), um mecanismo reacional foi formulado para a corrosão com o processo de difusão controlado pelo oxigênio.



O fluxo de espécies, n , é determinado com:

$$n = k_m (C_b - C_w) \quad (3.53)$$

onde C_b é a concentração do oxigênio fora da camada limite de transferência de massa e C_w é a concentração de oxigênio na parede. Considerando que C_w é nula na parede e que dois mols de Fe reagem com um mol de O_2 , a taxa de corrosão de Fe é obtida por:

$$\frac{dW}{dt} = 2k_m C_b \quad (3.54)$$

O coeficiente de transferência de massa, k_m , pode ser determinado com correlações empíricas para escoamentos em geometrias simples. Para um problema de expansão abrupta este coeficiente é determinado utilizando-se o perfil de concentração obtido por meio da resolução da Eq. 3.55.

$$k_m = -D_c \frac{\partial C_0 / \partial y|_{y=0}}{C_b} = -\frac{D_c C_0}{\Delta y C_b} \quad (3.55)$$

onde Δy_{crr} é a distância do centro do primeiro volume até a parede da malha da corrosão, D_c é o coeficiente de difusividade e C_0 é a concentração de oxigênio no centro do primeiro volume próximo à parede.

Como observado anteriormente, os fenômenos da corrosão também podem ser analisados por meio de correlações empíricas. Estas relações permitem obter estimativas do Sh por meio

dos Re e Sc . Dese modo, é possível calcular os coeficientes e taxas de transferência de massa por meio da relação:

$$Sh = \frac{k_m L}{D_c}. \quad (3.56)$$

Na Eq. 3.56, L representa o comprimento característico do escoamento em estudo. Ressalta-se que as variáveis k_m e Sh são constantemente aplicadas para análise de fenômenos de corrosão com métodos numérico-computacionais. Considerando as definições de k_m e Sh , a relação definida na Eq. 3.57 também pode ser considerada para avaliação de sistemas de transferência de massa com influência do escoamento.

$$Sh = L \frac{|\partial c / \partial y|_{parede}}{c_{bulk} - c_{parede}}. \quad (3.57)$$

CAPÍTULO IV

MODELAGEM NUMÉRICO-COMPUTACIONAL

Neste capítulo é apresentada a modelagem numérico-computacional para o estudo de fenômenos corrosivos em sistemas fluidodinâmicos com aplicação do método multinível. Primeiro, são apresentadas características do software MFSim. Na segunda parte, a sistemática aplicada ao método multinível é detalhada.

4.1 Modelagem computacional

A modelagem do escoamento com efeitos corrosivos foi realizada utilizando o código MFSim, desenvolvido no Laboratório de Mecânica dos Fluidos, MFLab, da Universidade Federal de Uberlândia. São características do código MFSim a aplicação do método de volumes finitos para a discretização das equações de balanço, utilizando-se domínios eulerianos e malhas escalonadas. Os estudos desenvolvidos a partir do código são realizados por meio de malhas bloco estruturadas e passo de tempo variável. As equações diferenciais parciais utilizadas para modelar os escoamentos podem ser descritas por abordagens divergentes e não divergentes. Os métodos de acoplamento pressão-velocidade utilizados no código são: passo fracionado, SIMPLE e SIMPLEC. Além disso, estão definidos no código diversos modelos para tratamento dos termos de advecção. Por último, para obter a solução das equações diferenciais, estão incluídos no MFSim a biblioteca PETSc Abhyankar et al. (2018) e Balay et al. (2022); e o método multigrid-multinível (VILLAR, 2007; LIMA, 2012).

No período atual, a plataforma MFSim permite a simulação de problemas 3D como: escoamento turbulento (DAMASCENO; VEDOVOTO; SILVEIRA-NETO, 2015), interação fluido-estrutura (NETO et al., 2019), escoamentos multifásicos (SOUZA et al., 2022), escoamen-

tos gás-sólidos (PIVELLO et al., 2014; BARBI et al., 2018; PINHEIRO et al., 2021), gás-liquidos (SANTOS, 2019) e escoamentos reativos (DAMASCENO; SANTOS; VEDOVOTO, 2018; CASTRO et al., 2021). Quanto aos modelos de fechamento da turbulência, a plataforma conta com métodos LES considerando modelagens isotrópicas e anisotrópicas, modelos URANS e modelos híbridos que foram explorados nos estudos de Elias (2018) e Melo (2017).

Por meio destes métodos, as equações de balanço da quantidade de movimento linear, balanço de massa, escalar e da turbulência são resolvidas no MFSim considerando uma hierarquia de malhas cartesianas agrupadas. Conforme pode ser observado na Fig. 4.1, nota-se como características da malha: um nível físico base, l_{bot} , que cobre todo domínio computacional, e uma sequência de níveis físicos que são progressivamente refinados até o nível de menor espaçamento, o qual é denominado l_{top} .

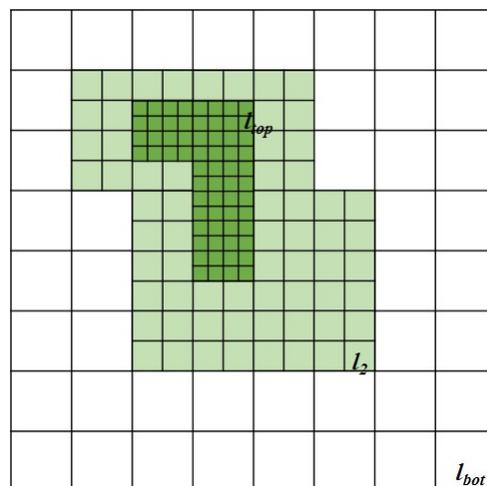


Figura 4.1: Malha bloco estruturada com três níveis de refinamento corretamente agrupada.

Na Fig. 4.1 podem ser observadas como propriedades da malha composta: coincidência entre os cantos da malha mais fina com os cantos das células pertencentes a um nível imediatamente abaixo; e, além disso, os limites das malhas com menor espaçamento não podem estar posicionados no limite das malhas do nível imediatamente abaixo, exceto quando tocam as bordas do nível físico base.

No MFSim a malha do nível com menor espaçamento é gerada em regiões pré-definidas pelo usuário, ou dinamicamente em locais onde há variação de propriedades referentes ao fenômeno de interesse. Conforme a dinâmica do escoamento, podem ser utilizados como critérios para o refinamento adaptativo: vorticidade, posição de corpos imersos, gradiente do escalar sendo

transportado e a presença de partículas. Desse modo, com a aplicação de um refinamento adaptativo, é possível obter características dos fenômenos locais com acurácia e maior eficiência computacional.

Para fenômenos da corrosão induzida pelo escoamento, a malha do nível l_{top} pode ser apenas pré-definida nas regiões de parede. Neste fenômeno o espaçamento no nível l_{top} é definido pela espessura da subcamada do processo de transferência de massa que pode ser obtido pela relação $\delta_{sca} = \delta_{hid} / Sc^{1/3}$ segundo Calculation... (1992). Ou seja, no MFSim, observa-se que para escoamentos com $Sc > 1$ tanto as equações da fluidodinâmica quanto a equação de balanço do escalar devem ser resolvidas com a δ_{sca} . Para o cálculo do passo de tempo de cada iteração considera-se:

$$\Delta t = C \cdot \min(\Delta t_{dif}, \Delta t_{adv}), \quad (4.1)$$

em que:

$$\Delta t_{dif} = \min(\Delta x, \Delta y, \Delta z), \quad (4.2)$$

$$\Delta t_{adv} = \frac{\Delta x}{|u|_{m\acute{a}x}} + \frac{\Delta y}{|v|_{m\acute{a}x}} + \frac{\Delta w}{|w|_{m\acute{a}x}}. \quad (4.3)$$

Na Eq. 4.1, Δt é o passo de tempo, C é a condição CFL (COURANT; FRIEDRICHS; LEWY, 1967) que pode ser definida no intervalo $[0,2:1,0]$, Δt_{dif} e Δt_{adv} são os passos de tempo difusivos e advectivos, respectivamente. Nas Eqs. 4.2 e 4.3, $\Delta x, \Delta y$ e Δz representam o comprimento da malha nas direções x, y e z , respectivamente. $|u|_{m\acute{a}x}$, $|v|_{m\acute{a}x}$ e $|w|_{m\acute{a}x}$ representam os valores máximos absolutos das três componentes de velocidade.

Na simulação numérico-computacional do fenômeno de interesse, o cálculo do passo de tempo foi definido com base nas propriedades do escoamento e da malha de forma contínua durante a simulação. Ou seja, não foi considerado um passo de tempo fixo. Com o cálculo do passo de tempo variável foi possível limitar o incremento temporal com base no passo de tempo mínimo advectivo ou difusivo. Ressalta-se que para os problemas do presente estudo, o passo de tempo advectivo é o fator que definiu o passo de tempo ao longo da simulação. Essa característica era esperada, pois, em regiões parietais, onde o comprimento de malha apresenta o valor mínimo, o campo de velocidade apresenta valores próximos a 0,0 m/s. Com isso a relação $\Delta t_{adv} < \Delta t_{dif}$.

Com o objetivo de realizar a simulação com menor custo computacional, foi proposto no presente estudo um método multinível para resolver a fluidodinâmica e o fenômeno de transferência de massa em malhas com comprimentos diferentes na região parietal. Com isso, o cálculo do passo de tempo passou a ser determinado separadamente para as equações de Navier-Stokes e as equações de balanço do escalar respectivo à corrosão. Ou seja, no método multinível aplicam-se passos de tempo distintos, que podem ser obtidos para cada fenômeno, sendo que as equações de Navier-Stokes são resolvidas com a δ_{hid} e as equação de balanço para o processo de corrosão sendo resolvidas com a δ_{sca} .

Como em fenômenos com $Sc \gg 1$ o passo de tempo da fluidodinâmica é maior que o passo de tempo da corrosão. Desse modo, há a necessidade de obter um campo de velocidade intermediário para que a equação de balanço para os escalares seja resolvida com as propriedades do escoamento atualizadas em cada passo de tempo. Com a finalidade de obter campos de velocidades intermediários foi considerada a estratégia proposta por Ostillia-Monico et al. (2015). Além de calcular o campo de velocidade em passos de tempos intermediários também foi implementada no MFSim uma interpolação espacial do campo de velocidade da malha fluidodinâmica para a malha da corrosão. Ressalta-se que as malhas computacionais aplicadas para a fluidodinâmica e para a corrosão apresentam sempre a mesma malha no nível base. O fator que determina o comprimento da malha computacional de cada fenômeno na região parietal é o número de níveis físicos totais que são acessados no MFSim nas sub rotinas em que as equações de balanço de cada fenômeno são resolvidas. O método de interpolação espacial foi aplicado nos métodos multiníveis considerados por Panda et al. (2019) e Chong, Ding e Xia (2018) os quais foram considerados no presente estudo para determinar um campo de velocidade que mantém as propriedades de divergente nulo nas malhas mais finas.

Com isso, a partir dos métodos de interpolação espacial e temporal, foi proposta uma metodologia multinível para avaliação do fenômeno da corrosão em sistemas fluidodinâmicos com menores custos computacionais. Nas próximas seções serão explicados cada um dos processos de interpolação. Além disso, na secção de interpolação temporal foram detalhadas diferentes estratégias utilizadas para modelagem numérico-computacional do fenômeno multi-físico.

4.2 Interpolação do campo de velocidade

O método de interpolação escolhido para aplicação da metodologia multinível foi o proposto por Balsara (2001). A metodologia detalhada por Balsara (2001) foi escolhida em razão desta ser aplicável para malhas com razões de refinamento de 2 e por proporcionar um processo de interpolação que atende aos critérios de balanço de massa para obtenção do campo de velocidade. Além disso, o método também pode ser aplicado para malhas alongadas, ou seja, para quando $\Delta x \neq \Delta y \neq \Delta z$. Com o objetivo de detalhar o método matemático para obter o campo de velocidade, o procedimento pode ser explicado considerando uma malha bidimensional. Posteriormente, serão detalhadas as etapas de interpolação considerando uma malha tridimensional, a qual segue a mesma ideia proposta para a interpolação bidimensional. As informações utilizadas na aplicação da interpolação estão esquematizadas na Fig. 4.2.

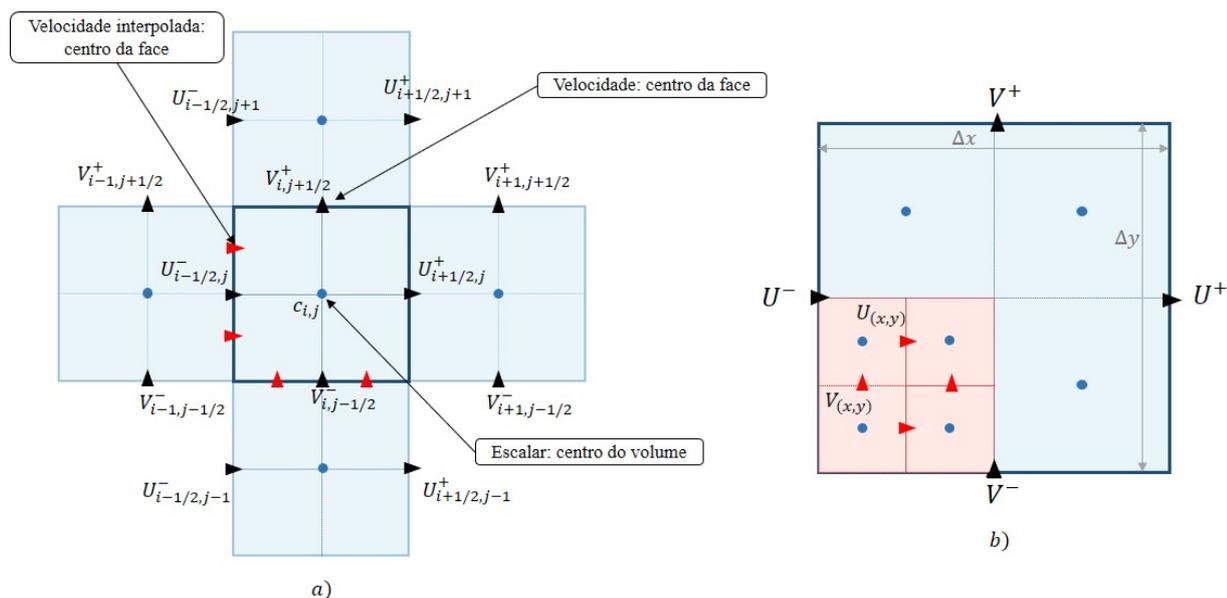


Figura 4.2: Interpolação do campo de velocidade a) primeira etapa da interpolação b) segunda etapa da interpolação.

A interpolação do campo de velocidade é realizada em dois passos. Na Fig. 4.2 é possível observar os componentes do vetor velocidade definidos por um ícone preto que são obtidos por meio da resolução das equações de balanço para a fluidodinâmica (continuidade e Navier-Stokes). Além disso, na Fig. 4.2 é possível observar ícones demarcados com a cor vermelha que denotam as componentes do vetor velocidade que serão calculados por meio da interpolação espacial na zona de interesse. Na Fig. 4.2a observa-se o primeiro passo para a interpolação espacial. Nesta primeira etapa é realizada uma interpolação linear nas faces da zona de interpolação

considerando as componentes de velocidade (demarcadas com os ícones pretos) para o cálculo das componentes de velocidade (demarcadas com os ícones vermelho) no centro das faces dos elementos da malha mais fina. Na Fig. 4.2b foram representadas as componentes de velocidade restantes que serão obtidas a partir da aplicação de uma equação quadrática e restrições para que a zona interpolada possua um campo divergente nulo.

Desse modo, na primeira etapa são realizadas interpolações lineares em cada uma das direções com o objetivo de atualizar o campo de velocidade na zona de interesse. Ressalta-se que os valores de velocidade obtidos com esta interpolação linear são suficientes para obter um campo divergente de velocidade nulo. Assim, para realizar a interpolação, primeiro são calculados os *slope limiters* via funções minmod com as Eq. 4.4 e 4.5.

$$\Delta_y U^\pm = \text{minmod}(U_{i\pm 1/2, j+1} - U_{i\pm 1/2, j}, U_{i\pm 1/2, j} - U_{i\pm 1/2, j-1}), \quad (4.4)$$

$$\Delta_x V^\pm = \text{minmod}(V_{i+1, j\pm 1/2} - V_{i, j\pm 1/2}, V_{i, j\pm 1/2} - V_{i-1, j\pm 1/2}) \quad (4.5)$$

Com isso, os vetores de velocidade nas faces da malha mais fina são determinados com as Eqs. 4.6 e 4.7 . É importante observar que a origem foi considerada no centro do elemento de comprimento Δx e Δy

$$U(x = \pm \Delta x/2, y) = U^\pm + \frac{\Delta_y U^\pm}{\Delta y} y \quad (4.6)$$

$$V(x, y = \pm \Delta y/2) = V^\pm + \frac{\Delta_x V^\pm}{\Delta x} x \quad (4.7)$$

O problema de interpolação do campo de velocidade no elemento dado por $[-\Delta x/2, \Delta x/2] \times [-\Delta y/2, \Delta y/2]$ se reduz a funções de ajuste (*fitting functions*) para obtenção das velocidades no interior do elemento. Para os vetores localizados nas faces interiores não é aceitável obter valores arbitrários para as componentes de velocidade U e V , pois o campo de velocidade não preservaria o divergente nulo no nível mais fino. Desse modo, foi proposto por Balsara (2001) a aplicação de duas funções polinomiais para determinar as componentes de velocidade em x e em y , de modo que o divergente seja nulo em todos elementos da malha fina. Com isso, podem ser aplicadas as seguintes equações quadráticas para determinar o campo de velocidade

interpolado:

$$U(x, y) = a_0 + a_x x + a_y y + a_{xx} x^2 + a_{xy} xy + a_{yy} y^2 \quad (4.8)$$

$$V(x, y) = b_0 + b_x x + b_y y + b_{xx} x^2 + b_{xy} xy + b_{yy} y^2 \quad (4.9)$$

Como foi imposto um perfil de velocidade linear nas faces da malha grossa:

$$a_{yy} = b_{xx} = 0 \quad (4.10)$$

Além disso, considerando a condição de divergente nulo, a aplicação de três novas restrições retornou as seguintes relações:

$$a_x + b_y = 0; \quad 2a_{xx} + b_{xy} = 0; \quad a_{xy} + 2b_{yy} = 0 \quad (4.11)$$

Desse modo, quando o campo de velocidade obtido com as Eqs. 4.8 e 4.9 satisfaz as restrições das Eqs. 4.10 e 4.11, o campo de velocidade será divergente nulo em toda a zona interpolada. Após a aplicação das restrições observa-se que os polinômios das Eqs. 4.8 e 4.9 possuem sete coeficientes independentes. Com a aplicação das variáveis das Eqs. 4.4 a 4.7, as seguintes relações podem ser obtidas:

$$a_x = -b_y = \frac{U^+ - U^-}{\Delta x} = \frac{V^+ - V^-}{\Delta y} \quad (4.12)$$

$$a_y = \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta_y U^+}{\Delta y} + \frac{\Delta_y U^-}{\Delta y} \right) \quad (4.13)$$

$$b_x = \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta_x V^+}{\Delta x} + \frac{\Delta_x V^-}{\Delta x} \right) \quad (4.14)$$

$$a_{xy} = -2b_{yy} = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\Delta_y U^+}{\Delta y} - \frac{\Delta_y U^-}{\Delta y} \right) \quad (4.15)$$

$$b_{xy} = -2a_{xx} = \frac{1}{\Delta y} \left(\frac{\Delta_x V^+}{\Delta x} - \frac{\Delta_x V^-}{\Delta x} \right) \quad (4.16)$$

$$a_0 = \frac{(U^+ + U^-)}{2} - a_{xx} \frac{\Delta x^2}{4}, \quad (4.17)$$

$$b_0 = \frac{(V^+ + V^-)}{2} - b_{yy} \frac{\Delta y^2}{4}. \quad (4.18)$$

A mesma metodologia é aplicada para uma interpolação tridimensional. Desse modo, primeiro devem ser calculados os limited slopes:

$$\Delta_y U^\pm = \text{minmod}(U_{i\pm 1/2, j+1, k} - U_{i\pm 1/2, j, k}, U_{i\pm 1/2, j, k} - U_{i\pm 1/2, j-1, k}) \quad (4.19)$$

$$\Delta_z U^\pm = \text{minmod}(U_{i\pm 1/2, j, k+1} - U_{i\pm 1/2, j, k}, U_{i\pm 1/2, j, k} - U_{i\pm 1/2, j, k-1}) \quad (4.20)$$

$$\Delta_x V^\pm = \text{minmod}(V_{i+1, j\pm 1/2, k} - V_{i, j\pm 1/2, k}, V_{i, j\pm 1/2, k} - V_{i-1, j\pm 1/2, k}) \quad (4.21)$$

$$\Delta_z V^\pm = \text{minmod}(V_{i, j\pm 1/2, k+1} - V_{i, j\pm 1/2, k}, V_{i, j\pm 1/2, k} - V_{i, j\pm 1/2, k-1}) \quad (4.22)$$

$$\Delta_x W^\pm = \text{minmod}(W_{i+1, j, k\pm 1/2} - W_{i, j, k\pm 1/2}, W_{i, j, k\pm 1/2} - W_{i-1, j, k\pm 1/2}) \quad (4.23)$$

$$\Delta_y W^\pm = \text{minmod}(W_{i, j+1, k\pm 1/2} - W_{i, j, k\pm 1/2}, W_{i, j, k\pm 1/2} - W_{i, j-1, k\pm 1/2}) \quad (4.24)$$

Do mesmo modo que realizada para a interpolação bidimensional, a variação linear de u , v e w nas faces da zona interpolada é dada por:

$$U(x = \pm \Delta x/2, y, z) = U^\pm + \frac{\Delta_y U^\pm}{\Delta y} y + \frac{\Delta_z U^\pm}{\Delta z} z \quad (4.25)$$

$$V(x, y = \pm \Delta y/2, z) = V^\pm + \frac{\Delta_x V^\pm}{\Delta x} x + \frac{\Delta_z V^\pm}{\Delta z} z \quad (4.26)$$

$$W(x, y, z = \pm \Delta z/2) = W^\pm + \frac{\Delta_x W^\pm}{\Delta x} x + \frac{\Delta_y W^\pm}{\Delta y} y \quad (4.27)$$

sendo que a origem está localizada no centro do elemento de dimensões Δx , Δy e Δz .

O cálculo do campo de velocidades no interior das zonas que é dado por $[-\Delta x/2, \Delta x/2] \times [-\Delta y/2, \Delta y/2] \times [-\Delta z/2, \Delta z/2]$, pode ser escrito como:

$$U(x, y, z) = a_0 + a_x x + a_y y + a_z z + a_{xx} x^2 + a_{xy} xy + a_{xz} xz \quad (4.28)$$

$$V(x, y, z) = b_0 + b_x x + b_y y + b_z z + b_{xy} xy + b_{yy} y^2 + b_{yz} yz \quad (4.29)$$

$$W(x, y, z) = c_0 + c_x x + c_y y + c_z z + c_{xz} xz + c_{yz} yz + c_{zz} z^2. \quad (4.30)$$

Impondo a condição de divergente nulo, quatro restrições são obtidas para os coeficientes:

$$a_x + b_y + c_z = 0, \quad (4.31)$$

$$2a_{xx} + b_{xy} + c_{xz} = 0, \quad (4.32)$$

$$a_{xy} + 2b_{yy} + c_{yz} = 0, \quad (4.33)$$

$$a_{xz} + b_{yz} + 2c_{zz} = 0. \quad (4.34)$$

A partir das restrições das Eqs. 4.31 a 4.34, observa-se que as Eqs. 4.28 a 4.30 possuem 17 coeficientes independentes. Considerando as variáveis das Eqs. 4.19 a 4.27 temos 18 condições que quando combinadas simplificam os cálculos dos coeficientes das Eqs. 4.28 a 4.30.

$$a_x = \frac{U^+ - U^-}{\Delta x} \quad (4.35)$$

$$a_y = \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta_y U^+}{\Delta y} + \frac{\Delta_y U^-}{\Delta y} \right) \quad (4.36)$$

$$a_z = \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta_z U^+}{\Delta z} + \frac{\Delta_z U^-}{\Delta z} \right) \quad (4.37)$$

$$a_{xy} = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\Delta_y U^+}{\Delta y} - \frac{\Delta_y U^-}{\Delta y} \right) \quad (4.38)$$

$$a_{xz} = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\Delta_z U^+}{\Delta z} - \frac{\Delta_z U^-}{\Delta z} \right) \quad (4.39)$$

$$a_{xx} = \frac{1}{2} (b_{xy} + c_{xz}), \quad (4.40)$$

$$a_0 = \frac{(U^+ + U^-)}{2} - a_{xx} \frac{\Delta x^2}{4} \quad (4.41)$$

Para obter as fórmulas para os outros coeficientes da Eq. 4.26, as seguintes substituições devem ser aplicadas às Eqs. 4.35 a 4.41: $a \rightarrow b, b \rightarrow c, c \rightarrow a, x \rightarrow y, y \rightarrow z$ e $z \rightarrow x$. De modo similar, os coeficientes da Eq. 4.30 são obtidos substituindo: $a \rightarrow c, b \rightarrow a, c \rightarrow b, x \rightarrow z, y \rightarrow x$ e $z \rightarrow y$

Portanto, foi demonstrada uma metodologia com a qual se obtém um campo de velocidade divergente nulo considerando razões de refinamento 2 em uma malha bidimensional e tridimensional. Com a implementação desse método obtém-se um prolongamento do campo de velocidade para qualquer zona de interesse. No código MFSim a aplicação da metodologia permite obter campos de velocidade para uma sequência de níveis físicos.

4.3 Interpolação temporal do campo de velocidade

Como abordado anteriormente, as simulações numérico-computacionais do fenômeno de corrosão podem ter seu custo computacional reduzido por meio da aplicação do método multinível. Com o objetivo de detalhar a implementação do método multinível no MFSim, na Fig. 4.3 está apresentado um diagrama com a ordem de resolução das equações de balanço representativos dos fenômenos sem considerar o modelo de fechamento da turbulência e a aplicação do método multinível.

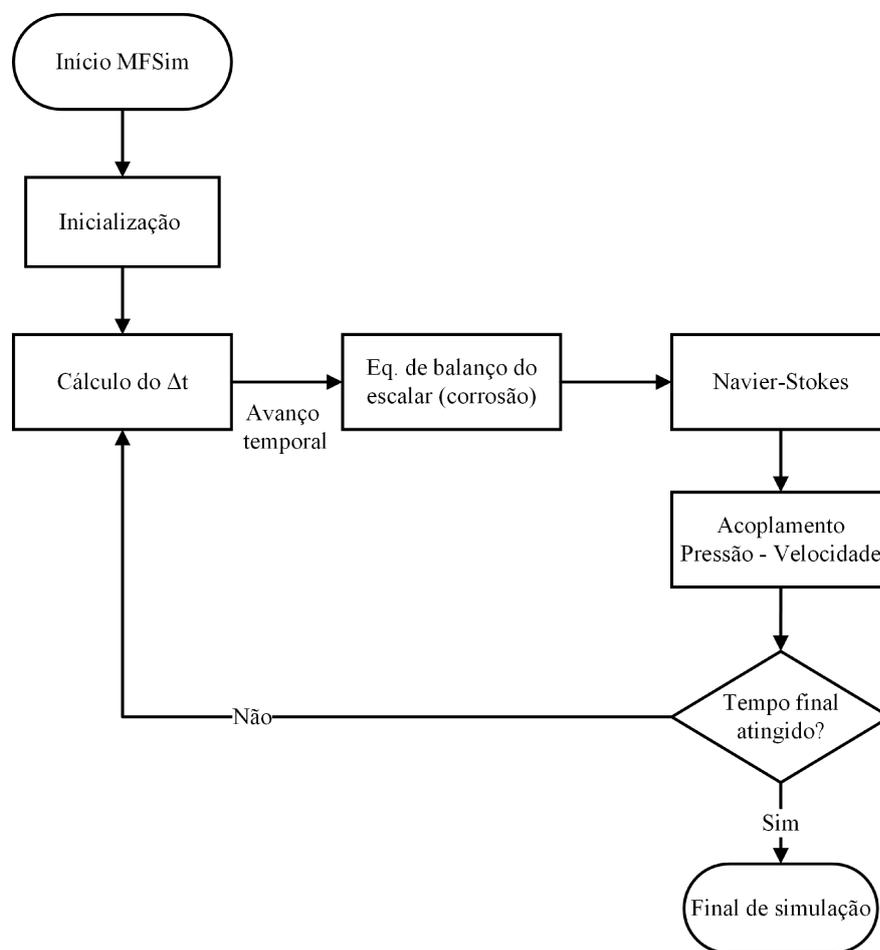


Figura 4.3: Fluxograma da ordem de resolução das equações de balanço sem a aplicação do método multinível.

Na Fig. 4.3 observa-se um esquema para resolução das equações de balanço do fenômeno em que devem ser consideradas as dimensões espaciais e temporais mais restritivas da corrosão. Em outras palavras, as dimensões características temporais e espaciais são definidas a partir das propriedades do fenômeno de transferência de massa. Este método foi aplicado em todas as análises realizadas no presente estudo para determinar os ganhos de eficiência computacional.

Na Fig. 4.4 pode ser observado o fluxograma utilizado para resolução do fenômeno com a aplicação do método multinível com a interpolação espacial do campo de velocidade e sem a interpolação temporal do campo de velocidades. Essa etapa foi necessária para avaliar, na etapa da solução manufaturada, a redução de custo computacional na resolução das equações de Navier-Stokes considerando uma malha mais grossa na região parietal. Em seguida, o campo de velocidades é interpolado para os níveis físicos superiores para resolver a equação de balanço do escalar no passo de tempo seguinte. Na Fig. 4.4, l^* representa o nível mais fino utilizado para resolver as equações de Navier-Stokes e o acoplamento pressão-velocidade.

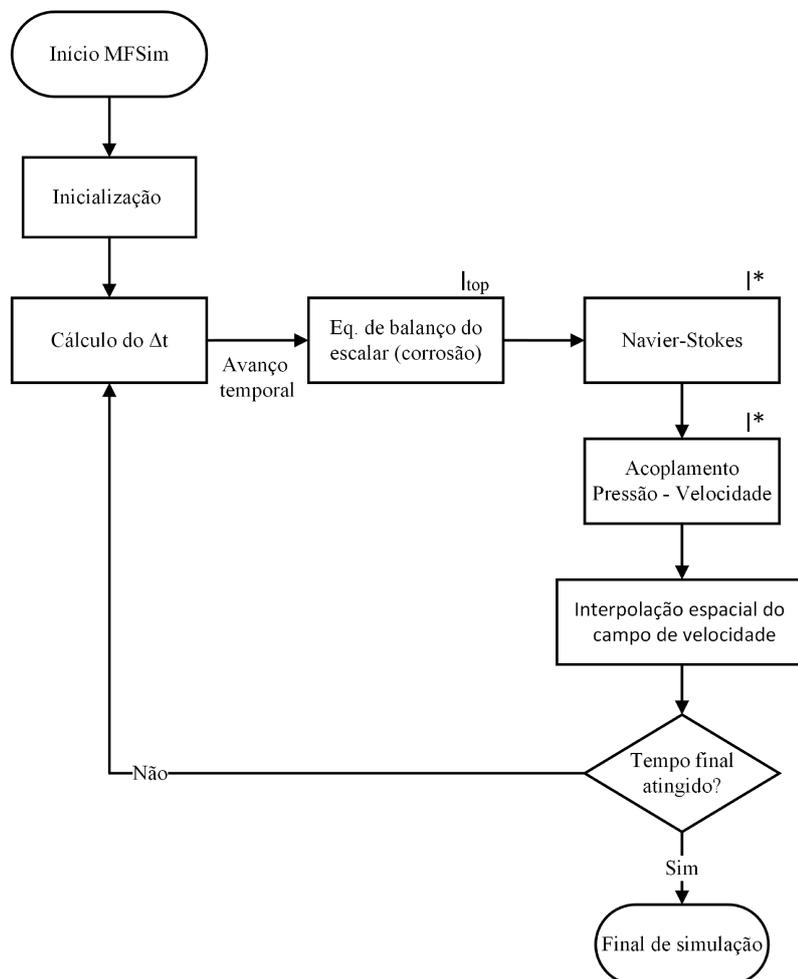


Figura 4.4: Fluxograma da ordem de resolução das equações de balanço por meio do método multinível com a interpolação espacial.

Na Fig. 4.5 observa-se o fluxograma aplicado para resolução do fenômeno com o método multinível considerando as etapas de interpolação espacial e temporal do campo de velocidades. É importante destacar que as equações da fluidodinâmica (Navier-Stokes) são resolvidas considerando o comprimento da malha no nível físico l^* e o passo de tempo Δt_{vel} . Após a resolução

das equações da fluidodinâmica e do acoplamento pressão-velocidade, a interpolação do campo de velocidades é realizada para obter o campo de velocidades até l_{top} . Com a resolução de todas as equações de balanço, verifica-se a necessidade de passos intermediários, o qual é determinado pela relação dos passos de tempo Δt_{vel} e Δt_{sca} . Caso o passo intermediário seja necessário, o campo de velocidade é interpolado no tempo para resolver a equação de balanço do escalar.

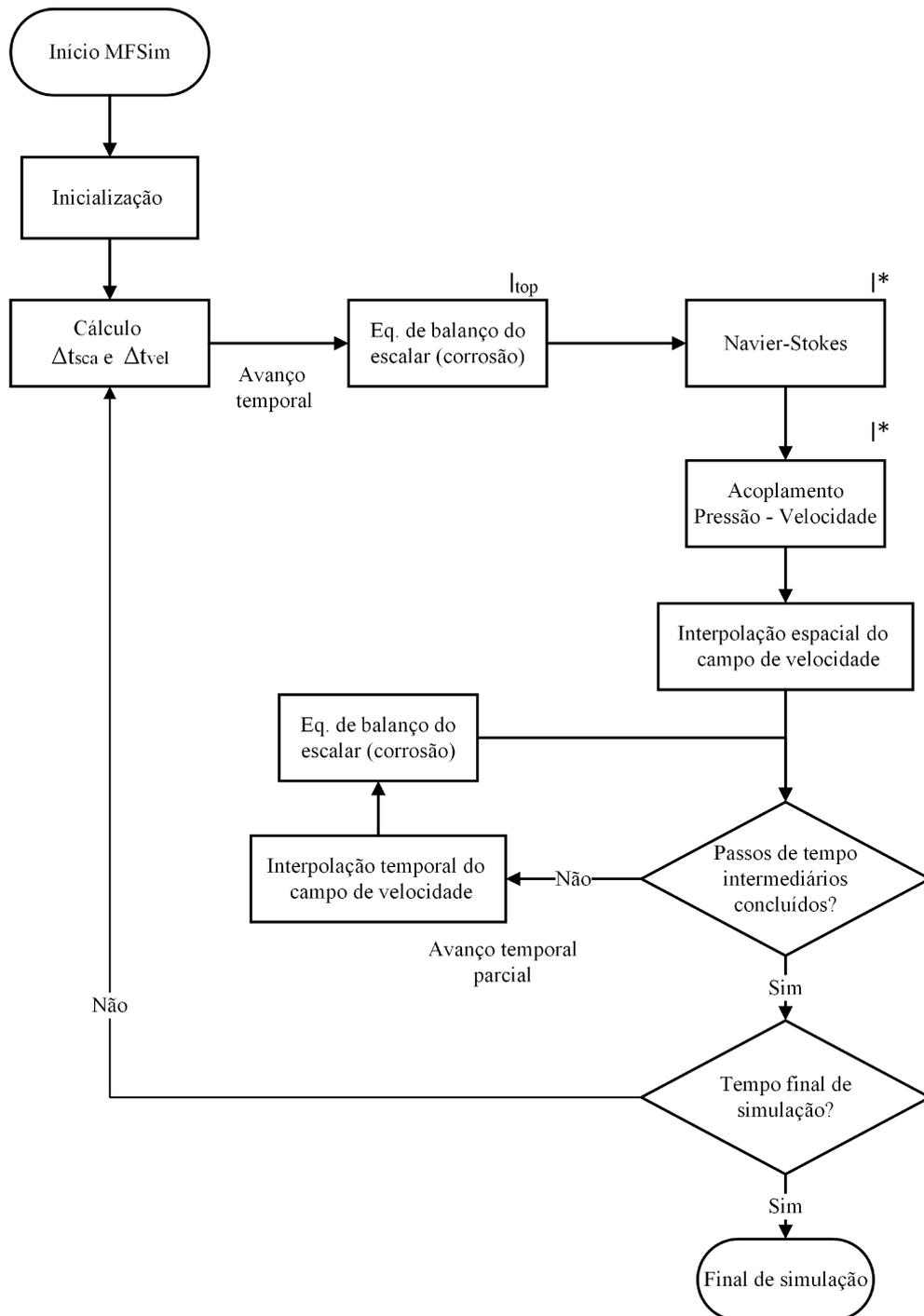


Figura 4.5: Fluxograma da ordem de resolução das equações de balanço por meio do método multinível com o processo de interpolação espacial e temporal.

Na estratégia de interpolação temporal proposta por Ostilla-Monico et al. (2015) considera-se um fator de refinamento temporal M_i . Por meio desta variável é definida a quantidade de vezes em que a equação de balanço do escalar vai ser resolvida considerando apenas um passo de tempo da fluidodinâmica. Os campos de velocidade intermediários são obtidos por:

$$u_i^{n-1} = u^{n-1} + \frac{i}{M_i} (u^n - u^{n-1}) \quad (4.42)$$

em que i representa valores inteiros do intervalo $[1 : M_i]$, u^n representa o campo de velocidade no tempo $(t + \Delta t_{vel})$ e u^{n-1} representa o campo de velocidade no passo de tempo t . Além disso, u_i^{n-1} representa o campo de velocidades no intervalo $[t : t + \Delta t_{vel}]$. Ressalta-se que como u^{n-1} e u^n apresentam um campo de velocidades divergente nulo, com isso, u_i^{n-1} também apresentará um campo divergente nulo.

É importante mencionar que o método multinível com o procedimento de interpolação temporal não foi analisado em simulações numéricas de escoamentos turbulentos com corrosão. Para obter maior eficiência computacional, nota-se a necessidade de avaliar detalhadamente o procedimento de interpolação temporal do campo de velocidades considerando a aplicação de modelos de fechamento da turbulência. Existem duas alternativas para a análise de escoamentos turbulentos considerando o método multinível.

A primeira consiste na resolução da fluidodinâmica em uma malha mais grosseira na região parietal em todo passo de tempo e interpolar o campo de velocidade obtido para os níveis mais finos. A redução de tempo computacional com a aplicação do método sem a interpolação espacial está associada à resolução das equações de Navier-Stokes e o acoplamento pressão-velocidade em uma malha com um número de volumes menor. Neste método os escalares respectivos à corrosão e turbulência são sempre resolvidos com a malha mais fina na região parietal, para satisfazer os critérios de comprimentos característicos do fenômeno de transferência de massa. O fluxograma da Fig. 4.4 mostra as etapas necessárias para este método, sendo que as equações de balanço da turbulência devem ser incluídas na etapa de resolução das equações de balanço do escalar.

A segunda alternativa considera-se a aplicação de uma malha grosseira na região parietal para todas as equações de balanço até que o escoamento alcance o regime permanente. Com o escoamento permanente calculado, a malha mais fina pode ser considerada para resolver as taxas de corrosão com maior acurácia. Ressalta-se que esse método é eficiente apenas para modelos

de fechamento da turbulência que convergem para um regime permanente. O fluxograma com a aplicação dessa estratégia pode ser observado na Fig. 4.6.

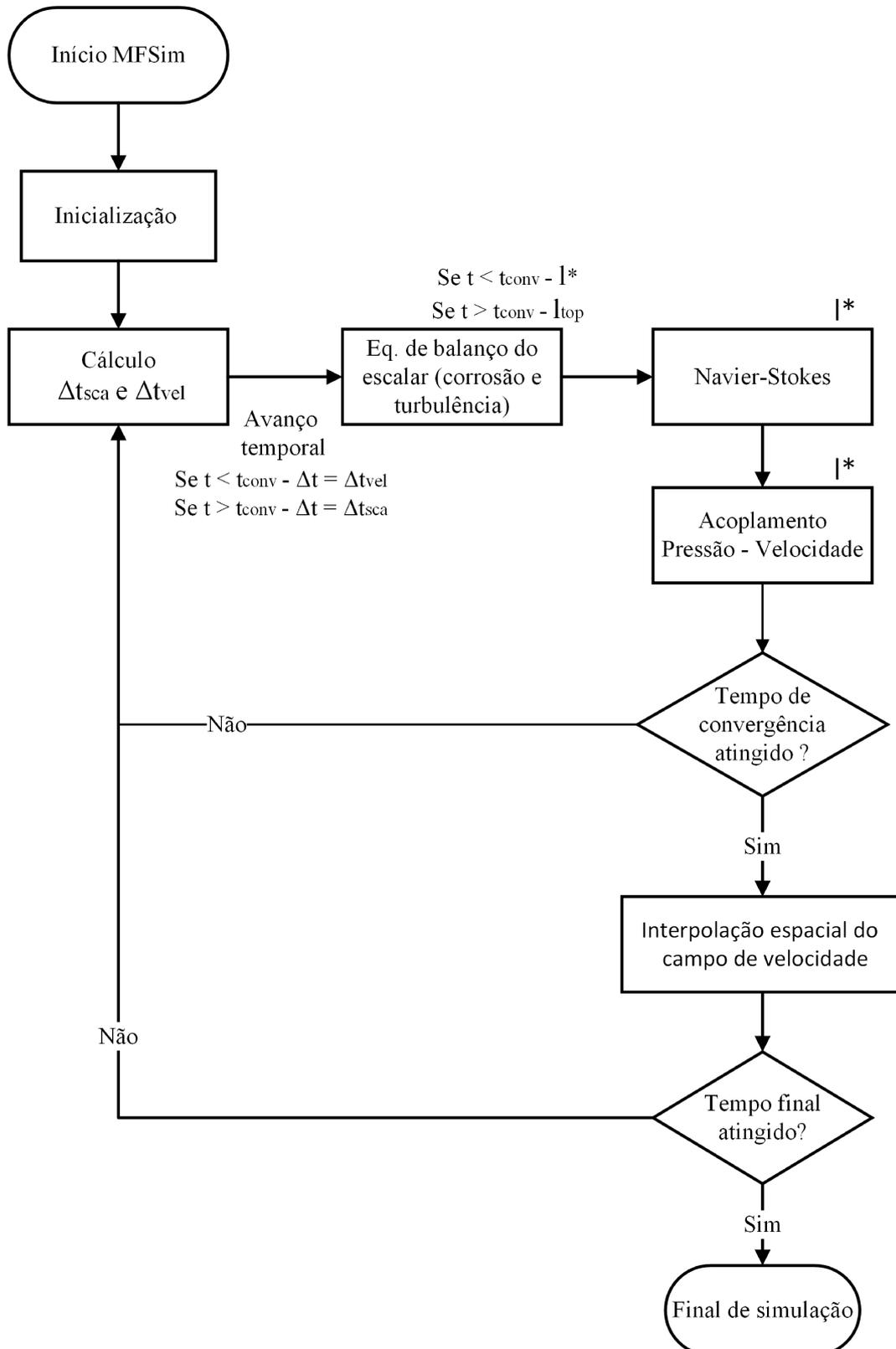


Figura 4.6: Fluxograma da ordem de resolução das equações de balanço por meio do método multinível com o processo de interpolação espacial.

Os ganhos computacionais associados à aplicação do método multinível com o fluxograma observado na Fig. 4.6 foram avaliados para um escoamento de jato de impacto. Ressalta-se que as equações de balanço das propriedades da turbulência seguem sempre os parâmetros de malha da corrosão. Com isso, os campos das propriedades da turbulência são calculados considerando o campo de velocidade interpolado.

Ressalta-se que os mesmos fluxogramas foram aplicados para as simulações com Fronteira Imersa. Nessas simulações definiu-se uma malha lagrangiana para resolver a fluidodinâmica e uma malha lagrangiana adicional para resolver os escalares. O uso de duas malhas lagrangianas é importante em razão da estrutura do código MFSim e da diferença da malha em que a fluidodinâmica e a corrosão/turbulência são resolvidas no domínio euleriano. Em outras palavras, o código MFSim é estruturado para definir os termos forçantes da fronteira imersa em um determinado nível físico. Como os comprimentos dos elementos da malha lagrangiana são dependentes do comprimento da malha euleriana e as malhas eulerianas utilizadas para resolver as equações de balanço da fluidodinâmica e da corrosão tem comprimentos diferentes no nível físico mais fino com a aplicação do método multinível, malhas lagrangianas distintas foram aplicadas nas simulações.

Com isso, os métodos aplicados para análise da metodologia multinível no software MFSim foram apresentados. Observa-se a utilização de diferentes métodos de interpolação para redução de custo computacional na resolução das equações da fluidodinâmica e do acoplamento pressão-velocidade. Além disso, no presente estudo foi avaliado se os campos de velocidades interpolados proporcionam uma modelagem adequada do fenômeno da corrosão em sistemas turbulentos. Nos estudos da literatura em que a metodologia multinível foi aplicada, considera-se escoamentos de baixo número de Reynolds e elevados números de Schmidt. Ou seja, no desenvolvimento de estudos de fenômenos multi-físicos na literatura não foi verificada a aplicação de métodos multiníveis que incluem modelos de fechamento da turbulência.

CAPÍTULO V

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Considerando as atividades propostas para a elaboração da tese, inicialmente foi realizada a etapa de verificação do MFSim. Nesta etapa, foram incluídas análises da introdução do método multinível considerando casos de solução manufaturada. Após essa etapa, foram realizadas simulações computacionais de fenômenos de corrosão em um escoamento de expansão brusca e jatos de impacto confinados com o método multinível. A terceira atividade conduzida foi a análise do fenômeno de transferência de massa considerando o método da Fronteira Imersa. Nesta etapa, escoamentos com baixos Re e Sc foram analisados para validação do código e avaliação dos desvios proporcionados pela aplicação do método multinível considerando o escoamento ao redor de uma esfera.

5.1 Verificação

Por meio da etapa de verificação da implementação numérico-computacional é possível comprovar se os modelos matemáticos considerados estão discretizados de forma correta. Na verificação, a solução de uma equação diferencial é conhecida por meio da escolha de uma função contínua para cada variável, que pode variar no tempo e no espaço. Conhecendo as funções contínuas propostas e as equações diferenciais, verifica-se a necessidade de introdução de termos fontes adicionais para que a solução proposta satisfaça as equações diferenciais consideradas. Com isso, a resolução da equação diferencial pode ser realizada considerando os termos fontes adicionais e as condições iniciais e de contorno que são calculadas por meio das funções propostas. Desse modo, considerando as soluções computacionais e as contínuas, o erro é obtido. Um teste de convergência de malhas foi realizado considerando as equações de balanço para a fluidodinâmica (continuidade e Navier-Stokes) e a equação de balanço para o

escalar. As normas L_2 foram avaliadas para obtenção da ordem de convergência numérica do método. O cálculo da norma L_2 pode ser observado na Eq. 5.1:

$$L_2 = \sqrt{\sum_{k=1}^{N_z} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{i=1}^{N_x} \|x_{num}(i, j, k) - x_{ana}(i, j, k)\|^2 \Delta x \Delta y \Delta z} \quad (5.1)$$

em que x_{num} representa o valor numérico obtido com a resolução das equações diferenciais, x_{con} é o valor proposto com a função contínua, Δx , Δy e Δz representam os tamanhos do volume nas direções x , y e z , respectivamente.

As Eqs. 5.2, 5.3 e 5.4 representam a solução exata para as componentes de velocidade nas direções x , y e z , respectivamente. A Eq. 5.5 representa a função analítica proposta para a pressão, e as Eqs. 5.6 e 5.7 representam as funções propostas para a viscosidade e a massa específica, respectivamente. Por último, a Eq. 5.8 apresenta a função contínua proposta para o escalar.

$$u = \text{sen}^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t) \quad (5.2)$$

$$v = -\text{cos}^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t) \quad (5.3)$$

$$w = \text{cos}^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t) + \text{cos}^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t) \quad (5.4)$$

$$p = \text{cos}(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t) \quad (5.5)$$

$$\mu = 1,0 + 0,2 \text{cos}^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t) \quad (5.6)$$

$$\rho = 1,0 + 0,1 \text{sen}^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t) \quad (5.7)$$

$$c = \text{sen}[2\pi(x + y + z) + 0,1t]/2 \quad (5.8)$$

Por meio das funções contínuas propostas a verificação foi realizada utilizando uma malha composta com blocos de refinamento localizados. Além disso, a verificação foi realizada para a formulação divergente, um esquema de discretização temporal de segunda ordem para o tempo (SBDF) e também para o espaço (CDS). Na Fig. 5.1 está apresentada a malha utilizada considerando um domínio cúbico $1 \times 1 \times 1$ [m³] e uma malha com 16^3 volumes.

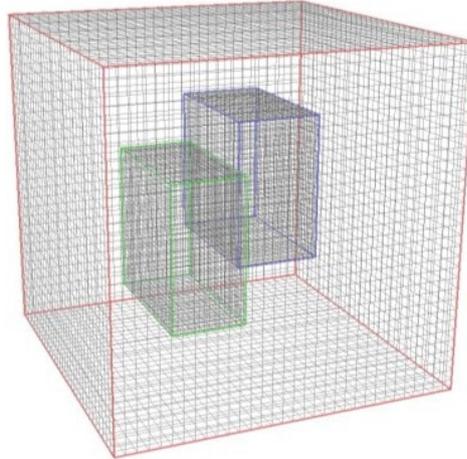


Figura 5.1: Blocos de refinamento utilizados na verificação numérica.

Para realizar a verificação foram simulados cinco níveis de refinamento: 8^3 , 16^3 , 32^3 , 64^3 e 128^3 . A Tab. 5.1 apresenta a norma L_2 e a razão de convergência para cada componente de velocidade, pressão e o escalar considerando cada nível de refinamento simulado.

Tabela 5.1: Normas L_2 e razão de convergência para verificação numérica.

Base	$L_2 - u$	$L_2 - v$	$L_2 - w$	$L_2 - p$	$L_2 - c$	$r_c - u$	$r_c - v$	$r_c - w$	$r_c - p$	$r_c - c$
8^3	0,080049	0,089375	0,164364	0,147824	0,006184	—	—	—	—	—
16^3	0,018034	0,020203	0,037193	0,045525	0,001521	4,4388	4,4238	4,4192	3,2471	4,0657
32^3	0,004402	0,004929	0,009100	0,014413	0,000379	4,0965	4,0988	4,0870	3,1585	4,0147
64^3	0,001095	0,001216	0,002250	0,004298	0,000095	4,0211	4,0522	4,0440	3,3532	4,0049
128^3	0,000273	0,000299	0,000553	0,001262	0,000024	4,0101	4,0648	4,0683	3,4047	3,9939

Como foram adotados esquemas de segunda ordem para a derivada temporal e espacial esperava-se a obtenção de uma razão de convergência quatro ao dobrar o refinamento da malha para as velocidades e o escalar. Entretanto, para a pressão esperava-se uma razão menor que 4 devido ao método de acoplamento pressão-velocidade aplicado. Como essas razões de convergência foram observadas para cada uma das variáveis, considerou-se o código verificado.

5.2 Verificação do método multinível

Com o objetivo de analisar a redução do custo computacional com a aplicação de métodos multiníveis foram realizadas simulações considerando o método de solução manufaturada. As mesmas funções contínuas propostas na secção anterior foram consideradas nesta análise.

A avaliação do custo computacional foi realizada considerando duas malhas compostas com

5 níveis físicos e razão de refinamento 2. A diferença entre as malhas compostas está na divisão do domínio base. Enquanto que para a primeira utilizou-se uma malha base com 16^3 volumes, para a segunda aplicou-se uma malha base com 32^3 volumes. Além disso, as simulações foram realizadas com a formulação divergente, um esquema de discretização temporal de segunda ordem para o tempo (SBDF) e também para o espaço (CDS).

Na Fig. 5.2 está apresentada a malha utilizada considerando um domínio cúbico $0,25 \times 0,25 \times 0,25 \text{ m}^3$ e uma malha com 32^3 volumes no nível base. É importante ressaltar que estas simulações foram realizadas com a partição do domínio em quatro processos.

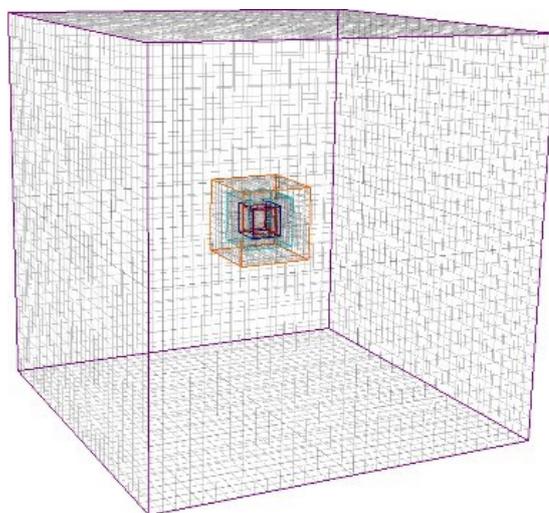


Figura 5.2: Blocos de refinamento utilizados nas simulações de solução manufaturada com 32^3 volumes no nível base.

Foram realizadas no total 7 simulações para cada malha composta e foram consideradas três estratégias para avaliação do método multinível. Com a primeira estratégia, considera-se a resolução das equações diferenciais sem a aplicação de métodos de interpolação. Ou seja, tanto as equações para a fluidodinâmica quanto a equação do escalar são resolvidas até l_{top} .

A segunda estratégia adotada consistiu em resolver as equações para a fluidodinâmica até um determinado nível físico, sendo que a equação de balanço para o escalar sempre seria resolvida até o nível l_{top} . Com isso, considerou-se a interpolação do campo de velocidade e determinou-se o passo de tempo tendo como base os dados até l_{top} . Esta estratégia está representada na Fig. 4.4. Na terceira estratégia também foi considerada a resolução da fluidodinâmica até um determinado nível físico e a equação do escalar continuou sendo resolvida até o nível l_{top} . O procedimento de interpolação do campo de velocidade também foi realizado, porém as equações foram resolvidas em passos de tempos diferentes. Nos passos de tempo em

que as equações da fluidodinâmica não eram resolvidas o campo de velocidade foi interpolado no tempo para resolver a equação do escalar de forma adequada. O fluxograma aplicado na terceira estratégia está detalhado na Fig. 4.5. Nas Tabs. 5.2 e 5.3 podem ser observadas as normas L_2 do escalar e o tempo computacional para cada uma das simulações.

Tabela 5.2: Normas $L_2 - c$ obtidos nas simulações de solução manufaturadas com e sem o método multinível.

Simulação	Método multinível	Qtade de níveis interp.	Norma $L_2 - c$ Malha base: 16^3	Norma $L_2 - c$ Malha base: 32^3
1	—	—	$1,20870 \times 10^{-4}$	$2,86863 \times 10^{-5}$
2	Interp. espacial	2	$1,23240 \times 10^{-4}$	$3,08707 \times 10^{-5}$
3	Interp. espacial	3	$1,23246 \times 10^{-4}$	$3,08710 \times 10^{-5}$
4	Interp. espacial	4	$1,23248 \times 10^{-4}$	$3,08710 \times 10^{-5}$
5	Interp. temporal e espacial	2	$1,23295 \times 10^{-4}$	$3,08817 \times 10^{-5}$
6	Interp. temporal e espacial	3	$1,23295 \times 10^{-4}$	$3,08838 \times 10^{-5}$
7	Interp. temporal e espacial	4	$1,23297 \times 10^{-4}$	$3,08846 \times 10^{-5}$

Tabela 5.3: Tempo computacional das simulações de solução manufaturada com e sem o método multinível.

Simulação	Método multinível	Qtade de níveis interp.	Tempo (s) Malha base: 16^3	Tempo (s) Malha base: 32^3
1	—	—	698,51	9385,42
2	Interp. espacial	2	222,5(0,32)	2000,9(0,21)
3	Interp. espacial	3	174,7(0,25)	1594,7(0,17)
4	Interp. espacial	4	148,7(0,21)	1443,3(0,15)
5	Interp. temporal e espacial	2	192,0(0,28)	1727,4(0,18)
6	Interp. temporal e espacial	3	139,0(0,20)	1476,4(0,16)
7	Interp. temporal e espacial	4	120,3(0,17)	1230,6(0,13)

Por meio dos dados da Tab. 5.2 observa-se um pequeno aumento na norma $L_2 - c$ conforme os procedimentos de interpolação espacial e temporal são utilizados. É importante ressaltar que quando se aplicou apenas a interpolação espacial ou quando se aplicou a interpolação temporal e espacial do campo de velocidades, a norma L_2 do escalar também teve um pequeno aumento conforme a quantidade de níveis interpolados era maior. Este comportamento era esperado devido à simplificação imposta pela introdução da interpolação do campo de velocidades.

Além disso, na Tab. 5.3 pode ser observada a redução do custo computacional com a aplicação do método multinível. Considerando as simulações com a malha base 32^3 , observou-se uma redução no tempo computacional de aproximadamente 5 vezes considerando apenas a interpolação espacial. O cenário com maior eficiência computacional foi observado com

a aplicação da estratégia de interpolação temporal do campo de velocidades que resultou na redução do tempo computacional de aproximadamente 7,5 vezes.

Portanto por meio da aplicação do método multinível nas simulações de solução manufaturada observou-se uma redução considerável no tempo computacional de até 85%. Apesar disso, precauções devem ser tomadas pelo fato dos métodos de interpolação resultarem um aumento no erro do cálculo do escalar.

5.3 Expansão brusca

O escoamento de expansão brusca com corrosão foi estudado na literatura por Sydberger e Lotz (1982); Calculation... (1992); Xiong, Koshizuka e Sakai (2011). Nesses estudos, a fluidodinâmica e a corrosão são simuladas simultaneamente para calcular o gradiente do perfil de perda de massa na parede da tubulação. No presente estudo foram realizadas simulações numérico-computacionais de dois escoamentos distintos.

Na primeira análise realizada no MFSim, o escoamento de expansão brusca, teve como característica: razão 2 das áreas de entrada e saída da tubulação, largura na tubulação após a expansão de 40,0 mm, número de Reynolds (Re) na secção de saída de 21.000, número de Schmidt (Sc) de 1.460, densidade do fluido 1.000 kg/m^3 , viscosidade do fluido de $0,0008 \text{ Pa.s}$. O escoamento foi analisado em um domínio pseudo-2D e a viabilidade da utilização do método multinível nas simulações do fenômeno de corrosão foi verificada.

Com a finalidade de analisar o fenômeno da corrosão induzida pelo escoamento em estudos futuros, simulações computacionais do escoamento de expansão brusca foram analisadas com o método da Fronteira Imersa. As simulações no MFSim foram realizadas com a finalidade de avaliar a acurácia na modelagem do fenômeno com o método da Fronteira Imersa. Com isso, um escoamento que requer menores recursos computacionais foi escolhido. Nessas simulações o escoamento teve como característica: razão 2 das áreas de entrada e saída da tubulação, largura na tubulação após a expansão de 40,0 mm, $Re = 10.000$, $Sc = 1,0$, densidade do fluido de 1.000 kg/m^3 , viscosidade do fluido de $0,0008 \text{ Pa.s}$.

5.3.1 Escoamento de expansão brusca com $Re = 21.000$ e $Sc = 1.460$

O estudo da corrosão em sistemas fluidodinâmicos turbulentos e com elevado Sc foi realizado com um domínio pseudo-2D limitado na região após à expansão. O fenômeno foi resol-

vido em um domínio com dimensões: $0,24 \times 0,02 \text{ m}^2$ ($L \times H$). Na região de entrada, definiu-se um perfil de velocidade totalmente desenvolvido. Além disso, foi imposto um perfil constante do escalar passivo ($c = 0,01947$). A condição de simetria foi imposta na linha de centro da tubulação. Na região de saída foi imposta a condição Neumann para as velocidades e para o escalar (corrosão). Nas regiões de parede definiu-se a condição de deslizamento nulo para as velocidades e um escalar (corrosão) nulo. As condições de contorno definidas para a pressão foram: pressão nula na saída e Neumann na entrada. Uma representação do domínio computacional pode ser observado na Fig. 5.3.

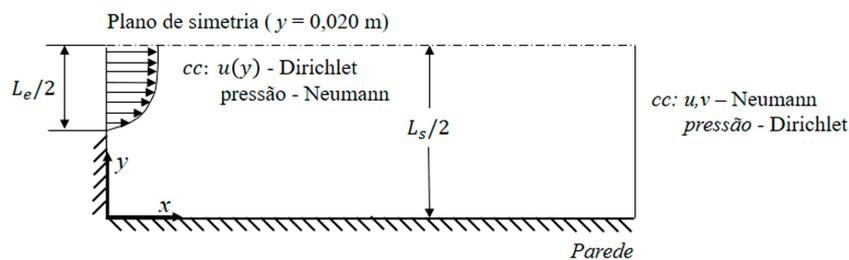


Figura 5.3: Representação do domínio computacional do escoamento de expansão brusca.

Para calcular o escoamento na região de camada limite com acurácia aplicou-se o modelo de fechamento da turbulência *LRN* k - ϵ com as funções de amortecimento propostas por Abe, Kondoh e Nagano (1994). Assim, a condição de contorno na entrada para a energia cinética turbulenta (k) foi obtida pela Eq. 5.9 considerando uma intensidade turbulenta (I) de 6%. A potência específica de transformação viscosa (ϵ) na entrada foi determinada com a Eq. 5.10, sendo que no cálculo do comprimento da turbulência (L) foi utilizada a largura da seção de entrada da tubulação (L_e).

$$k = 1,5 (I * u)^2, \quad (5.9)$$

$$\epsilon = C_{\mu}^{0.75} \frac{k^{1.5}}{L}, \quad (5.10)$$

Considerando o modelo de fechamento da turbulência *LRN* k - ϵ proposto por Abe, Kondoh e Nagano (1994), definiu-se nas simulações um Schmidt turbulento constante ($Sc_t=0,9$), assim como realizado por Xiong, Koshizuka e Sakai (2011).

Por meio do método multinível o fenômeno da corrosão induzida pelo escoamento na expansão brusca foi analisado com malhas com diferentes características de comprimento no nível

físico mais fino para a corrosão/turbulência e para a fluidodinâmica. Ressalta-se que a malha utilizada para resolver as equações de balanço de k e ϵ foi a mesma malha utilizada para o cálculo da corrosão. Em outras palavras, as Eqs. de balanço de k e ϵ são calculadas considerando o campo de velocidade interpolado. Em razão do elevado (Sc), foram realizadas 5 simulações no MFSim considerando malhas grosseiras para o cálculo da fluidodinâmica e uma malha fina para a corrosão/turbulência. O tempo físico total simulado foi de 4,0 s. Os parâmetros da malha podem ser observados na Tab. 5.4 e na Fig. 5.4, respectivamente. Na Tab. 5.4, L_{mn} representa a diferença da quantidade de níveis físicos utilizados para resolver a equação de balanço do escalar e as equações de Navier-Stokes. Além disso, Δy_{sca} e Δy_{vel} representam a distância da parede até centro do primeiro volume, na direção y , para a malha mais fina do escalar e da fluidodinâmica, respectivamente.

Tabela 5.4: Dados da malha referente às simulações com método multinível.

Simulação #	1	2	3	4	5
Malha (Nível Base)	120×80				
Níveis físicos	6	6	6	6	6
L_{mn}	0	1	2	3	4
Número de volumes	763.920	763.920	763.920	763.920	763.920
Δy_{sca} (μm)	3,90625	3,90625	3,90625	3,90625	3,90625
Δy_{vel} (μm)	3,90625	7,8125	15,625	31,25	62,5

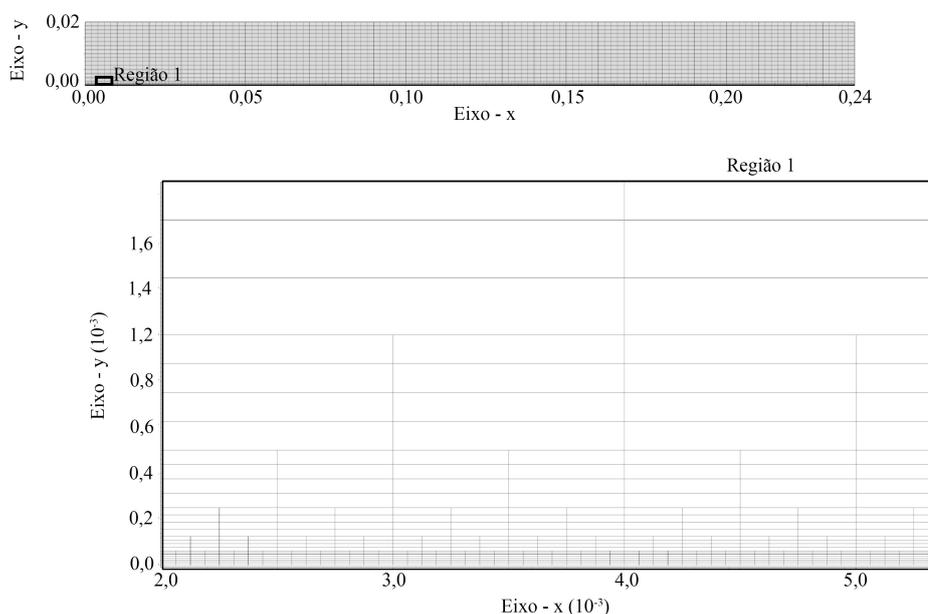


Figura 5.4: Malha computacional utilizada nas simulações de expansão brusca.

Os métodos numéricos aplicados no MFSim foram: o método de passo fracionado para o acoplamento pressão-velocidade; o método Barton para discretização espacial dos termos advectivos de cada equação de balanço; o método multigrid-multinível para obter a solução das velocidades e do escalar; o PETSc para obter a solução da pressão. O critério de convergência de 10^{-6} foi definido para resolver as equações de balanço.

Além disso, não foi utilizado o método de refinamento adaptativo. Desse modo, a simulação foi realizada com uma malha fixa refinada apenas na região $y = 0,0$ m sendo que o nível mais fino foi definido com 8 volumes na direção normal à parede. As simulações foram realizadas com processamento em paralelo, sendo que foram utilizados 12 processadores com partição do domínio na direção x . A partir da metodologia detalhada, foram obtidos os campos das propriedades referentes ao escoamento e à corrosão, que podem ser observados na Fig. 5.5.

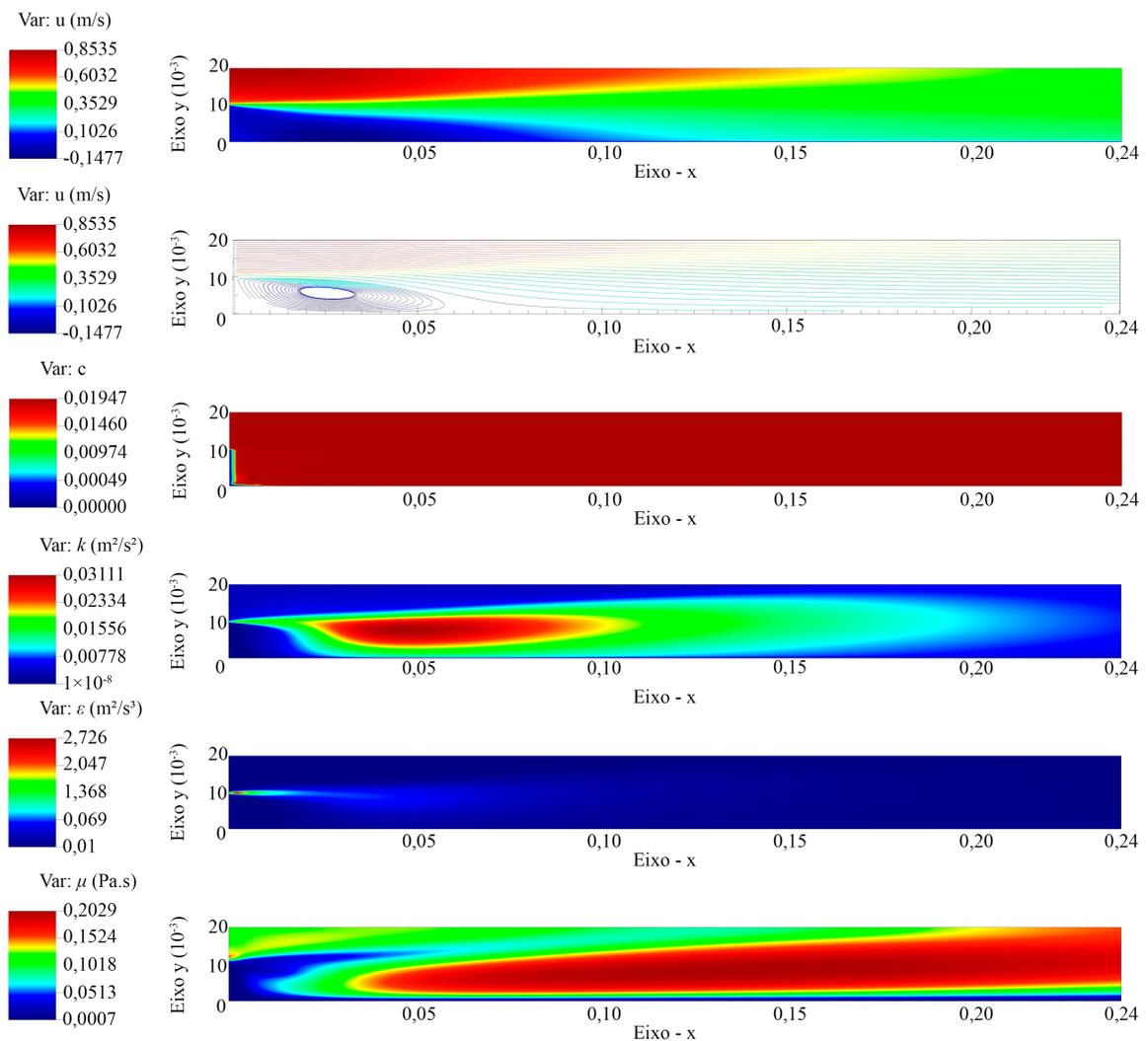


Figura 5.5: Isovalores de parâmetros do escoamento no regime permanente da simulação 1.

Na Fig. 5.5 podem ser observadas as linhas de corrente, o campo de velocidade, escalar, k , ϵ e viscosidade efetiva para um tempo físico de 4,0 s. A partir das linhas de corrente nota-se características específicas do escoamento. Uma dessas características é a formação da recirculação na região próxima à expansão brusca.

A partir da Fig. 5.5 constatou-se um gradiente elevado do escalar apenas em regiões próximas à parede. Essa característica era esperada e é explicada devido ao elevado Sc do fenômeno e baixa difusividade do escalar. A variação do escalar ao longo da parede da tubulação após a expansão brusca foi obtida com a cota Δy_{sca} , para todas simulações. Com base nos valores do escalar calculou-se o perfil do coeficiente de transferência de massa (k_m). Como o k_m está diretamente associado à perda de massa na parede da tubulação, a região que está submetida a maior taxa de perda de massa foi calculada. O perfil do coeficiente de transferência de massa pode ser verificado na Fig. 5.6.

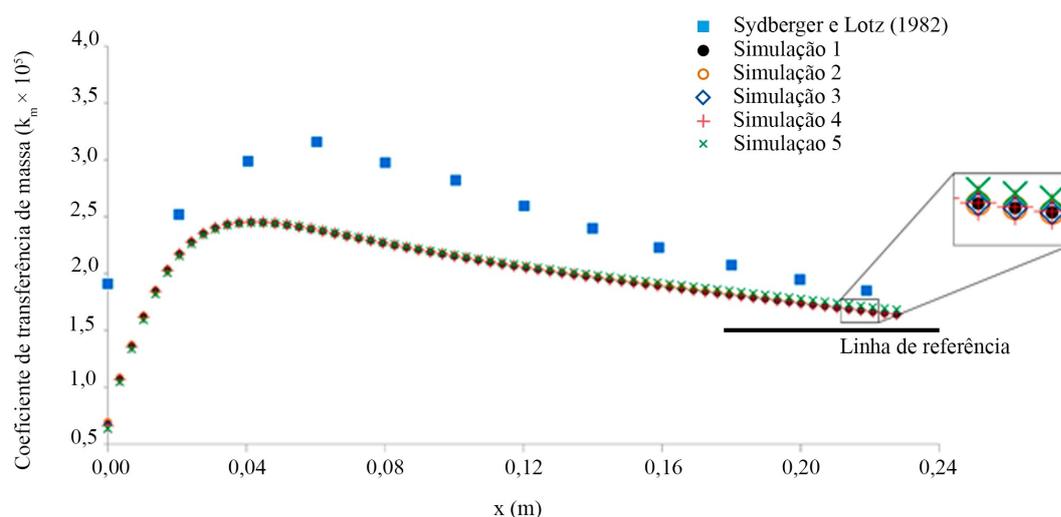


Figura 5.6: Perfil do coeficiente de transferência de massa na tubulação após expansão.

Na Fig. 5.6 observa-se um desvio grande entre os resultados obtidos no MFSim e os dados experimentais de Sydberger e Lotz (1982). O desvio era esperado devido à razão de área das seções de entrada e saída serem diferentes nos escoamentos estudados. No MFSim a razão das seções de entrada e saída é de 2. No estudo experimental de Sydberger e Lotz (1982) a razão das seções de entrada e saída é de 4. Apesar dessa diferença, as simulações realizadas no MFSim apresentam o mesmo Re da seção de saída do estudo experimental. Esse fator justifica o maior coeficiente de transferência de massa para o estudo experimental em regiões próximas à expansão brusca.

Na Fig. 5.6 observa-se um desvio pequeno de k_m conforme o escoamento se desenvolve na tubulação. Além disso, os valores na seção de saída ($x = 0,24$ m) apresentam pequenos desvios considerando dados experimentais do coeficiente de transferência de massa em escoamentos em tubulações retas com o mesmo Re da seção de saída da tubulação. Os valores do k_m do escoamento em uma tubulação reta está representado na Fig. 5.6 pela linha de referência.

Ressalta-se que o perfil do coeficiente de transferência de massa e o perfil de viscosidade turbulenta apresentaram valores de máximos em um local próximo. Os locais de máxima viscosidade turbulenta e escalar $[x_{max}/(L_e/2)]$ foram 4,2875 e 4,2125, respectivamente. Esta característica evidencia a necessidade de aplicação de um modelo de fechamento da turbulência adequado para modelagem do fenômeno da corrosão. Através do perfil de velocidade na direção x , apresentado na Fig. 5.7, calculou-se o comprimento de recolamento do escoamento $L_{rmax}/(L_e/2) = 6,1125$. Os perfis de viscosidade turbulenta e de velocidade podem ser observados na Fig. 5.7.

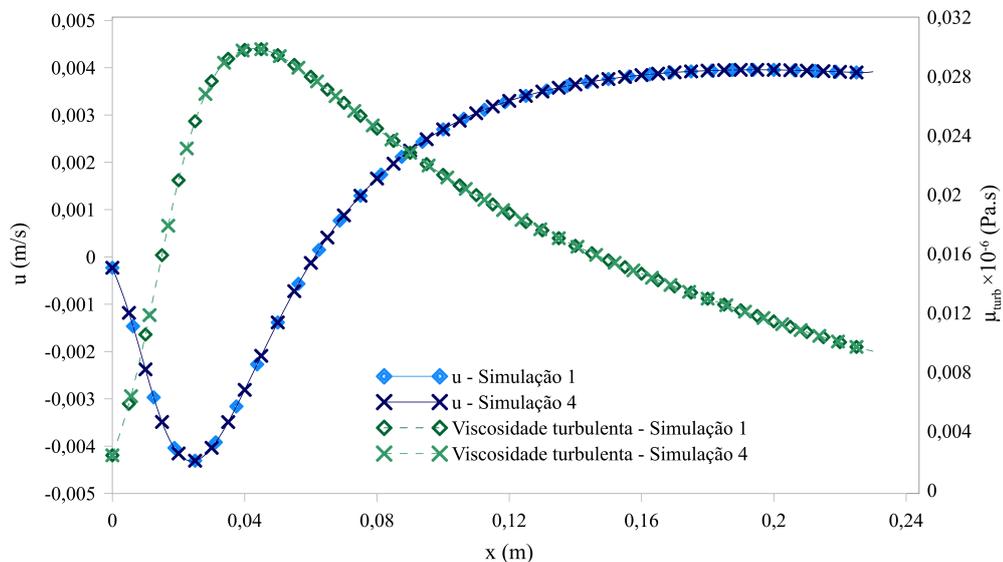


Figura 5.7: Perfil da viscosidade turbulenta e da velocidade na direção x na tubulação após expansão.

Quanto à aplicação do método multinível pode ser verificada na Fig. 5.6 que o k_m apresentou desvios mínimos considerando a resolução das equações da fluidodinâmica em uma malha 16 vezes mais grossa do que a malha da corrosão/turbulência na região parietal. Além disso, verificou-se por meio da Fig. 5.7 perfis com desvios desprezíveis de velocidade e viscosidade turbulenta ao longo da tubulação em uma região próxima à parede com a aplicação do método multinível. Com isso, pode-se afirmar que a resolução das equações da corrosão/turbulência

com um campo de velocidade interpolado na região parietal pode ser aplicada para um estudo detalhado da corrosão em sistemas de expansão brusca. O ganho de eficiência computacional com o método multinível pode ser observado na Tab. 5.5.

Tabela 5.5: Comparação dos tempos computacionais com aplicação do método multinível para simulações de expansão brusca.

Simulação #	1	2	3	4	5
Iterações	512008	256008	128008	64008	32008
Tempo de CPU - u (s)	0,0165	0,0115	0,0087	0,0080	0,0068
Tempo de CPU - v (s)	0,0188	0,0125	0,0094	0,0076	0,0076
Tempo de CPU - pressão (s)	0,3960	0,208	0,0121	0,0080	0,0596
Tempo de CPU - escalar (s)	0,0612	0,0623	0,0667	0,0787	0,10
Tempo de CPU - k (s)	0,0608	0,0598	0,0620	0,118	0,134
Tempo de CPU - ϵ (s)	0,1220	0,121	0,119	0,177	0,238
Tempo de CPU - interpolação (s)	0,0000	0,00070	0,00108	0,00134	0,00138
Tempo de CPU por iteration (s)	0,863	0,644	0,546	0,625	0,696
Tempo total de simulação (horas)	120,26	45,82	19,40	11,10	6,19

O custo de CPU das simulações 1 a 5 na Tab. 5.5 mostram uma redução gradativa do tempo total de simulação conforme a fluidodinâmica é resolvida em uma malha mais grossa. O ganho de eficiência numérico-computacional foi obtido pela redução do tempo computacional para resolver a pressão e as velocidades. Além disso, a aplicação de um passo de tempo restrito à malha da fluidodinâmica favorece a redução do número de iterações necessárias. Ressalta-se que a aplicação da restrição de $CFL = 0,5$ não foi mantida nas simulações com o método multinível. A maior redução de tempo computacional foi de aproximadamente 90% para a Simulação 5.

5.3.2 Escoamento de expansão brusca com $Re = 10.000$ e $Sc = 1,0$

Na seção anterior foram apresentados resultados de simulações computacionais do MFSim de escoamentos turbulentos com corrosão. O método multinível foi analisado e apresentou ganho elevado de eficiência computacional, sem perda de acurácia. Nessas simulações não foi aplicado o método da Fronteira Imersa, pois as condições de contorno do problema foram representadas adequadamente pelas faces do domínio computacional. Para analisar fenômenos da corrosão acelerada pelo escoamento em sistema fluidodinâmicos mais complexos no MFSim

há necessidade de utilização do método da Fronteira Imersa. Com isso, optou-se no presente estudo em avaliar inicialmente o fenômeno da corrosão em um escoamento de expansão brusca considerando um escoamento que requer menor custo computacional. Ressalta-se que com a aplicação do método de Fronteira Imersa um domínio 3D e uma malha computacional com uma menor razão de alongamento foram aplicados.

Desse modo, simulações computacionais foram realizadas para um escoamento de expansão brusca com $Re = 10.000$ e $Sc = 1,0$ para reduzir os custos computacionais requeridos para a modelagem computacional do fenômeno multi-físico. Ressalta-se que o método multinível também pode ser aplicado em escoamentos com espessuras de subcamadas viscosa/corrosão semelhantes. Os modelos de fechamento de turbulência aplicados no presente estudo permitem um cálculo adequado do escoamento considerando valores de $y^+ < 5$. Com isso, as equações de quantidade de movimento linear podem ser resolvidas em malhas com comprimentos maiores do que a malha da corrosão que tem seu comprimento determinado pelo parâmetro $y^+ = 1$, quando $Sc = 1,0$. As principais modificações com relação às simulações computacionais da seção anterior são: a velocidade de menor magnitude e maior difusividade do escalar. Os parâmetros de densidade e viscosidade do fluido foram mantidas, assim como a geometria da tubulação da expansão brusca.

Uma simulação foi realizada com um domínio computacional semelhante ao apresentado na Fig. 5.3. O método multinível não foi aplicado nessa simulação com a finalidade de utilizá-la como referência para comparar os resultados das simulações computacionais com o método da Fronteira Imersa. O domínio computacional das simulações com Fronteira Imersa apresentam $0,256 \times 0,032 \times 0,002 \text{ m}^3$ (Comprimento \times Altura \times Largura). No domínio computacional definiu-se uma região de escoamento complementar com altura de 0,012 m. Este valor de altura foi necessário para evitar interferência do escoamento complementar sob a região de interesse. Informações das simulações realizadas no MFSim com e sem o método da fronteira Imersa podem ser observadas na Tab. 5.6. Um tempo físico total 2,0 s foi definido nas simulações computacionais.

Na Tab. 5.6 estão detalhadas a distância da parede ao centro do primeiro volume na direção y , das malhas nos níveis mais finos para a fluidodinâmica (Δy_{vel}) e para a corrosão/turbulência (Δy_{sca}). É importante ressaltar que a simulação 6 foi realizada sem a Fronteira Imersa e foi utilizada como referência para avaliar o perfil do número de Sherwood (Sh) ao longo da parede nas simulações 7 e 8, os quais tem o método da Fronteira Imersa aplicado. Na Tab. 5.6 foi inserida a

Tabela 5.6: Dados da malha utilizados para análise do método da Fronteira Imersa.

Simulação #	6	7	8
Domínio	$0,256 \times 0,020$	$0,256 \times 0,032 \times 0,002$	$0,256 \times 0,032 \times 0,002$
Malha (Nível Base)	128×80	$128 \times 128 \times 2$	$128 \times 128 \times 2$
Fronteira Imersa	Não	Sim	Sim
Níveis físicos	4	4	5
L_{mn}	0	2	3
Δy_{vel} (μm)	15,625	62,5	62,5
Δy_{sca} (μm)	15,625	15,625	7,8125
Δy ($y^+ = 1$) (μm)	77,37	77,37	77,37

altura de malha necessária para simular o fenômeno com $y^+ = 1$ [Δy ($y^+ = 1$)]. Com base nesse parâmetro afirma-se que a malha utilizada nas simulações são adequadas para modelagem da fluidodinâmica e da corrosão na região da camada limite. A malha computacional da simulação 8 com Fronteira Imersa pode ser observada na Fig. 5.8.

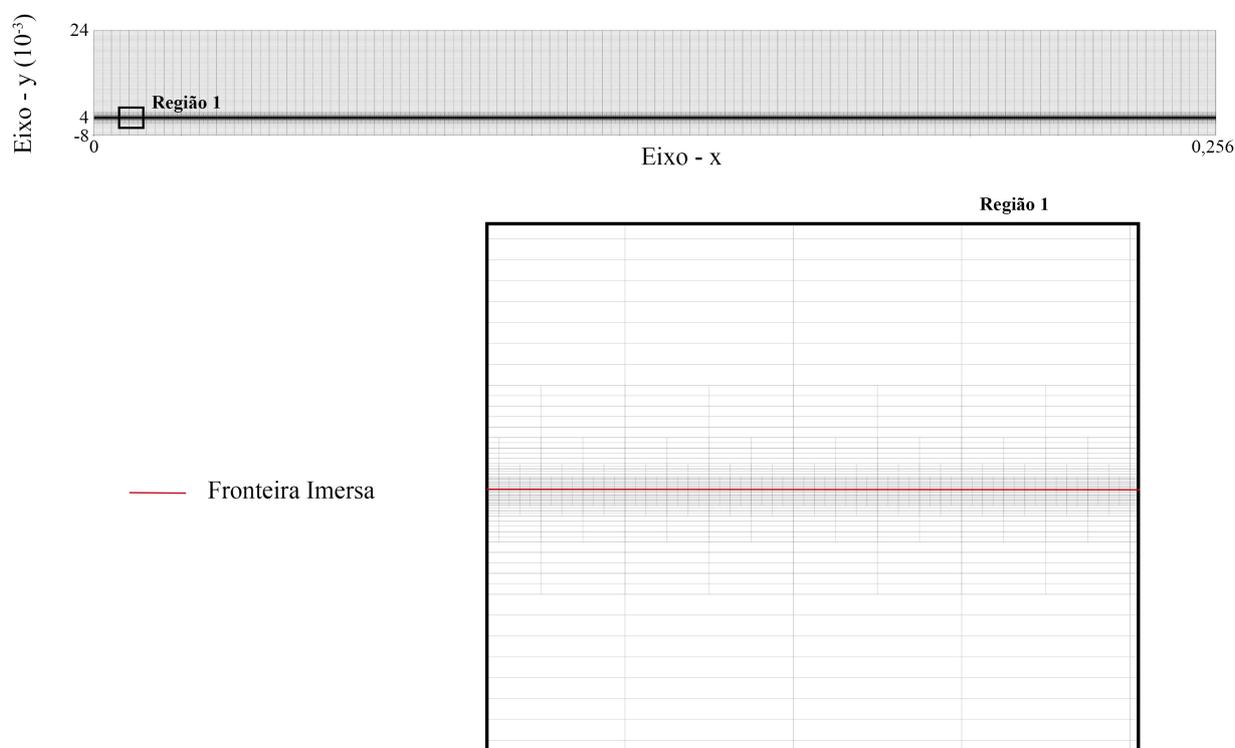


Figura 5.8: Malha computacional aplicada na simulação 8.

Na Fig. 5.8 constata-se que uma quantidade maior de volumes é necessária na direção y para modelagem dos fenômenos nas simulações 7 e 8. Isto ocorre em razão da região do escoamento complementar. É importante ressaltar que as mesmas condições de contorno aplicadas nas simulações da seção anterior foram adaptadas para a simulação com Fronteira Imersa. Na face sul do domínio computacional definiu-se uma condição Neumann para a velocidade e para o escalar. Além disso, na face sul definiu-se uma pressão nula. Na face oeste em $x < 0$ definiu-se um valor nulo de velocidade e escalar, e a condição Neumann foi imposta para a pressão. Além disso, o modelo de fechamento da turbulência aplicado é o *LRN* k - ϵ com as funções de amortecimento propostas por Abe, Kondoh e Nagano (1994).

Os métodos numéricos aplicados nas simulações no MFSim com o método da Fronteira Imersa foram: o método de passo fracionado para o acoplamento pressão-velocidade, o método Barton para discretização espacial dos termos advectivos de cada equação de balanço, o método multigrid-multinível para obter a solução das velocidades e do escalar, o SIP para obter a solução da pressão. Ressalta-se que o método PETSc foi utilizado para obter a solução da pressão na simulação 6. O critério de convergência de 10^{-6} foi definido para resolver as equações de balanço do fenômeno. Ressalta-se que as simulações foram realizadas com processamento paralelo, sendo que foram utilizados 32 processos e a divisão do domínio computacional na direção x .

Os resultados obtidos nas simulações 6 e 7 podem ser observados nas Figs. 5.9 e 5.10, respectivamente. Na Fig. 5.9 estão detalhados: as linhas de corrente, o campo da velocidade (u), escalar respectivo à corrosão (c), k , ϵ e a viscosidade efetiva. Por meio dos isovalores de propriedades do escoamento e da corrosão apresentados nas Figs. 5.9 e 5.10 podem ser observados os mesmos padrões obtidos nas simulações com e sem o método da Fronteira Imersa. Ressalta-se que mesmo com a aplicação do método multinível foi possível obter resultados com elevada acurácia considerando regiões distantes da região parietal. Além disso, na região complementar não foi observada a formação de um escoamento que influenciasse na região de interesse.

Quanto à corrosão, o perfil do Sh foi avaliado na região parietal nas simulações 7 e 8 considerando uma distância à parede de $62,5 \mu\text{m}$. O Δy_{sca} não foi considerado nas simulações devido ao método da Fronteira Imersa que é utilizado no MFSim. Entretanto, a distância definida apresenta-se no interior na região ($y^+ < 1$) e pode ser utilizada para avaliação do fenômeno de transferência de massa. Ressalta-se que na simulação 6 o Δy_{sca} foi aplicado para obter o perfil de Sh . Na Fig. 5.11, percebe-se os perfis de Sh ao longo da tubulação após a expansão brusca.

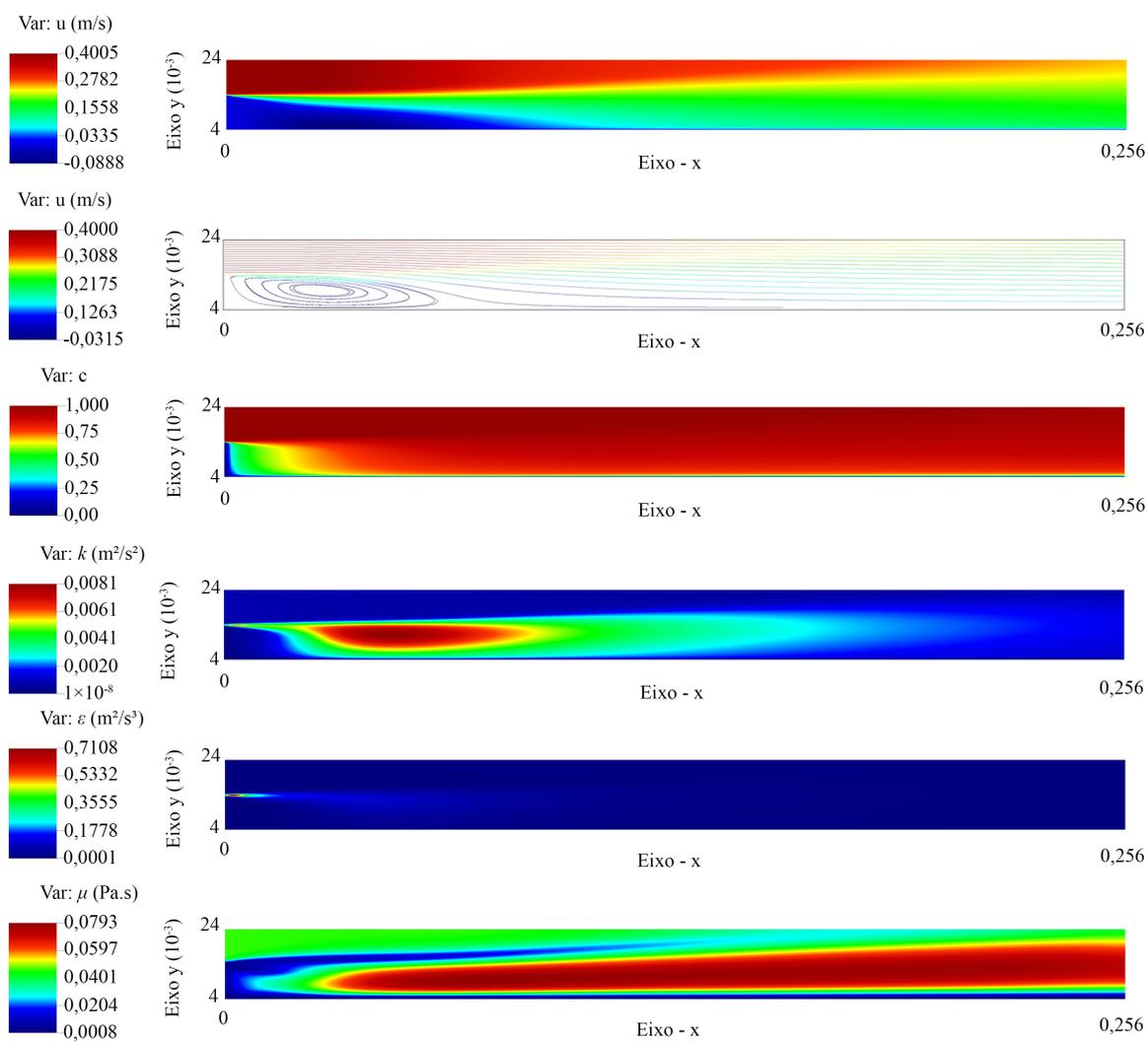


Figura 5.9: Isovalores de propriedades do fenômeno de expansão brusca na simulação 6.

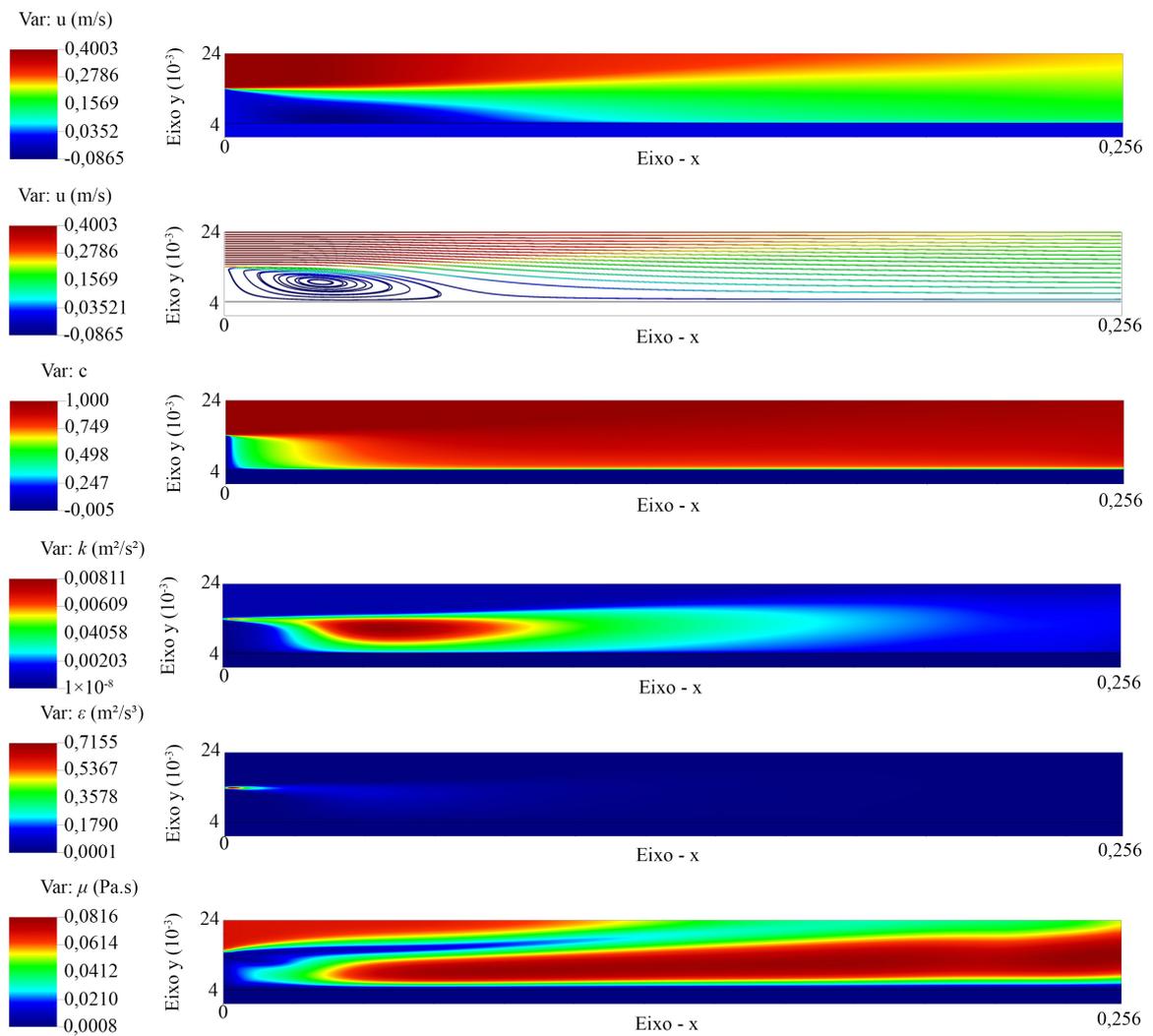


Figura 5.10: Isovalores de propriedades do fenômeno de expansão brusca nas simulação 7.

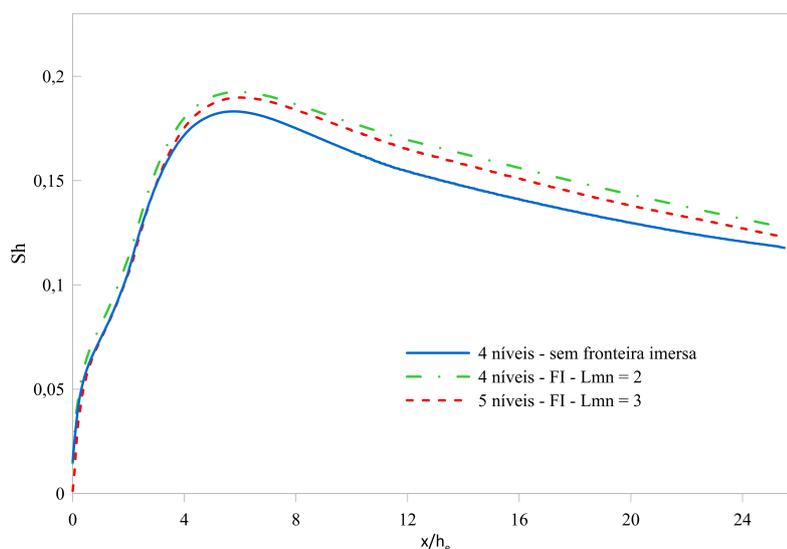


Figura 5.11: Perfil de Sh ao longo da tubulação após a expansão brusca das simulações 6, 7 e 8.

Por meio dos perfis de Sh detalhados na Fig. 5.11 observa-se pequenos desvios na região de recirculação. Na região de maior intensidade da corrosão, o Sh apresenta desvios menores do que 5% para as simulações 6 e 8. Após o ponto de recolamento, o desvio de Sh é mantido em 5%.

Portanto, a partir dos resultados obtidos observa-se que a modelagem do fenômeno com o método da Fronteira Imersa possibilita analisar problemas de corrosão com acurácia moderada. Além disso, constata-se que um nível físico adicional deve ser considerado para obter uma estimativa de taxa de corrosão na parede com menores desvios.

5.4 Jato de impacto confinado

Nesta seção são apresentados os resultados de simulações computacionais do escoamento de jatos de impacto com a aplicação do método multinível. A escolha desse problema se deve à presença deste escoamento em aplicações industriais de corrosão.

Assim como observado no estudo do fenômeno de corrosão em sistemas fluidodinâmicos de expansão brusca, em sistemas de jato de impacto é observada a influência direta do escoamento na taxa de corrosão de componentes de sistemas industriais. Dentre as principais aplicações industriais onde observa-se a indução de corrosão com o escoamento podem ser citados: os tanques de mistura (HELAL et al., 2018), a corrosão do aço em salmouras contendo o gás CO_2 dissolvido em problemas da indústria de óleo e gás (ORAZEM; CARDOSO-FILHO; TRIBOLLET, 2001), e sistemas fluidodinâmicos das plantas nucleares (WATANABE; MORITA, 2022).

Na literatura são utilizados para análise de escoamentos turbulentos de jatos de impacto os modelos LES (*Large Eddy Simulation*) e RANS (*Reynolds Averaged Navier Stokes*). Os resultados obtidos nos estudos de Sensitization... (2022), Debnath, Khan e Ahmed (2020) e Huang et al. (2019) mostram elevada acurácia na modelagem computacional do escoamento considerando o modelo de turbulência $k-\omega$ SST. Com isso, no presente estudo o modelo de fechamento URANS (*Unsteady Reynolds Averaged Navier Stokes*) $k-\omega$ SST foi aplicado para analisar o escoamento do jato de impacto com presença da corrosão.

A análise do escoamento do jato de impacto foi realizada em duas etapas. Em uma primeira etapa foi avaliada a acurácia do modelo de fechamento na modelagem da fluidodinâmica. Na segunda etapa foi considerada a análise de um escoamento turbulento para estudos do fenômeno de transferência de massa. Na literatura não foi encontrado um estudo com análise detalhado dos fenômenos de fluidodinâmica e da transferência de massa de forma simultânea. Com isso, as duas etapas foram realizadas separadamente, sendo que o método multinível foi avaliado somente na análise da corrosão. É importante observar que os escoamentos utilizados como referência no presente estudo foram objeto de análise dos fenômenos de transferência térmica. No presente estudo optou-se por realizar simulações com parâmetros de problemas de transferência térmica pois as equações de balanço que representam os fenômenos de transferência térmica e corrosão são semelhantes. Em outras palavras, considerando os parâmetros adimensionais aplicados, um fenômeno da corrosão acelerada pelo escoamento poderia ser associado ao fenômeno simulado. Além disso, na literatura o estudo de problemas de transferência térmica é discutido de forma mais ampla e mais detalhada que os estudos associados à corrosão induzida pelo escoamento em sistemas de jato de impacto.

5.4.1 Análise da fluidodinâmica

Na etapa de análise da fluidodinâmica de sistemas de jato de impacto um escoamento com $Re = 20000$ foi simulado. Os resultados foram comparados com dados experimentais de Ashforth-Frost, Jambunathan e Whitney (1997) e resultados de simulações computacionais de Chen e Modi (1999). O fenômeno de jato de impacto, em geral, depende dos parâmetros: número de Reynolds na seção de entrada, número de Schmidt e o adimensional da relação H/B (altura/diâmetro do jato). Considerando as características do escoamento, o domínio computacional foi definido considerando um plano de simetria. Uma representação do domínio computacional pode ser observada na Fig. 5.12.

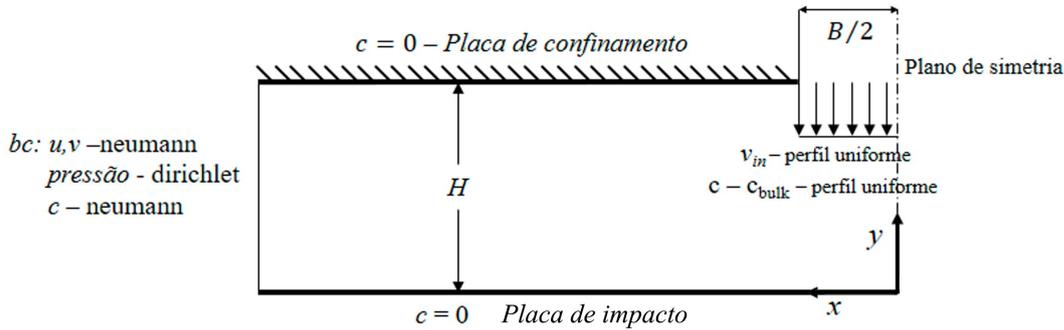


Figura 5.12: Representação do domínio computacional do jato de impacto confinado.

Os limites do domínio computacional foram $(0,0 - 0,112; 0,0 - 0,014)$ m em (x,y) . A condição de simetria foi aplicada em $x = 0,0$ m. Quanto às condições de contorno impostas para a velocidade definiu-se: um perfil uniforme de velocidade do jato na entrada ($v_e = -4,8$ m/s) e uma condição de Neumann para a velocidade em $x = 0,112$ m. Como a simulação foi realizada em um domínio pseudo2D, a velocidade na direção z foi definida nula em todas as faces. A condição de contorno imposta para a pressão foi Neumann para todas as faces, com exceção da região de saída.

Como mencionado anteriormente, no presente estudo optou-se pelo modelo $k-\omega$ SST. Este modelo de fechamento da turbulência foi escolhido pois permite calcular com acurácia tanto o escoamento na região de camada limite quanto em regiões mais distantes da parede. Na região de saída ($x = 0,112$ m) foi imposta a condição Neumann para k e ω . Além disso, na região de entrada do jato, k e ω foram calculados com as Eqs. 5.11 e 5.12:

$$k = 1,5 (I * v_e)^2, \quad (5.11)$$

$$\omega = \frac{k^{0,5}}{C_\mu^{0,25} L}, \quad (5.12)$$

sendo que I e L representam a intensidade turbulenta e o comprimento característico, respectivamente. Na equação 5.11, foi definida uma intensidade turbulenta de 4%. Na equação 5.12, L foi calculado com base no comprimento do jato na entrada (B) e $C_\mu = 0,09$.

Nas regiões de parede, k foi definido nulo e o ω foi calculado a partir da Eq. 5.13:

$$\omega_p = \frac{60v_e}{0,075d_p}, \quad (5.13)$$

em que ν_e e d_p representam a viscosidade cinemática efetiva e a distância à parede, respectivamente.

Na simulação computacional do fenômeno não foi considerada a aplicação do método de refinamento adaptativo de malha. A região do nível físico mais fino foi definida ao longo de toda placa de impacto no domínio pseudo 2D. Além disso, no nível físico mais fino foram definidos um total de 14 volumes na direção normal à parede. A simulação foi realizada com 6 níveis físicos com uma divisão $256 \times 64 \times 1$ no nível físico base. A malha aplicada nas simulações no MFSim pode ser observada na Fig. 5.13. O número de volumes requeridos nas simulações foi de 1,98 milhões.

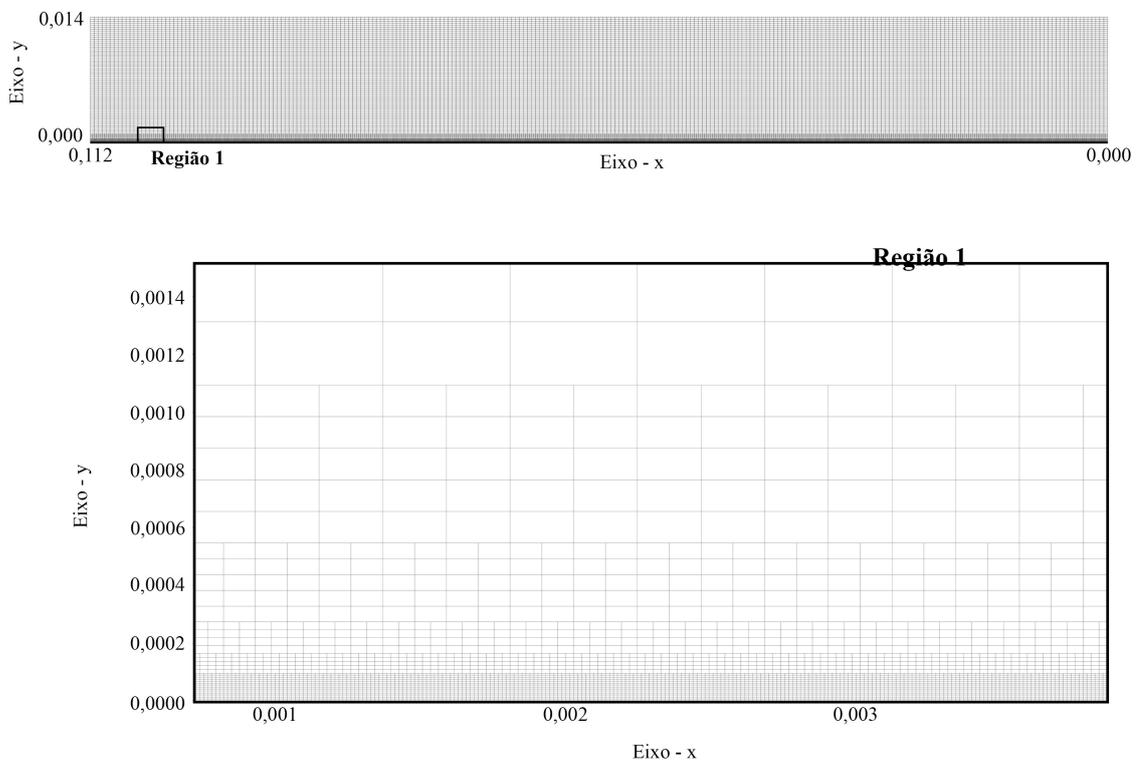


Figura 5.13: Malha computacional utilizada nas simulações para o caso de jato de impacto confinado.

Os métodos numéricos aplicados nas simulações com o MFSim foram: o método de passo fracionado para o acoplamento pressão-velocidade, o método Barton para discretização espacial dos termos advectivos de cada equação de balanço, o método multigrid multinível para obter a solução das velocidades e do escalar, o PETSc para obter a solução da pressão. O critério de convergência de 10^{-6} foi definido para resolver as equações de balanço do fenômeno. Ressalta-se que a simulação foi realizada com processamento paralelo, com 32 processos divididos na direção x .

O escoamento foi resolvido considerando um tempo físico total de 0,5 s. O escoamento convergiu para o regime permanente permitindo a comparação direta dos campos de velocidade para validação. Os campos de propriedades referentes à fluidodinâmica e turbulência podem ser observados na Fig. 5.14.

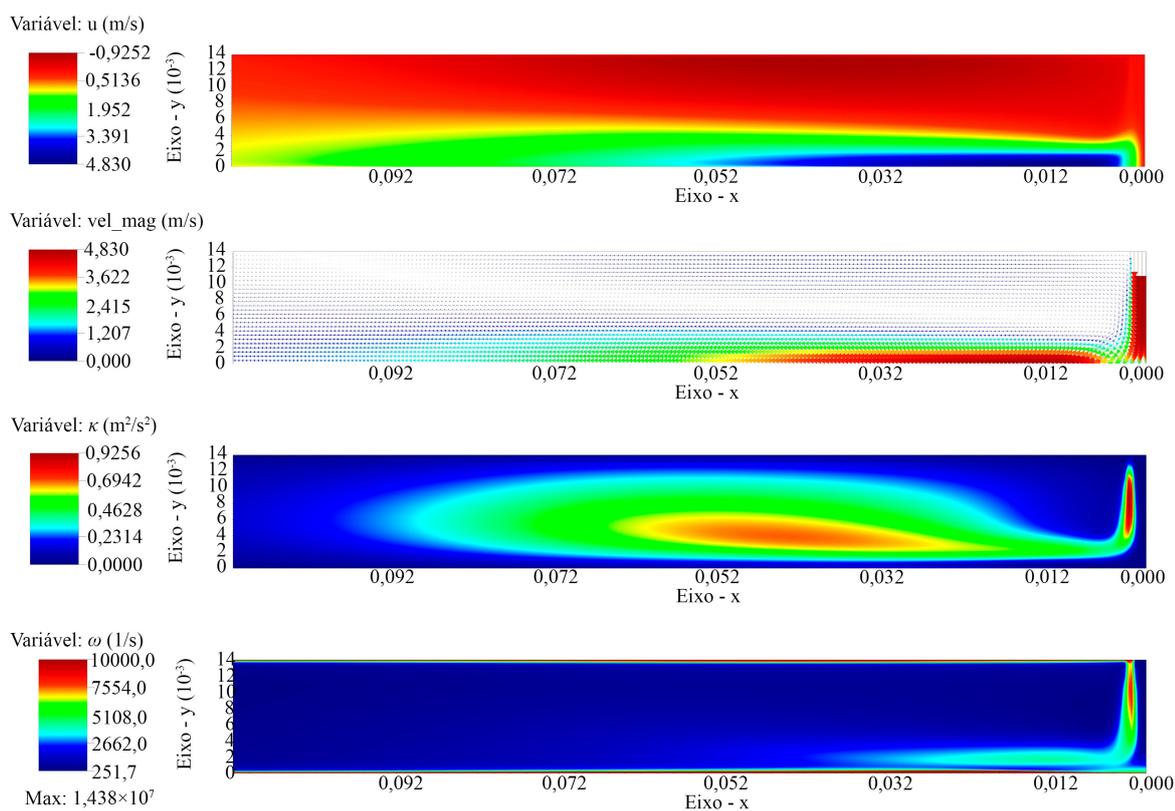


Figura 5.14: Campo de velocidade, k e ω no regime permanente no escoamento do jato de impacto confinado.

A partir do campo velocidades no regime permanente mostrado na Fig. 5.14, o fenômeno do jato de impacto foi dividido em: zona de núcleo potencial, zona de impacto (estagnação), região de desenvolvimento de camada limite. A zona potencial é observada no bocal de saída do jato. Nessa região a velocidade e a intensidade turbulenta são aproximadamente constantes e iguais aos valores definidos na entrada. A região de impacto é caracterizada pela modificação de direção do escoamento da direção axial para a radial. Por último, na terceira região observa-se o desenvolvimento do escoamento apenas na direção radial.

A validação do fenômeno foi realizada considerando a velocidade na direção x (u) ao longo de uma distância normalizada (x/b). Os valores de x/b foram determinados tendo como referência a linha de simetria como pode ser observado na Fig. 5.15.

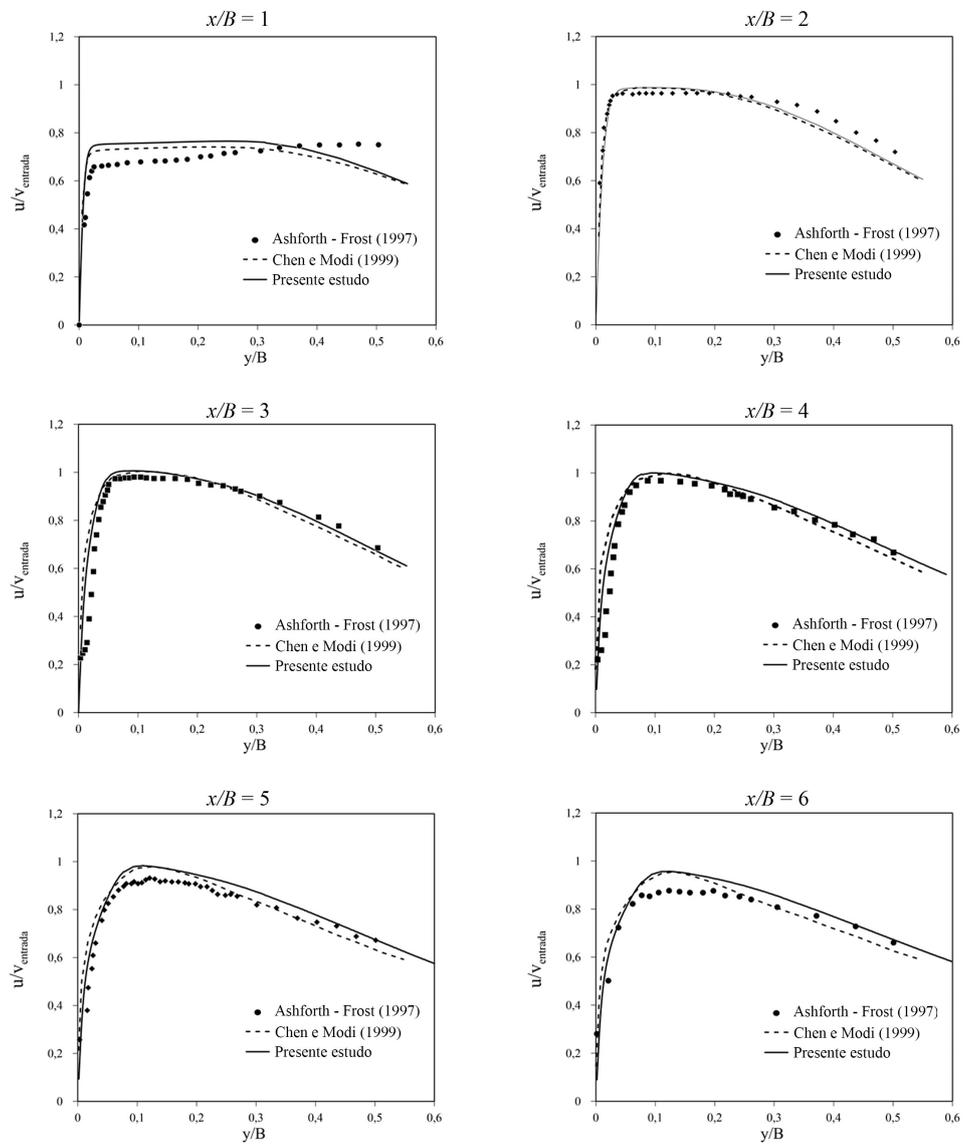
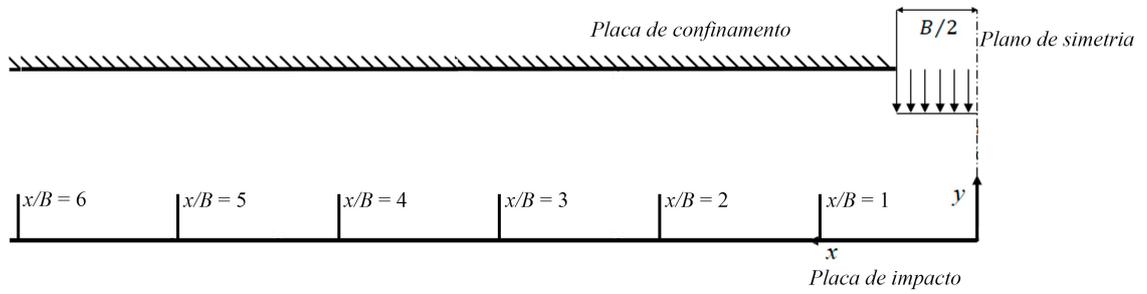


Figura 5.15: Resultados do perfil de velocidade na direção x para diferentes seções (x/B).

Na Fig. 5.15 observam-se desvios moderados do perfil de velocidade em $x/b=1$ considerando como referência dados do estudo experimental de Ashforth-Frost, Jambunathan e Whitney (1997). Apesar disso, um desvio pequeno do perfil de velocidade foi obtido comparando os resultados do presente estudo com os calculados nas simulações de Chen e Modi (1999), que utilizou o modelo $k-\omega$. Nas demais regiões, pequenos desvios do perfil de velocidade podem ser observados tanto para os dados experimentais de Ashforth-Frost, Jambunathan e Whitney (1997), quanto para os resultados obtidos de Chen e Modi (1999). Quanto ao perfil de velocidade na região de desenvolvimento de camada limite, observa-se que o modelo $k-\omega SST$ proporciona resultados com acurácia moderada, sendo que os maiores desvios estão presentes na região de estagnação. Esta característica explica os desvios referentes ao perfil do escalar na região parietal observados nas simulações que serão explicadas na próxima seção.

5.4.2 Análise da corrosão

Na segunda etapa foram realizadas simulações computacionais de jatos de impacto confinados e turbulentos que apresentam: $Re = 11000$, $Sc = 0,72$ e $H/B = 5,0$. O escoamento foi analisado experimentalmente por Alkire e Ju (1987) e posteriormente usado para validação de diversos estudos: Chen e Modi (1999) e Aravinth (2000). Quanto ao modelo de fechamento aplicado, considerou-se o modelo *URANS* $k-\omega SST$. Na modelagem do transporte advectivo-difusivo do escalar, respectivo à corrosão, considerou-se um Schmidt turbulento constante ($Sc_t=0,9$).

As mesmas condições de contorno detalhadas na última seção foram utilizadas neste escoamento. Na região de entrada k e ω foram obtidos a partir das Eqs. 5.11 e 5.12. Nas regiões de parede, k foi mantido nulo e ω foi calculado com a Eq. 5.13. Na região de saída ($x = 0,112$ m) foi imposta a condição Neumann para k e o ω . Para o escalar, foi definido um perfil uniforme na entrada e Neumann na região de saída. Além disso, foi definido um valor nulo do escalar nas regiões de parede.

Os limites do domínio computacional foram $(0,0245 - 0,112; 0,0 - 0,0175)$ m em (x,y) . Na simulação computacional do fenômeno, o método de refinamento adaptativo de malha não foi aplicado. Assim como nas simulações da seção anterior, a região do nível mais fino foi definida ao longo de toda placa de impacto no domínio pseudo-2D. Além disso, no nível físico mais fino foram definidos um total de 8 volumes na direção normal à parede. No software MFSim foram definidos um total de 5 níveis físicos com uma divisão no nível físico base

200×160×1. Com base nessas informações, uma malha com 1,36 milhões de volumes foi definida para simular o fenômeno multi-físico no MFSim. Os mesmos métodos numéricos e critérios de convergência detalhados na seção anterior foram utilizados para simular o escoamento considerando um tempo físico de 0,8 s.

O método multinível foi avaliado considerando dois métodos distintos. O primeiro método aplicado foi o mesmo utilizado para a modelagem do escoamento sobre uma esfera e também para o escoamento de expansão brusca. Ou seja, em todo passo de tempo as equações de balanço da fluidodinâmica e da corrosão são resolvidas com malhas distintas na região parietal, sempre considerando características específicas de cada um dos fenômenos. Nesse método, o campo de velocidade é interpolado para níveis físicos superiores para resolver a equação de balanço do escalar passivo. É importante ressaltar que apenas o campo de velocidade foi interpolado para os níveis físicos mais finos. As equações de balanço das propriedades referentes à turbulência (k e ω) são resolvidas com a mesma malha da corrosão. O fluxograma que representa esta estratégia está apresentado na Fig. 4.5.

No segundo método foi considerada a resolução de todas as equações de balanço em malhas mais grossas até o escoamento alcançar o regime permanente. Após apresentar o regime permanente, o código calcula o fenômeno da corrosão/turbulência em uma malha mais fina e adequada para obter o gradiente do escalar com acurácia na região de camada limite do fenômeno de transferência de massa. É importante observar que após atingir o regime permanente, as equações respectivas à fluidodinâmica continuam sendo calculadas em uma malha mais grossa e adequada para resolver a fluidodinâmica. O campo de velocidades no nível físico mais fino é obtido pela interpolação do campo de velocidades da malha grosseira, para resolver a equação de balanço do escalar passivo (corrosão), e de k e ω (turbulência) na malha mais fina. Esta estratégia está representada no fluxograma da Fig. 4.6.

A aplicação do método é justificada devido ao passo de tempo das simulações do escoamento de jato de impacto serem limitadas consideravelmente pela malha aplicada e o campo de velocidade apresentar maior magnitude na região parietal em comparação ao escoamento de expansão brusca. Como o escoamento converge para um regime permanente com o modelo de fechamento da turbulência aplicado, optou-se por definir malhas mais grosseiras nos passos de tempo até a convergência ao escoamento médio, para aumentar o passo de tempo de cada iteração, sempre respeitando o critério de $CFL = 0,5$. Com essa metodologia, o CFL é mantido em uma faixa adequada para modelagem dos fenômenos, sem que o código divergisse. Os

resultados obtidos pelos dois métodos multiníveis aplicados são idênticos e foram analisados considerando parâmetros da fluidodinâmica e da corrosão.

Os resultados obtidos por meio do MFSim foram comparados por meio das variáveis: número de Sherwood (Sh) e a velocidade normalizada pela velocidade de entrada do jato (u/v_e). O perfil dos dois parâmetros foram obtidos ao longo da placa de impacto considerando uma distância até a parede de $\Delta y_{Ltop}/2$. Com base nesses parâmetros foram realizadas 3 simulações para avaliar a convergência de malha e 3 para análise do método multinível. Nas Figs. 5.16 e 5.17 pode ser observado os perfis de Sh e u/v_e ao longo da placa de impacto considerando malhas com uma divisão de $200 \times 160 \times 1$ no nível físico base e um total de 3, 4 e 5 níveis físicos (npl).

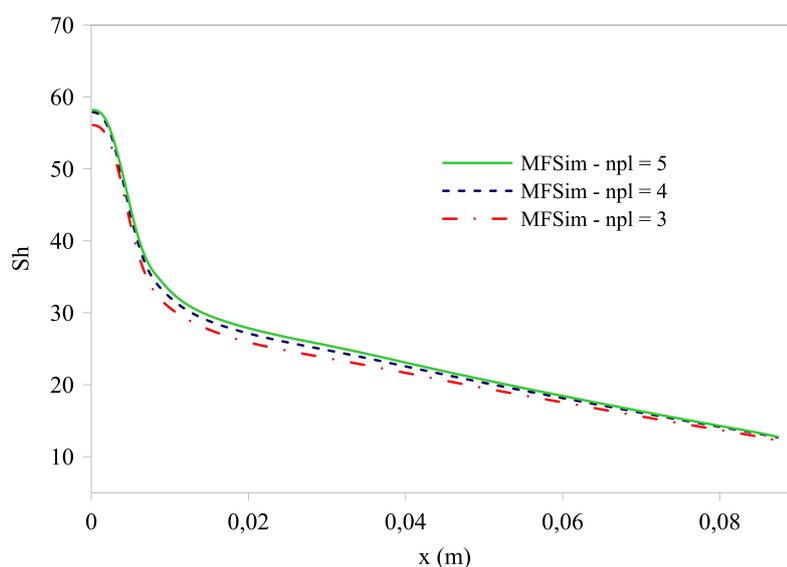


Figura 5.16: Análise de convergência de malha - Sh .

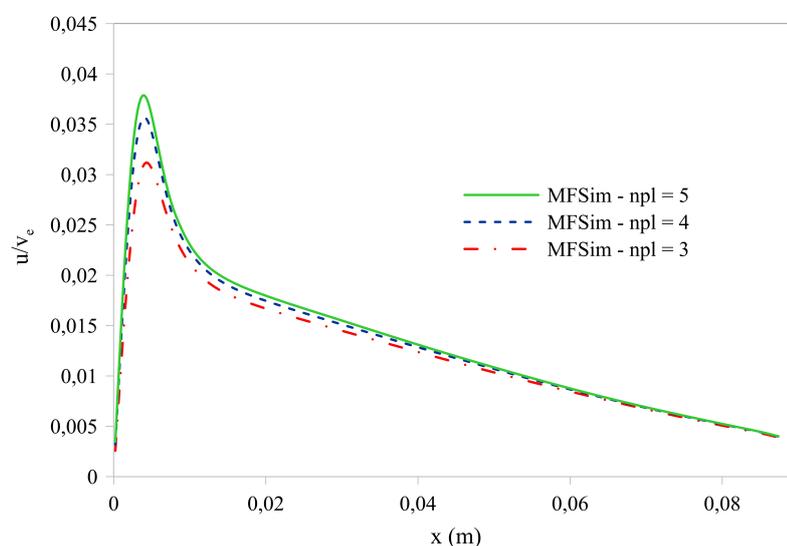


Figura 5.17: Análise de convergência de malha - u/v_e .

Por meio dos resultados apresentados na Figs. 5.16 e 5.17 afirma-se que um total de 4 níveis físicos (npl) são suficientes para modelagem do fenômeno multi-físico. Para o fenômeno de transferência de massa, observou-se desvios de Sh menores que 1% nas simulações com $npl = 4$ e $npl = 5$. Além disso, a velocidade normalizada apresentou desvios menores que 5% na região de pico, considerando as simulações $npl = 4$ e $npl = 5$.

Com base na malha de 5 níveis físicos, 3 simulações foram realizadas considerando o método multinível. Ressalta-se que os dois métodos multiníveis detalhados anteriormente foram testados e retornaram perfis com desvios desprezíveis das propriedades respectivas à corrosão e à fluidodinâmica. Nas 3 simulações em que o método multinível (Fig. 4.6) foi aplicado, considerou-se uma diferença de até 3 níveis físicos entre a fluidodinâmica e a corrosão/turbulência. Além disso, nas simulações em que a corrosão/turbulência são resolvidas inicialmente com a malha grosseira foi considerada uma malha 8 vezes mais grossa em comparação à malha do nível físico mais fino. A diferença de níveis físicos mais finos na resolução das equações de balanço (corrosão/turbulência e fluidodinâmica) será representada por L_{mn} . Nas Figs. 5.18 e 5.19 estão detalhados os resultados do perfil de Sh e de u/v_e com a aplicação do método multinível da Fig. 4.6.

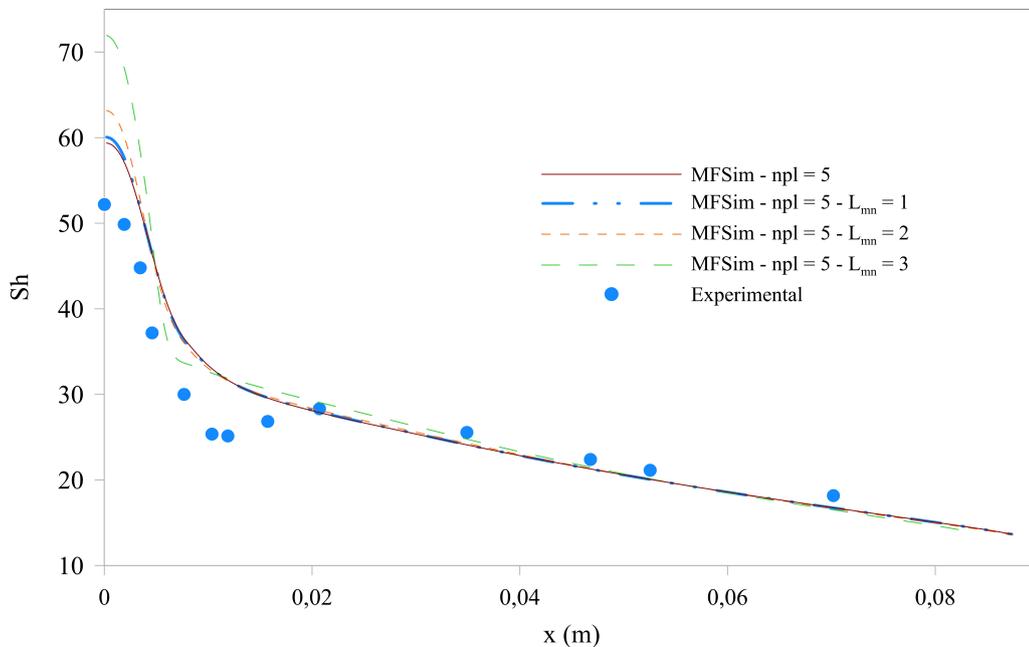


Figura 5.18: Perfil de Sh ao longo da placa de impacto nas simulações com e sem aplicação do método multinível.

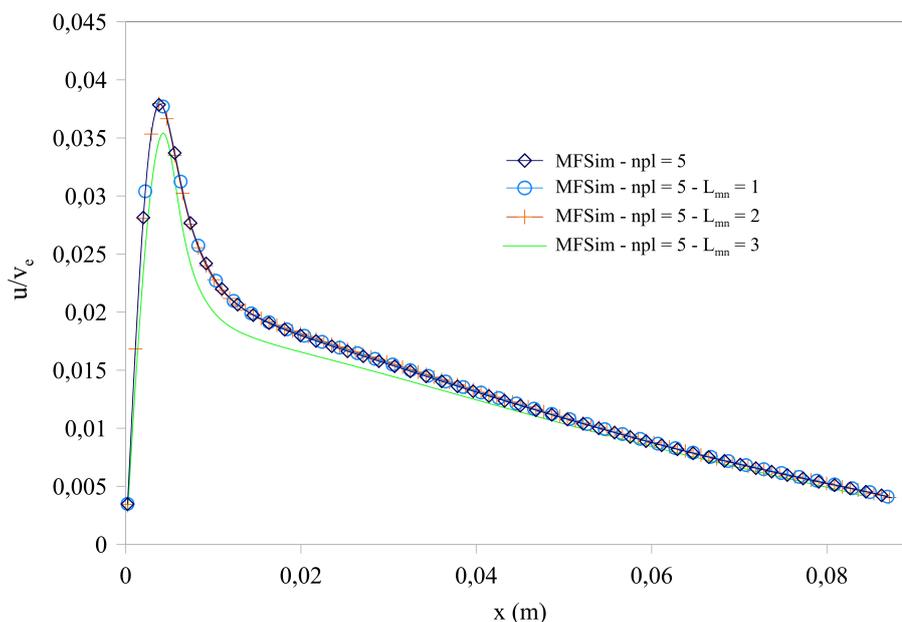


Figura 5.19: Comparação do perfil da velocidade normalizada ao longo da placa de impacto nas simulações com e sem aplicação do método multinível.

Considerando dados experimentais de Alkire e Ju (1987) observa-se na Fig. 5.18 que os valores de Sh apresentam desvios moderados na região de estagnação. Na região de desenvolvimento de camada limite os desvios de Sh são menores que 2%. Os desvios moderados de Sh na região de estagnação podem ser explicados pela dificuldade do modelo $k-\omega$ SST em calcular o escoamento na região. Esta característica foi observada nos resultados numéricos apresentados na seção anterior.

Com relação à aplicação do método multinível nota-se na Fig. 5.18 que o Sh apresentou desvios maiores que 10% na região de estagnação para a simulação com $L_{mn} = 3$. O perfil de Sh apresenta desvios moderados considerando um L_{mn} de até 2. Na região de desenvolvimento de camada limite todas as simulações com multinível retornaram desvios de Sh menores que 1%, tendo como referência a simulação com $L_{mn} = 0$.

A partir da Fig. 5.19, observa-se que o método de interpolação da velocidade apresentou desvios desprezíveis no campo de velocidade na região parietal considerando um L_{mn} de até 2. Com base nos resultados da Fig. 5.19, pode-se afirmar que a aplicação do método multinível é satisfatória considerando a resolução das equações de balanço da fluidodinâmica em uma malha 4 vezes mais grossa do que a malha computacional utilizada para resolver as equações de balanço da corrosão e da turbulência (k e ω). Em outras palavras, o perfil de velocidade ao longo da placa de impingimento apresenta desvios desprezível quando a fluidodinâmica é resolvida com uma malha 2 e 4 vezes mais grosseira do que a malha da corrosão na região parietal. Além

disso, o perfil de velocidade apresenta pequenos desvios quando a malha da fluidodinâmica é resolvida em uma malha 8 vezes mais grossa, que resultou em maiores desvios de Sh na região de estagnação.

A análise do custo computacional do método multinível foi realizada com: a mesma malha computacional de 5 níveis físicos, L_{mn} máximo de 3, tempo físico total de 0,01 s e processamento paralelo com 10 divisões na direção x . Os tempos computacionais médios por iteração de cada simulação podem ser observados na Tab. 5.7. O custo computacional das simulações com o método multinível que tem como estratégia resolver todas as equações de balanço em uma malha mais grosseira nos passos de tempo iniciais foi analisada considerando os resultados da simulação L_{mn}^* .

Tabela 5.7: Comparação dos tempos computacionais com aplicação do método multinível para simulações do jato de impacto.

Simulação	$L_{mn} = 0$	$L_{mn} = 1$	$L_{mn} = 2$	$L_{mn} = 3$	$L_{mn}^* = 3$
Tempo CPU - u (s)	0,0334	0,0216	0,0156	0,0119	0,0104
Tempo CPU - v (s)	0,0301	0,0193	0,0119	0,0087	0,0104
Tempo CPU - pressão (s)	0,4186	0,2365	0,1333	0,0928	0,0909
Tempo CPU - escalar (s)	0,3130	0,3082	0,3096	0,3075	0,1453
Tempo CPU - tur1 (s)	0,3130	0,3085	0,3091	0,3070	0,1442
Tempo CPU - tur2 (s)	0,3532	0,3471	0,3480	0,3466	0,1697
Tempo CPU - iteração (s)	1,7244	1,4629	1,3449	1,2780	0,7439
Passo de tempo (s)	$6,84 \times 10^{-6}$	$6,84 \times 10^{-6}$	$6,84 \times 10^{-6}$	$6,84 \times 10^{-6}$	$5,47 \times 10^{-5}$

Na Tab. 5.7 é constatada a redução do tempo de CPU requerido para calcular cada uma das equações de balanço das simulações numéricas. O aumento de L_{mn} resultou na redução do tempo computacional para resolver as equações de momentum e pressão. Entretanto, o tempo de CPU manteve-se constante com o aumento L_{mn} para as equações do escalar passivo da corrosão, k e ω . Uma redução de 25% do tempo computacional pode ser observada para um $L_{mn} = 3$.

Para o método multinível referente à simulação $L_{mn}^* = 3$ pode ser verificada uma redução de aproximadamente 56% do tempo computacional considerando apenas o tempo de CPU médio por iteração. Como o passo de tempo é 8 vezes maior que o valor o passo de tempo das demais simulações, a redução de custo computacional para análise de fenômenos de corrosão de placa de impacto apresentam uma diminuição de 90% no tempo de CPU. Ressalta-se que o tempo

físico simulado deve ser maior para este método multinível, pois um tempo computacional adicional deve ser considerado para convergência das propriedades do fenômeno multi-físico. Na simulação numérica com $L_{mn}^* = 3$ foi necessário um tempo físico adicional de 0,2 s para que o campo das propriedades referentes ao fenômeno multi-físico convergisse novamente para o regime permanente.

Com base nos resultados, pode-se afirmar que a aplicação do método multinível é eficaz para simular escoamentos turbulentos de jato de impacto com corrosão com $Sc = 0,72$. Com o método multinível foi possível obter resultados referentes à corrosão com pequenos desvios de Sh e uma redução de tempo computacional de aproximadamente 90%.

5.5 Escoamento ao redor de uma Esfera

Nesta seção são discutidos os resultados de simulações computacionais do escoamento ao redor de uma esfera considerando a aplicação do método multinível, com fronteira imersa.

O escoamento sobre uma esfera foi selecionado, pois este é utilizado para testes de validação em códigos de desenvolvimento que também analisam métodos que propõem a resolução de fenômenos multi-físicos com estratégias parecidas com as que foram aplicadas no presente estudo. O escoamento ao redor de uma esfera analisado é um escoamento menos complexo devido ao baixo número de Reynolds ($Re = 100$). Entretanto, o problema exige um custo computacional elevado, pois não foram considerados modelos de fechamento da turbulência. Com relação à fluidodinâmica, o fenômeno pode ser definido como um escoamento parietal, com descolamento e formação de estruturas recirculantes após a esfera e apresentam convergência para um regime permanente. A validação do código MFSim e análise do método multinível foi realizada considerando um número de Schmidt ou Prandtl de 1 e 10. A redução do custo computacional e acurácia na resolução do fenômeno físico foram analisadas.

Os parâmetros do escoamento para a simulação computacional do fenômeno foram baseadas no estudo computacional realizado por Panda et al. (2019). A validação dos resultados obtidos neste escoamento de convecção forçada foi feita por correlações empíricas obtidas experimentalmente por Ranz e Marshall (1952) e Whitaker (1972). As correlações são bem estabelecidas na literatura, consideram problemas de transferência de massa e o cálculo do número de Nusselt (Nu) em função do Re e Pr . É importante ressaltar que os parâmetros adimensionais analisados seriam respectivos ao número Sherwood (Sh), o qual é obtido em função do Re e do Sc para

o fenômeno da corrosão. Como as equações de balanço aplicadas para resolução do problema são idênticas, o escoamento ao redor de uma esfera foi escolhido para validação. No presente estudo o Re foi definido com base na velocidade de entrada ($U = 0,05m/s$) e no diâmetro da esfera ($D_s = 0,02m$). Além disso, o valor do número de Schmidt (Sc) nas duas simulações foi obtido por meio da variação da difusividade do escalar (D_{sca}).

Como um dos objetivos do presente estudo é calcular o campo do escalar na proximidade da parede sem nenhum efeito de confinamento, um domínio mais amplo foi definido para diminuir os efeitos das condições de contorno. As simulações foram feitas em um domínio de tamanho $32D_s \times 8D_s \times 8D_s$ m³ (Comprimento \times Altura \times Largura) sendo que a esfera foi posicionada na parte central do domínio. As dimensões foram definidas com base no estudo de Panda et al. (2019) e Guardo et al. (2006). Panda et al. (2019) aplicou um domínio de $36D_s \times 6D_s \times 6D_s$ m³ considerando escoamentos com Re até 500 e Pr até 100. Por sua vez, Guardo et al. (2006) estudou um problema similar e observou a variação da influência das condições de contorno no escoamento e concluiu que um domínio de $4D_s \times 4D_s$ m² (Altura \times Largura) é suficiente para uma simulação do fenômeno sem influência de condições de contorno no campo do escalar na região próxima à parede. Na Fig. 5.20 pode ser observado o esquema do domínio computacional aplicado no MFSim e a esfera posicionada na região central.

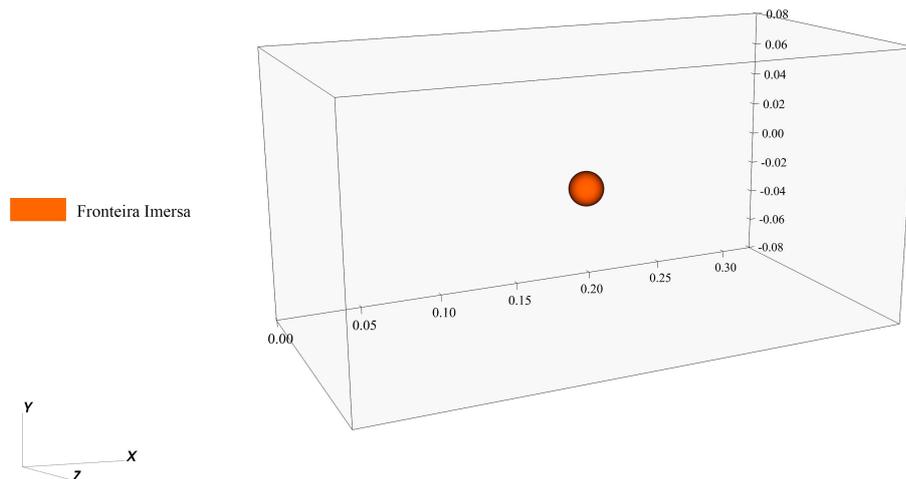


Figura 5.20: Domínio computacional aplicado nas simulações do escoamento ao redor de uma esfera.

As condições de contorno definidas nas simulações foram um perfil uniforme de velocidade em $x = 0,0$ m e a condição advectiva de velocidade na face de saída ($x = 0,32$ m). Além disso, foi definida uma condição de derivada nula para as velocidades nas faces restantes. Na

região da fronteira imersa, foi definida uma condição de deslizamento nulo para as velocidades. Quanto ao escalar, em todas as faces limites do domínio computacional foi aplicada a condição de derivada nula, sendo que, na região da fronteira imersa, foi imposto um valor fixo de escalar de 1,0.

Como mencionado anteriormente a simulação foi realizada sem modelagem de fechamento da turbulência. Com isso, a fluidodinâmica e o fenômeno de transferência de massa foi simulado em uma malha na qual o nível base possui $64 \times 32 \times 32$ volumes nas direções x , y e z , respectivamente. Nas simulações computacionais foi definido um total de 7 níveis físicos para avaliar o fenômeno de transporte advectivo-difusivo próximo à região parietal. Além disso, os limites do quarto nível físico foram definidos considerando a região da fronteira imersa e onde há formação da bolha de recirculação. O nível físico mais fino foi definido com base na posição da fronteira imersa, como pode ser observado na Fig. 5.21. Com isso o menor volume da malha computacional apresentou comprimento de $0,78125 \times 10^{-4}$ m. É importante ressaltar que as malhas lagrangianas foram calculadas com base nos comprimentos do nível físico mais fino respeitando a relação de construção do volume lagrangiano.

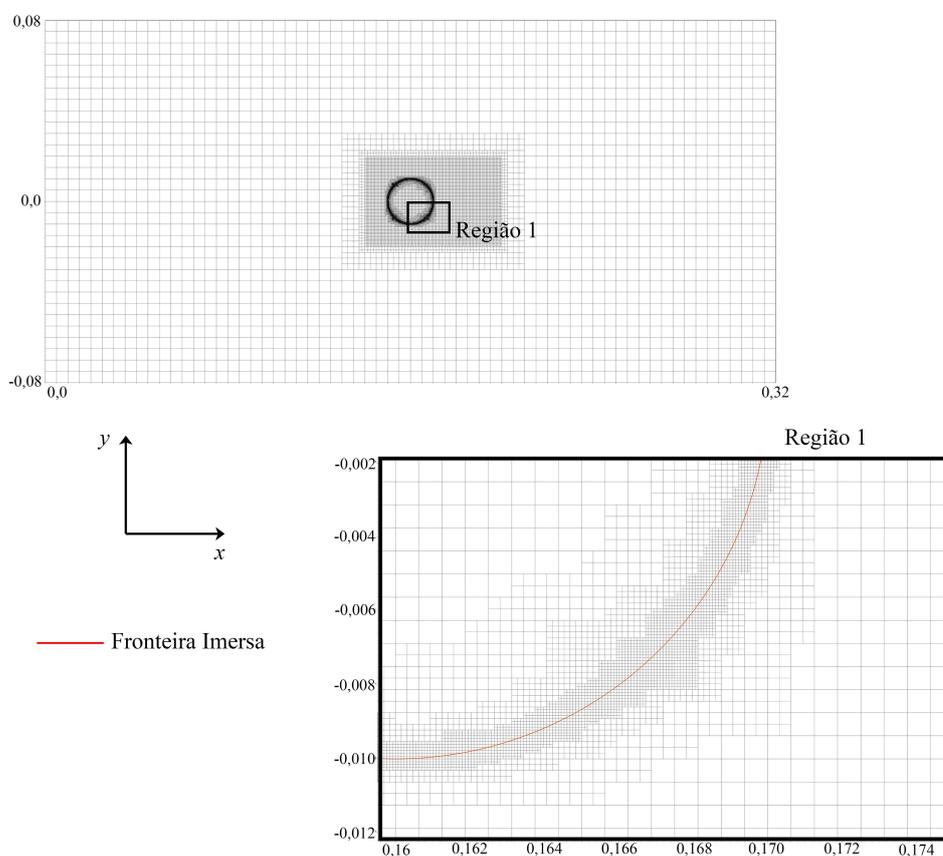


Figura 5.21: Malha computacional aplicada para resolver o escoamento ao redor de uma esfera.

Considerando as propriedades do escoamento e um $y^+ = 1$ estimou-se uma espessura de camada limite mínimo fluidodinâmica de $1,86 \times 10^{-3}$ m. No fenômeno de transferência de massa, a relação $\delta_{sca} = \delta_{fluid}/Sc^{0,33}$, é apresentada por Calculation... (1992), sendo δ_{sca} e δ_{fluid} as espessuras da camada limite da fluidodinâmica e do fenômeno de transferência de massa, respectivamente. Em uma das simulações, o escoamento apresenta um $Sc = 10$, que resulta em uma espessura da camada limite da corrosão de aproximadamente $0,87 \times 10^{-3}$ m. Com isso, pode-se afirmar que a malha nas proximidades da região de parede são adequadas para a modelagem numérica computacional e validação do problema multi-físico. Ressalta-se que uma malha mais fina foi definida devido ao método da fronteira imersa utilizado ser do tipo interface difusa.

Inicialmente o fenômeno foi resolvido sem a aplicação do método multinível. Ou seja, as equações utilizadas para modelagem dos fenômenos foram resolvidas na mesma malha computacional com aproximadamente 22,9 milhões de volumes. Com o objetivo de analisar a acurácia e redução do tempo computacional da simulação com o método multinível foi considerada uma diferença de 2 níveis físicos para resolver as equações referentes ao fenômeno de transporte do escalar e da fluidodinâmica. Na simulação em que o método multinível foi aplicado, a fluidodinâmica foi resolvida até o quinto nível físico em uma malha de aproximadamente 1,8 milhões de volumes. Com o cálculo do fenômeno da fluidodinâmica em uma malha mais grossa, uma malha lagrangiana mais grossa também poderia ser utilizada para redução do custo computacional. Apesar disso, a mesma malha lagrangiana utilizada para modelagem do fenômeno da corrosão foi definida para simular a fluidodinâmica.

Na simulação computacional com o método multinível buscou-se avaliar a resolução dos fenômenos com malhas distintas sem a utilização de um esquema de interpolação temporal do campo de velocidade. Na metodologia foi inserida apenas a interpolação espacial do campo de velocidade do nível mais fino da fluidodinâmica até o nível mais fino da corrosão. O passo temporal de cada iteração das simulações foram calculados com base no $CFL = 0,5$, considerando o campo de velocidade e a malha do nível físico mais fino. Na Fig. 5.22, as diferenças das malhas utilizadas para resolver as equações da fluidodinâmica (u , v , w e pressão) e a equação da corrosão (escalar) podem ser observadas por um corte central no domínio computacional. Observa-se que a malha do nível mais fino encobre toda região da fronteira imersa e que foram mantidos no mínimo 4 volumes na direção normal à parede para uma modelagem adequada dos fenômenos na região de camada limite.

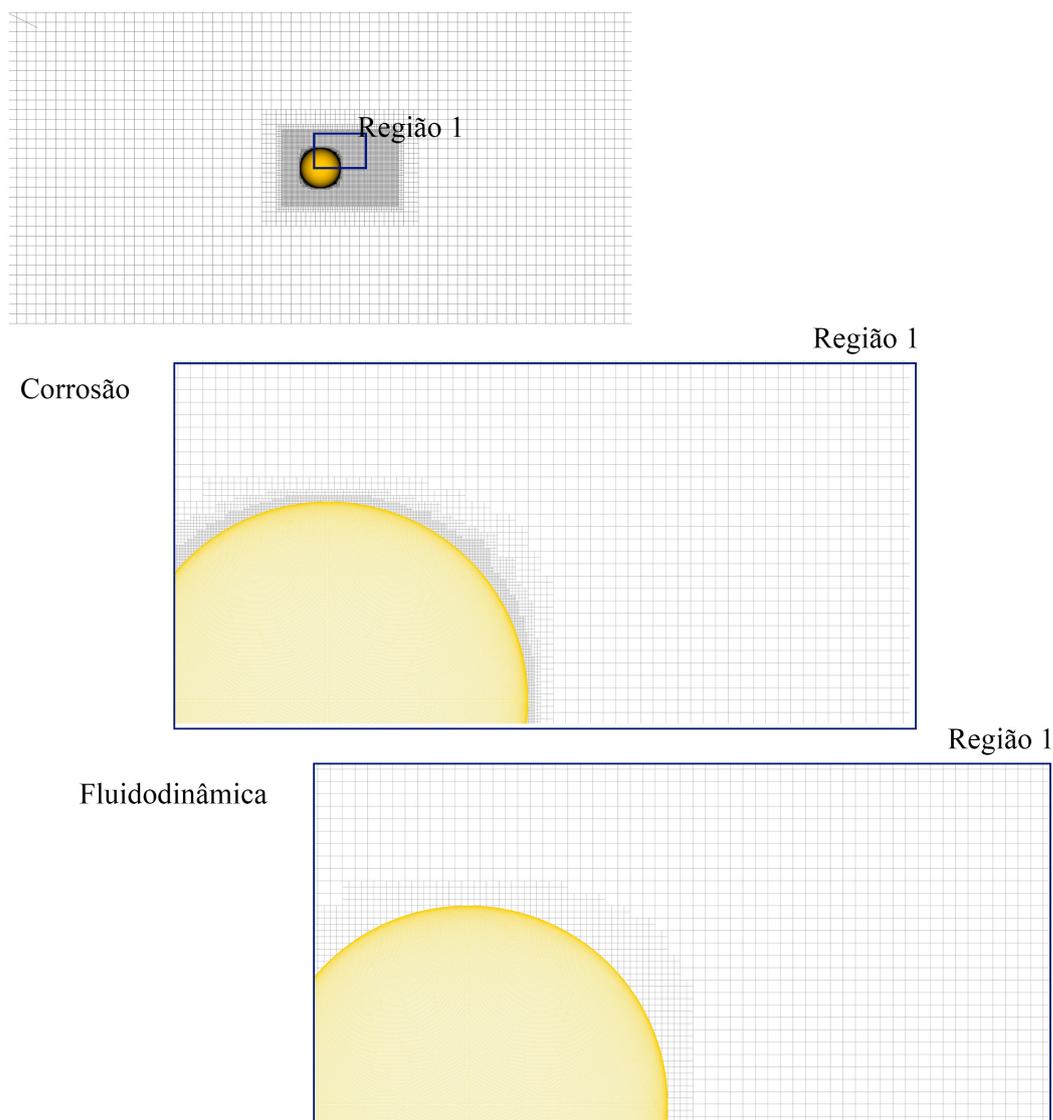


Figura 5.22: Malha computacional da fluidodinâmica e da corrosão com a aplicação do método multinível.

Os métodos numéricos aplicados nas simulações numéricas no MFSim foram: o método de passo fracionado para o acoplamento pressão-velocidade, o método Barton para discretização espacial dos termos advectivos de cada equação de balanço, o método multigrid multinível para obter a solução das velocidades e do escalar, o SIP para obter a solução da pressão. O critério de convergência de 10^{-6} foi definido para resolver as equações de balanço do fenômeno. O método da Fronteira Imersa aplicado foi o *Multi – direct Forcing* (MDF). Além disso, a função de distribuição cúbica foi definida no método da Fronteira Imersa. Ressalta-se que as simulações foram realizadas com processamento paralelo, sendo que foram utilizados 16 ou 32 processos considerando uma partição de 2 partes na direção y e z , e pelo menos 4 divisões na direção x .

Por meio da metodologia detalhada na seção anterior os resultados das simulações numéricas foram obtidos. Na simulação em que o método multinível foi aplicado, as linhas de corrente e o vetor de velocidade em regiões próximas à esfera podem ser observados nas Figs. 5.23 e 5.24, respectivamente. Com os vetores de velocidade e as linhas de corrente é possível observar a bolha de recirculação após 3,0 s de simulação. O comprimento da bolha de recirculação nas quatro simulações foi de 0,017 m, o que corresponde a um adimensional (X_s/D_s) de 0,85. Ressalta-se que os resultados obtidos nas simulações com números de Schmidt de 1 e 10 foram os mesmos. Esta característica é explicada em razão da aplicação da mesma malha computacional nas simulações e do escalar do fenômeno da transferência de massa ser um escalar passivo. Com relação à aplicação do método multinível, não foi observada variação no comprimento da bolha de recirculação resolvendo a fluidodinâmica até o quinto nível físico. Na Tab. 5.8 o valor de X_s/D_s foi comparado com resultados de estudos numéricos e experimentais da literatura.

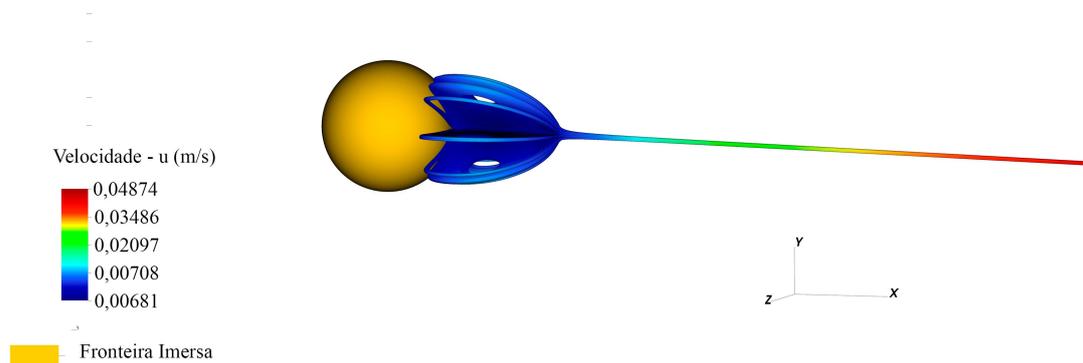


Figura 5.23: Linhas de corrente no escoamento sobre a esfera para um tempo físico de 3,0 s.

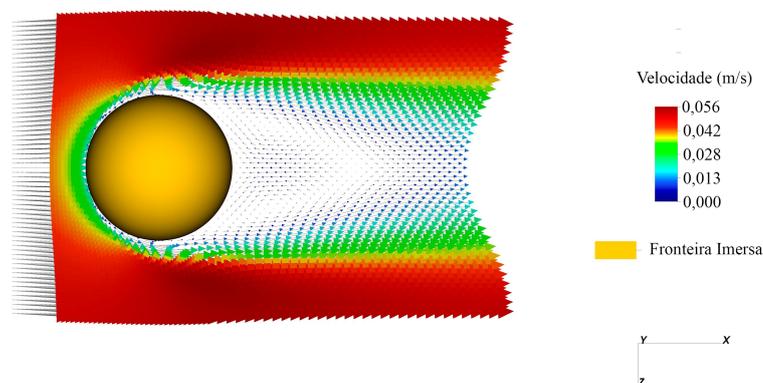


Figura 5.24: Vetores de velocidade no escoamento sobre a esfera para um tempo físico de 3,0 s.

Tabela 5.8: Comparação do adimensional respectivo ao comprimento da bolha de recirculação.

Referências	X_s/D_s
Fornberg (1988)	0,87
Johnson e Patel (1999)	0,88
Tomboulides e Orszag (2000)	0,87
A. . . (2003)	0,85
Presente estudo	0,85

Além de calcular o comprimento da bolha de recirculação com acurácia, o coeficiente de arrasto da esfera também apresentou resultados com pequenos desvios. Os resultados do coeficiente de arrasto foram comparados com as correlações de Subramanian (2003) e estão detalhados na Tab. 5.9. Observou-se a variação do coeficiente de arrasto com a aplicação do método multinível. Essa variação ocorre devido à resolução das equações da fluidodinâmica em uma malha mais grossa. Por meio dos resultados da Tab. 5.9 é possível afirmar que os valores do coeficiente de arrasto permaneceram com desvios menores que 5%, considerando dados do estudo de Subramanian (2003).

Tabela 5.9: Comparação do coeficiente de arrasto C_d com e sem aplicação do método multinível.

Referências	C_d
Presente estudo - Sem multinível	1,0348(4,80%)
Presente estudo - Com multinível	1,0999(1,19%)
Subramanian (2003)	1,087017

O campo de escalares das simulações podem ser observadas na Fig. 5.25. A principal diferença entre o escoamento com $Sc = 1$ e $Sc = 10$ está no campo de escalares na região de recirculação. Após a esfera observa-se que o escalar apresenta maior magnitude para a simulação com $Sc = 1$. A maior magnitude do escalar na região de recirculação é explicada pela maior difusividade do escalar.

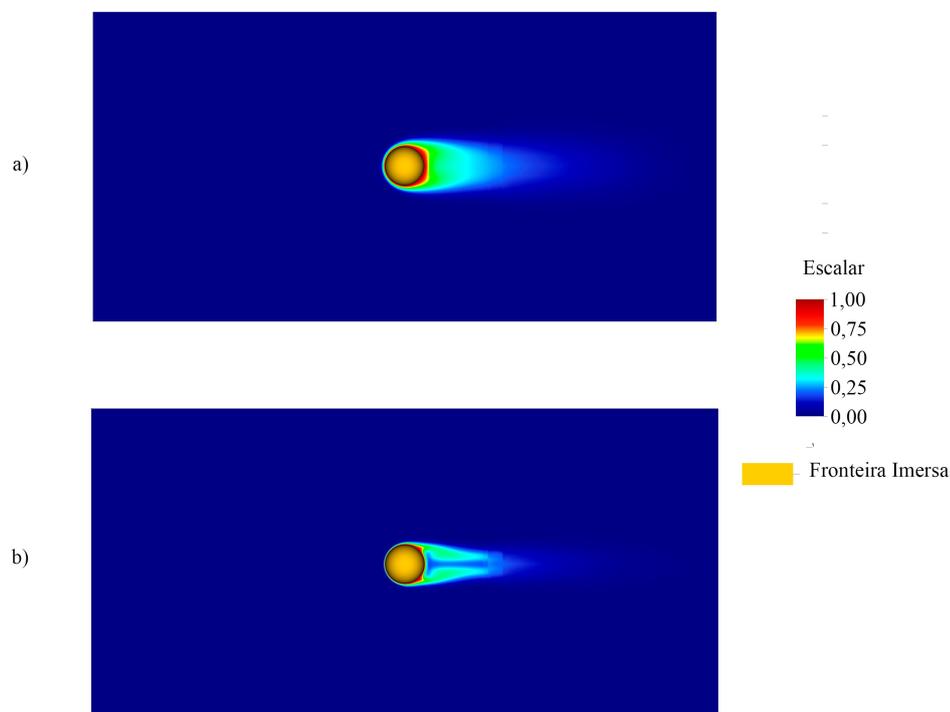


Figura 5.25: Campo de escalares para um tempo físico de 3,0 s a) $Sc = 1$ b) $Sc = 10$.

A partir do campo do escalar, o Sh ou Pr de cada simulação foi calculado e comparado com os resultados de Panda et al. (2019) e as correlações empíricas obtidas experimentalmente por Ranz e Marshall (1952) e Whitaker (1972). Na Tab. 5.10 podem ser observados os valores obtidos no MFSim e nos estudos de referência. O Sh foi calculado considerando o campo do escalar e uma região esférica que está distante $6,25 \times 10^{-4}$ m da fronteira imersa. Nota-se que essa distância é menor do que a espessura da camada limite estimada e maior que o comprimento da malha no nível mais fino. Em escoamentos em que a parede respeita os limites do domínio computacional, o Sh é calculado considerando superfícies com uma distância equivalente à metade do altura do volume do nível físico mais fino. Esse procedimento não foi realizado por causa da aplicação do método da fronteira imersa. Em pontos mais próximos da fronteira imersa ocorre uma alteração no campo do escalar para satisfazer as condições de contorno desejadas. Devido ao procedimento de distribuição alterar o campo do escalar optou-se por calcular a média do escalar em uma superfície esférica fora do raio de distribuição. Entretanto, a distância da superfície esférica foi definida dentro da região de camada limite para um cálculo adequado do número de Sherwood.

Tabela 5.10: Comparação do Sh com estudos da literatura.

Referências	Sc = 1	Sc = 10
Ranz e Marshall (1952)	8,00	14,82
Whitaker (1972)	7,29	15,29
Panda et al. (2019)	8,16	15,75
Presente estudo - Sem multinível	7,30	15,03
Presente estudo - Com multinível	7,28	14,85

As simulações computacionais realizadas no MFSim apresentaram resultados com desvios pequenos considerando as correlações de Ranz e Marshall (1952) e Whitaker (1972). Enquanto isso, foram observados desvios moderados considerando as simulações de Panda et al. (2019). Ressalta-se que Panda et al. (2019) realizaram simulações com um método de fronteira imersa e uma metodologia que também considera a resolução das equações da fluidodinâmica e do escalar em malhas distintas. Os resultados da Tab. 5.10 são referentes a uma simulação em que a fluidodinâmica é resolvida em uma malha 4 vezes mais fina, e as equações de balanço do escalar são resolvidas em uma malha 16 vezes mais fina do que a malha utilizada nas simulações do presente estudo. A análise de convergência de malha no presente estudo não foi feita em razão da falta de recursos computacionais para realizar as simulações com uma quantidade de níveis físicos maiores. Apesar disso, é importante enfatizar que a malha aplicada nas simulações realizadas no MFSim é adequada para modelagem computacional de ambos fenômenos na região de camada limite. Panda et al. (2019) realizaram simulações com Re e Sc maiores, por isso uma malha mais fina foi utilizada.

Com base nas simulações realizadas no MFSim com e sem aplicação do método multinível observou-se que o Sh apresentou pequenos desvios para as simulações com $Sc = 1$. Em outras palavras, a resolução da fluidodinâmica até o quinto nível físico e o campo de velocidade interpolado resultou em um campo de velocidade adequado para modelagem do transporte advectivo-difuso do escalar. Essa característica é relevante pois permite realizar a modelagem computacional do fenômeno multi-físico considerando malhas computacionais com características específicas de cada fenômeno com um custo computacional muito inferior.

A redução de tempo computacional pode ser observada na Tab. 5.11. Na Tab. 5.11 foi obtida a redução de tempo computacional estimada proporcionada pela aplicação do método multinível. Os valores estimados consideram o tempo computacional médio por iteração de

Tabela 5.11: Comparação dos tempos computacionais com aplicação do método multinível.

Simulação	$L_{mn} = 0$	$L_{mn} = 1$	$L_{mn} = 2$	$L_{mn} = 3$
Tempo CPU - u (s)	2,3845	0,4761	0,1790	0,1163
Tempo CPU - v (s)	2,4167	0,4817	0,1171	0,1171
Tempo CPU - w (s)	2,4487	0,4816	0,1802	0,1174
Tempo CPU - vel ib	14,5546	9,2758	8,3199	8,4524
Tempo CPU - pressão	4,4931	1,7872	0,8997	0,6346
Tempo CPU - escalar	12,0814	12,1645	12,1232	12,6339
Tempo CPU - escalar ib	0,5401	3,2884	3,2836	2,7098
Tempo CPU - interpolação	—	1,8278	2,3739	2,6540
Tempo CPU por iteração	43,8442	32,8702	30,1783	30,1281

simulações numéricas considerando a diferença entre os níveis físicos mais finos de cada fenômeno (L_{mn}). O tempo computacional foi avaliado a partir da mesma malha aplicada nas simulações apresentadas nessa seção, mas essa análise foi realizada considerando um tempo físico de 0,1 s.

A abordagem do método multinível permitiu obter resultados com um tempo computacional 30% menor considerando 2 níveis físicos de diferença entre as malhas do nível mais fino de cada fenômeno. Essa redução é justificada devido à resolução da fluidodinâmica até o quinto nível físico e a equação de transporte do escalar até o sétimo nível físico. A redução de tempo computacional foi possível em razão da redução expressiva de tempo de CPU das etapas: acoplamento pressão-velocidade, velocidades (u,v,w) e correção do campo de velocidade pelo método de fronteira imersa. Observa-se também um aumento do tempo de CPU para a correção do campo escalar no método de fronteira imersa e do tempo de interpolação. Apesar disso, esse aumento do tempo computacional não foi representativo. Destaca-se que as simulações $L_{mn} = 1$ e $L_{mn} = 3$ foram realizadas para avaliar a progressão de redução de tempo computacional com a aplicação do método multinível. Na Tab. 5.11 nota-se uma redução de tempo do CPU por iteração até um $L_{mn} = 2$.

Os resultados apresentados considerando o escoamento ao redor de uma esfera mostram os benefícios da aplicação do método multinível. A principal característica observada foi a possibilidade de resolver as equações de balanço do escalar considerando uma malha computacional 4 vezes mais fina que a malha da fluidodinâmica com um custo muito inferior. As simulações com $Sc = 1$ e $Sc = 10$ apresentaram desvios pequenos com a aplicação do método multinível, ou seja, por meio do método multinível foi possível obter um campo representativo do fenômeno

da corrosão mesmo com um campo interpolado de velocidade na região parietal. O tempo computacional requerido para análise de cada simulação sem o método foi de aproximadamente 45 dias. Com o método multinível, o fenômeno foi simulado em aproximadamente 30 dias. Considerando que simulações de corrosão em sistemas industriais tem um custo computacional muito maior do que as simulações realizadas no presente estudo, a redução de custo computacional pode ser mais expressiva.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

O fenômeno da corrosão em sistemas fluidodinâmicos pode ser definido como um problema complexo que depende não só de propriedades químicas do fluido, das propriedades da superfície metálica, mas também da dinâmica do escoamento. A análise de cada parâmetro associado ao escoamento turbulento é importante para identificar os locais mais propícios à corrosão e mensurar a taxa de perda de material. No decorrer do presente estudo foram identificados quais são os fatores que afetam a ocorrência da corrosão induzida pelo escoamento, como este fenômeno pode ser modelado computacionalmente, quais características do fenômeno devem ser consideradas para definir modelos de fechamento da turbulência adequados e quais estratégias ou métodos multiníveis podem ser introduzidas na modelagem do fenômeno corrosivo turbulento para que o problema possa ser analisado com acurácia e elevada eficiência computacional.

No Capítulo 2 do presente estudo foi detalhado um mecanismo para fenômenos da corrosão acelerada pelo escoamento e detalhou-se quais principais parâmetros podem ser analisados para redução da taxa de corrosão. De forma geral, todos os parâmetros que estão associados à corrosão tem influência na formação de uma camada de óxido, ou na camada protetora, e provocam alterações nos processos de dissolução e de difusividade nessa região. Quanto às propriedades químicas da água, afirma-se que o pH e o teor da concentração de oxigênio no meio fluido são propriedades que se controladas podem reduzir em até 90% as taxas de corrosão em sistemas fluidodinâmicos que apresentam pH neutros e baixas concentrações de oxigênio. A temperatura é outro fator que apresenta influência significativa no processo da corrosão. Considerando a mesma vazão e o mesmo material sob desgaste, o sistema apresentará uma temperatura crítica

na qual os processos difusivos e de dissolução provocam uma taxa de corrosão máxima. Outro fator considerado para minimizar os efeitos da corrosão é a aplicação de materiais específicos na composição do metal. A presença de uma maior concentração de molibdênio, cromo e cobre modificam a composição de óxidos na camada protetora e contribuem na redução da taxa de desgaste. Por último, o escoamento também é definido como um dos fatores para controle da FAC. A presença do escoamento turbulento atua diretamente no aumento da capacidade de solubilização de íons de ferro e aumento da taxa de desgaste da superfície.

Como a corrosão é observada em diversos tipos de escoamentos, cada escoamento deve ser analisado separadamente. Na literatura nota-se como problemas usualmente avaliados para estudos da corrosão sob um escoamento turbulento: tubulação com curva, escoamentos internos em regiões de restrição de vazão ou com variações bruscas de diâmetro. Em razão da formação de escoamentos secundários ou da separação da camada limite, variações de propriedades fluidodinâmicas podem ser observadas e, conseqüentemente, a corrosão é afetada. Com isso, regiões específicas de tubulações estão sujeitas a uma maior taxa de desgaste. Essas regiões podem ser estimadas por meio de análise do campo fluidodinâmico considerando as variações de viscosidade turbulenta, energia cinética turbulenta ou as tensões de cisalhamento nas regiões parietais.

O cálculo de parâmetros associados à taxa de corrosão pode ser realizado de duas formas. O primeiro consiste do uso de correlações empíricas considerando os números de Reynolds e Schmidt do escoamento. Com base nesses dois parâmetros o número de Sherwood pode ser calculado e utilizado para o cálculo das taxas de corrosão. O uso desta metodologia permite obter resultados de taxas de corrosão com desvios moderados considerando dados experimentais. O segundo método consiste da modelagem numérico-computacional que permite uma avaliação detalhada e bastante precisa do fenômeno de transporte advectivo-difusivo de espécies associadas ao fenômeno da corrosão e da dinâmica do escoamento. Em estudos de modelagem computacional dos fenômenos turbulentos corrosivos modelos de fechamento da turbulência que modelam corretamente a região subcamada da camada limite do fenômeno de transferência de massa foram consideradas. Os modelos $k - \epsilon$ AKN e o $k - \omega$ SST são modelos que são utilizados recorrentemente e permitem obter com acurácia o perfil de velocidade e de escalares na região de camada limite considerando os comprimentos característicos de cada fenômeno.

Em aplicações industriais são observados escoamentos com elevado Sc , apresentando valores próximos à 1000. Com isso, os comprimentos característicos do fenômeno da corrosão e

da fluidodinâmica apresentam uma relação entre as espessuras da camada limite de no mínimo 10 vezes, sendo a espessura da corrosão a menor. Este parâmetro é importante para estudos numérico-computacionais, pois deve ser utilizado na etapa de discretização espacial do domínio computacional para um cálculo adequado das concentrações de espécies químicas nas regiões próximas à parede. Esta característica pode ser caracterizada como restritiva, pois há um aumento de custo computacional significativo em resolver a fluidodinâmica em uma malha mais fina. Com isso, métodos multiníveis podem ser aplicados para a modelagem desse problema multi-físico. No método multinível a malha fluidodinâmica apresenta características diferentes da malha aplicada para modelagem da corrosão. Com isso, cada fenômeno pode ser resolvido considerando seus comprimentos característicos respectivos. A aplicação desse método em outros problemas na literatura resultaram em uma redução maior que 70% do custo computacional de quando o método multinível não é aplicado.

Com isso, foram detalhados nos Capítulos 3 e 4 os métodos matemáticos e numérico-computacionais aplicados no presente estudo para análise de fenômenos de transferência de massa. Foram apresentadas diferentes estratégias do método multinível com o objetivo de reduzir o custo computacional e manter a acurácia das simulações. O método foi avaliado de forma distinta em quatro problemas resolvidos no MFSim. Na primeira análise considerou-se a aplicação da metodologia em um problema de solução manufaturada. Nas demais análises, diferentes estratégias foram consideradas para análise da corrosão em escoamentos turbulentos.

Na análise de problemas de solução manufaturada, o método multinível foi avaliado considerando duas estratégias. Nas simulações de solução manufaturada observou-se que a equação dos escalares passa a ter desvios pequenos devido às interpolações do campo de velocidade. Entretanto, o campo apresenta uma solução adequada para o problema de solução manufaturada resolvido e permite a resolução do problema com um custo computacional 90% menor.

No escoamento de expansão brusca, duas metodologias foram avaliadas sendo que em todas as simulações foi considerado o modelo de fechamento da turbulência $k - \epsilon$ AKN. Com as simulações realizadas no MFSim foi possível obter os perfis de coeficiente de transferência de massa e do número de Sh ao longo da parede da tubulação após a expansão. Os resultados apresentaram pequenos desvios considerando procedimentos experimentais que determinaram os perfis de coeficiente de transferência de massa. Nessa primeira análise o método multinível apresentou excelentes resultados. Os perfis de viscosidade turbulenta, velocidade e escalares apresentaram desvios desprezíveis considerando a resolução da fluidodinâmica em uma malha

16 vezes mais grossa que a malha da corrosão/turbulência na região parietal. A redução de custo computacional sem perda de acurácia foi maior que 90%. Em razão dos desvios desprezíveis, uma segunda análise foi realizada para um escoamento com Re menor e $Sc = 1$ considerando uma FI para representar a superfície metálica. A partir das simulações com e sem FI, obteve-se resultados com desvios menores que 5% para o coeficiente de transferência de massa. Com isso, verificou-se a aplicação do método multinível considerando a aplicação do método de Fronteira Imersa.

O método multinível também foi analisado em problemas de jato de impacto. A estratégia considerada para o estudo de jatos de impacto resultou na redução de custo computacional de até 90%. Nessa etapa foi avaliada a utilização de uma malha mais grossa temporariamente para resolução das equações de corrosão/turbulência, o que permitiu os aumentos do passo de tempo e ganho de eficiência computacional para resolver o fenômeno multi-físico. Quanto à modelagem da turbulência, o modelo $k - \omega$ SST proporcionou um cálculo do coeficiente de transferência de massa com desvios moderados. Como o escoamento analisado apresenta baixos números de Schmidt, recomenda-se a aplicação de uma malha de no máximo 4 vezes mais grossa para a fluidodinâmica na região parietal. A redução do custo computacional com a utilização do método multinível foi de 90% com o método que permite resolver as equações que representam a fluidodinâmica, turbulência e corrosão em uma malha grosseira temporariamente.

As simulações de escoamento ao redor de uma esfera foram realizadas considerando baixos Re e Sc . O fenômeno foi modelado sem modelos de fechamento e apresentaram elevado custo computacional. A aplicação do método multinível foi importante pois permitiu obter uma redução de custo computacional de aproximadamente 35%. Ressalta-se que com a aplicação do método multinível, parâmetros da fluidodinâmica como o coeficiente de arrasto apresentaram desvios pequenos. Quanto ao fenômeno de transferência de massa o escoamento com $Sc=1$ apresentou desvios pequenos com a aplicação do método multinível. Um desvio moderado foi obtido para o escoamento com $Sc=10$, que indica que uma malha mais fina devia ser considerada para o cálculo da corrosão. Os resultados obtidos através do MFSim foram comparados com correlações empíricas aplicadas para análise desse fenômeno e mostram resultados satisfatórios apresentando desvios pequenos. A diferença de espessura da malha da fluidodinâmica e da corrosão foi de 4, para os dois fenômenos com $Sc=1$ e $Sc=10$.

O desenvolvimento do estudo do fenômeno da corrosão em sistemas fluidodinâmicos na plataforma MFSim apresentou vários desafios. Uma grande parte dos estudos na tese foram

dedicados a determinar os melhores métodos (interpolação/distribuição no método da Fronteira Imersa, modelos de fechamento da turbulência) para a análise do fenômeno multi-físico. A implementação do método multinível no software MFSim foi avaliada com cautela. São parâmetros importantes analisados no método multinível: CFL, ordem na resolução das equações de balanço, quantidade de níveis considerados para as equações de balanço das propriedades da turbulência, estratégias de interpolação do campo de velocidade. A partir dessa análise foi possível determinar uma metodologia que permite um cálculo adequado da corrosão em sistemas turbulentos.

Entretanto, não houve tempo suficiente para análise de problemas industriais. O custo computacional apresentado para simular determinados fenômenos é muito grande, mesmo com a aplicação do método multinível. É importante mencionar que o MFSim é constantemente atualizado e recentemente uma nova atualização permite a análise considerando um custo computacional muito inferior. Nas versões em que o método multinível foi analisado, a Fronteira Imersa deve ficar posicionada em um nível físico fixo. Essa característica faz com que toda região de parede permaneça em uma malha mais fina, o que é desnecessário, pois a corrosão pode ser avaliada com malhas mais grosseiras em regiões mais distantes do ponto de taxa de corrosão máxima. Desse modo, a análise de fenômenos de tubulações com curva ou com variações bruscas de diâmetro com elevado Re e Sc são simulações que podem ser realizadas considerando as estratégias aplicadas recentemente no código MFSim.

O método multinível implementado também pode ser aplicado para escoamentos com transferência térmica e outros fenômenos como: escoamentos multifásicos, escoamentos gás-sólidos, gás-líquidos e escoamentos reativos. Ou seja, a introdução do método multinível pode vir a contribuir em outros estudos e abrir novas linhas de pesquisa considerando aplicações industriais. Considerando as linhas de pesquisa atuais do laboratório, uma próxima etapa para o estudo do método multinível no MFSim é a análise de fenômenos que possuem variação de propriedades físicas. Além disso, em estudos seguintes a metodologia multinível precisa ser testada com outros modelos de fechamento da turbulência em escoamentos turbulentos que buscam uma representatividade temporal mais próxima do que ocorre na prática. Em outras palavras, em alguns estudos numérico-computacionais de problemas multi-físicos, informações das flutuações de propriedades do escoamento são importantes para análise do fenômeno.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

R. S. Subramanian. Disponível em: <<https://doi.org/10.1149/1945-7111/abc6c8>>.

A general reconstruction algorithm for simulating flows with complex 3D immersed boundaries on Cartesian grids. *Journal of Computational Physics*, v. 191, n. 2, p. 660–669, 2003. ISSN 0021-9991. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0021-9991\(03\)00321-8](https://doi.org/10.1016/S0021-9991(03)00321-8)>.

ABE, K.; KONDOH, T.; NAGANO, Y. A new turbulence model for predicting fluid flow and heat transfer in separating and reattaching flows—i. flow field calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 37, n. 1, p. 139–151, 1994. ISSN 0017-9310. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0017-9310\(94\)90168-6](https://doi.org/10.1016/0017-9310(94)90168-6)>.

ABHYANKAR, S. et al. *PETSc/TS: A Modern Scalable ODE/DAE Solver Library*. arXiv, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.48550/ARXIV.1806.01437>>.

ACHENBACK, E. *Mass Transfer from Bends of Circular Cross Section to Air, Future Energy Production Systems*. [S.l.]: Academic Press, New York, 1976.

AJMAL, T.; ARYA, S. B.; UDUPA, K. R. Effect of hydrodynamics on the flow accelerated corrosion (fac) and electrochemical impedance behavior of line pipe steel for petroleum industry. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, v. 174, p. 42–53, 2019. ISSN 0308-0161. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ijpvp.2019.05.013>>.

ALKIRE, R.; JU, J. High speed selective electroplating with impinging two-dimensional slot jet flow. *Journal of The Electrochemical Society*, The Electrochemical Society, Inc., v. 134, n. 2, p. 294, feb 1987. Disponível em: <<https://doi.org/10.1149/1.2100449>>.

ALLOY; PLANTS. *low Accelerated Corrosion (FAC) of Carbon Steel and Low Alloy Steel Piping in Commercial Nuclear Power Plants*. [S.l.], 2014.

ARAVINTH, S. Prediction of heat and mass transfer for fully developed turbulent fluid flow through tubes. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 43, n. 8, p. 1399–1408, 2000. ISSN 0017-9310. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(99\)00218-5](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(99)00218-5)>.

ASHFORTH-FROST, S.; JAMBUNATHAN, K.; WHITNEY, C. Velocity and turbulence characteristics of a semiconfined orthogonally impinging slot jet. *Experimental Thermal and Fluid Science*, v. 14, n. 1, p. 60–67, 1997. ISSN 0894-1777. Tenth Symposium on Turbulent Shear Flows. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/S0894-1777\(96\)00112-4](https://doi.org/10.1016/S0894-1777(96)00112-4)>.

BALAY, S. et al. *PETSc/TAO Users Manual*. [S.l.]: Argonne National Laboratory, 2022.

BALSARA, D. S. Divergence-free adaptive mesh refinement for magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, v. 174, n. 2, p. 614–648, 2001. ISSN 0021-9991. Disponível em: <https://doi.org/10.1006/jcph.2001.6917>.

BARBI, F. et al. Numerical experiments of ascending bubbles for fluid dynamic force calculations. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 40, n. 11, p. 519, Oct 2018. ISSN 1806-3691. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s40430-018-1435-7>.

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, n. 11, p. 1185–1194, 1977. ISSN 0017-9310. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(77\)90127-2](https://doi.org/10.1016/0017-9310(77)90127-2).

BETOVA, I.; BOJINOV, M.; SAARIO, T. *Predictive modelling of flow-accelerated corrosion – unresolved problems and issues*. Espoo, Finland, 2010.

CALCULATION of wall-mass transfer rates in separated aqueous flow using a low Reynolds number k- model. *Int. J. Heat Mass Transfer*, v. 35, n. 8, p. 1977–1985, 1992. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(92\)90200-C](https://doi.org/10.1016/0017-9310(92)90200-C).

CASTRO, L. P. de et al. Implementation of a hybrid lagrangian filtered density function–large eddy simulation methodology in a dynamic adaptive mesh refinement environment. *Physics of Fluids*, v. 33, n. 4, p. 045126, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/5.0045873>.

CHEN, Q.; MODI, V. J. Mass transfer in turbulent impinging slot jets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 42, n. 5, p. 873–887, 1999. ISSN 0017-9310. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(98\)00215-4](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(98)00215-4).

CHIAVERINI, V. *Tecnologia mecânica*. [S.l.]: McGraw hill, 1986.

CHONG, K. L.; DING, G.; XIA, K.-Q. Multiple-resolution scheme in finite-volume code for active or passive scalar turbulence. *Journal of Computational Physics*, v. 375, p. 1045–1058, 2018. ISSN 0021-9991. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.09.019>.

COURANT, R.; FRIEDRICHS, K.; LEWY, H. On the partial difference equations of mathematical physics. *IBM Journal of Research and Development*, v. 11, n. 2, p. 215–234, 1967. Disponível em: <https://doi.org/10.1147/rd.112.0215>.

CRAMER, S. D.; COVINO, B. S. *Corrosion: Fundamentals, Testing, and Protection*. [S.l.]: ASM Handbook, 2003.

DAMASCENO, M.; VEDOVOTO, J. M.; SILVEIRA-NETO, A. Turbulent inlet conditions modeling using large-eddy simulations. *CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences*, v. 104, p. 105–132, 01 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.3970/cmes.2015.104.105>.

DAMASCENO, M. M. R.; SANTOS, J. G. de F.; VEDOVOTO, J. M. Simulation of turbulent reactive flows using a fdf methodology – advances in particle density control for normalized variables. *Computers & Fluids*, v. 170, p. 128 – 140, 2018. ISSN 0045-7930. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2018.05.004>.

DAS, K.; BASU, D.; MINTZ, T. Comparative Assessment of Turbulence Models for Prediction of Flow-Induced Corrosion Damages. Volume 3: Design and Analysis, p. 51–60, 07 2011. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1115/PVP2011-57817⟩](https://doi.org/10.1115/PVP2011-57817).

DEBNATH, S.; KHAN, M. H. U.; AHMED, Z. U. Turbulent swirling impinging jet arrays: A numerical study on fluid flow and heat transfer. *Thermal Science and Engineering Progress*, v. 19, p. 100580, 2020. ISSN 2451-9049. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1016/j.tsep.2020.100580⟩](https://doi.org/10.1016/j.tsep.2020.100580).

DONG, Y.-H.; LU, X.-Y.; ZHUANG, L.-X. Large eddy simulation of turbulent channel flow with mass transfer at high-schmidt numbers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 46, n. 9, p. 1529–1539, 2003. ISSN 0017-9310. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(02\)00456-8⟩](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(02)00456-8).

DOOLEY, R. B. Flow-accelerated corrosion in fossil and combined cycle/hrsg plants. *Power Plant Chemistry*, v. 10, n. 2, p. 68–89, 2008.

EISENBERG, M.; TOBIAS, C. W.; WILKE, C. R. Ionic mass transfer and concentration polarization at rotating electrodes. *Journal of The Electrochemical Society*, The Electrochemical Society, Inc., v. 101, n. 6, p. 306, jun 1954. Disponível em: [⟨https://dx.doi.org/10.1149/1.2781252⟩](https://dx.doi.org/10.1149/1.2781252).

EL-GAMMAL, M. et al. The hydrodynamic effects of single-phase flow on flow accelerated corrosion in a 90-degree elbow. *Nuclear Engineering and Design*, v. 240, n. 6, p. 1589–1598, 2010. ISSN 0029-5493. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2009.12.005⟩](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2009.12.005).

ELIAS, A. J. Modelagem híbrida urans-les para escoamentos turbulentos. *Master thesis, Universidade Federal de Uberlândia*, Uberlândia, Brazil, 2018. Disponível em: [⟨http://dx.doi.org/10.14393/ufu.di.2018.1219⟩](http://dx.doi.org/10.14393/ufu.di.2018.1219).

FORNBERG, B. Steady viscous flow past a sphere at high reynolds numbers. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 190, p. 471–489, 1988. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1017/S0022112088001417⟩](https://doi.org/10.1017/S0022112088001417).

GENTIL, V. *Corrosão*. [S.l.]: LTC – Livros técnicos e científicos, 2011.

GIRALT, F.; TRASS, O. Mass transfer from crystalline surfaces in a turbulent impinging jet. part 2: Erosion and diffusional transfer. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 54, n. 3, p. 148–155. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1002/cjce.5450540305⟩](https://doi.org/10.1002/cjce.5450540305).

GRIFFITH, B. E.; PESKIN, C. S. On the order of accuracy of the immersed boundary method: Higher order convergence rates for sufficiently smooth problems. *Journal of Computational Physics*, v. 208, n. 1, p. 75–105, 2005. ISSN 0021-9991. Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.02.011⟩](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.02.011).

GUARDO, A. et al. Cfd study on particle-to-fluid heat transfer in fixed bed reactors: Convective heat transfer at low and high pressure. *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 13, p. 4341–4353, 2006. ISSN 0009-2509. The John Bridgwater Symposium: "Shaping the Future of Chemical Engineering". Disponível em: [⟨https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.02.011⟩](https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.02.011).

HELAL, M. S. et al. Experimental study of the diffusion-controlled corrosion of copper in the bottom of a jet stirred reactor. *Int. J. Heat Mass Transfer*, v. 35, n. 1, p. 101–110, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/0104-6632.20180351s20160333>.

HUANG, H. et al. Evaluation of a developed sst k- turbulence model for the prediction of turbulent slot jet impingement heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 139, p. 700–712, 2019. ISSN 0017-9310. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.05.058>.

HWANG, C. B.; LIN, C. A. Improved low-reynolds-number k-e model based on direct numerical simulation data. *AIAA Journal*, v. 36, n. 1, p. 38–43, 1998. Disponível em: <https://doi.org/10.2514/2.349>.

HWANG, K. M.; JIN, T. E.; KIM, K. H. Identification of the relationship between local velocity components and local wall thinning inside carbon steel piping. *Journal of Nuclear Science and Technology*, Taylor Francis, v. 46, n. 5, p. 469–478, 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/18811248.2007.9711554>.

INTENSIFICATION of mass transfer controlled processes at the interface between two immiscible liquids by an axial turbulent submerged jet. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 46, n. 1, p. 10–16, 2007. ISSN 0255-2701. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cep.2006.04.001>.

INTENSIFICATION of the rate of heavy metal removal from wastewater by cementation in a jet reactor. *Desalination*, v. 254, n. 1, p. 29–34, 2010. ISSN 0011-9164. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.desal.2009.12.018>.

JOHNSON, T. A.; PATEL, V. C. Flow past a sphere up to a reynolds number of 300. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 378, p. 19–70, 1999. Disponível em: <https://doi.org/10.1017/S0022112098003206>.

KAIN, V. Flow accelerated corrosion: Forms, mechanisms and case studies. *Procedia Engineering*, v. 86, p. 576–588, 2014. ISSN 1877-7058. Structural Integrity. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2014.11.083>.

KEATING, A. A model for the investigation of two-phase erosion-corrosion in complex geometries. (*Mestrado em Engenharia*) – *University of Queensland*, University of Queensland, 1999.

KUBRAK, B. et al. Low-diffusivity scalar transport using a weno scheme and dual meshing. *Journal of Computational Physics*, v. 240, p. 158–173, 2013. ISSN 0021-9991. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2012.12.039>.

LAM, C. K. G.; BREMHORST, K. A Modified Form of the k- Model for Predicting Wall Turbulence. *Journal of Fluids Engineering*, v. 103, n. 3, p. 456–460, 09 1981. ISSN 0098-2202. Disponível em: <https://doi.org/10.1115/1.3240815>.

LIMA, R. S. Desenvolvimento e implementação de malhas adaptativas bloco– estruturadas para computação paralela em mecânica dos fluidos. *Tese (Doutorado)* — *Universidade Federal de Uberlândia*, Uberlândia, Brasil, 2012.

LIN, C. H.; FERNG, Y. M. Predictions of hydrodynamic characteristics and corrosion rates using cfd in the piping systems of pressurized-water reactor power plant. *Annals of Nuclear Energy*, v. 65, p. 214–222, 2014. ISSN 0306-4549. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2013.11.007>.

LINCK, P. S. Simulação de sistema de geração de vapor : avaliação de ocorrência de fac. *Dissertação, Universidade Federal do Rio Grande do Sul*, Porto Alegre, Brasil, 2019.

MADASAMY, P. et al. Flow accelerated corrosion rate on carbon steel pipe bend by thin layer activation technique and computational modeling: Under phwr operating conditions. *Engineering Failure Analysis*, v. 121, p. 105125, 2021. ISSN 1350-6307. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2020.105125>.

MADASAMY, P. et al. Influence of bend geometry on flow accelerated corrosion under neutral ph conditions. *Engineering Failure Analysis*, v. 122, p. 105127, 2021. ISSN 1350-6307. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.engfailanal.2020.105127>.

MAZHAR, H. Flow accelerated corrosion in single and dual s- shape bends under single and two phase flow conditions. *Ph.D. thesis, McMaster University*, Hamilton, Canada, 2013.

MELO, R. R. S. *Modelagem e simulação de escoamentos turbulentos com efeitos térmicos, utilizando a metodologia de fronteira imersa e malha adaptativa*. Tese (Tese de Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia - MG, Brasil, 2017.

MENTER, F.; KUNTZ, M.; LANGTRY, R. Ten years of industrial experience with the sst turbulence model. *Heat and Mass Transfer*, v. 4, 01 2003.

NETO, H. R. et al. Influence of seabed proximity on the vibration responses of a pipeline accounting for fluid-structure interaction. *Mechanical Systems and Signal Processing*, Elsevier, v. 114, p. 224–238, 2019.

OH, S.-B. et al. Analysis of pipe thickness reduction according to ph in fac facility with in situ ultrasonic measurement real time monitoring. *Nuclear Engineering and Technology*, v. 54, n. 1, p. 186–192, 2022. ISSN 1738-5733. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.net.2021.07.048>.

ORAZEM, M. E.; CARDOSO-FILHO, J. C.; TRIBOLLET, B. Application of a submerged impinging jet for corrosion studies: development of models for the impedance response. *Electrochimica Acta*, v. 46, n. 24, p. 3685–3698, 2001. ISSN 0013-4686. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0013-4686\(01\)00647-8](https://doi.org/10.1016/S0013-4686(01)00647-8).

OSTILLA-MONICO, R. et al. A multiple-resolution strategy for direct numerical simulation of scalar turbulence. *Journal of Computational Physics*, Elsevier BV, v. 301, p. 308–321, nov 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.08.031>.

PANDA, A. et al. Fully resolved scalar transport for high prandtl number flows using adaptive mesh refinement. *Chemical Engineering Science: X*, v. 4, p. 100047, 2019. ISSN 2590-1400. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cesx.2019.100047>.

PIETRALIK, J. M. The role of flow in flow-accelerated corrosion under nuclear power plant conditions. *E-Journal of Advanced Maintenance*, v. 4, p. 63–78, 2012. ISSN 1883-9894. Disponível em: http://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:45012027.

- PINHEIRO, A. P. et al. Modelling of aviation kerosene droplet heating and evaporation using complete fuel composition and surrogates. *Fuel*, v. 305, p. 121564, 2021. ISSN 0016-2361. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121564>.
- PIVELLO, M. et al. A fully adaptive front tracking method for the simulation of two phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 58, p. 72–82, 2014. ISSN 0301-9322. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2013.08.009>.
- PORT, R. D. Flow Accelerated Corrosion. In: . [S.l.: s.n.], 1998. (NACE CORROSION, All Days). NACE-98721.
- POSTLETHWAITE, J.; LOTZ, U. Mass transfer at erosion-corrosion roughened surfaces. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 66, n. 1, p. 75–78, 1988. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/cjce.5450660111>.
- POULSON, B. Advances in understanding hydrodynamic effects on corrosion. *Corrosion Science*, v. 35, n. 1, p. 655–665, 1993. ISSN 0010-938X. Advances in Corrosion and Protection. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0010-938X\(93\)90201-Q](https://doi.org/10.1016/0010-938X(93)90201-Q).
- POULSON, B.; ROBINSON, R. The use of a corrosion process to obtain mass transfer data. *Corrosion Science*, v. 26, n. 4, p. 265–280, 1986. ISSN 0010-938X. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0010-938X\(86\)90048-X](https://doi.org/10.1016/0010-938X(86)90048-X).
- PRASAD, M. et al. Pipe wall thickness prediction with cfd based mass transfer coefficient and degradation feedback for flow accelerated corrosion. *Progress in Nuclear Energy*, v. 107, p. 205–214, 2018. ISSN 0149-1970. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2018.04.024>.
- RANZ, W.; MARSHALL, W. Evaporation from drops. *Chemical Engineering progress*, p. 141 – 146, 1952. Disponível em: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85094849520&partnerID=40&md5=4fca790f87c087e364887cb5792e0e17>.
- REMY, F.; BOUCHACOURT, M. Flow-assisted corrosion: a method to avoid damage. *Nuclear Engineering and Design*, v. 133, n. 1, p. 23–30, 1992. ISSN 0029-5493. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0029-5493\(92\)90084-9](https://doi.org/10.1016/0029-5493(92)90084-9).
- RITTER, S. (Ed.). *6 - Flow-accelerated corrosion in nuclear power plants*. [S.l.]: Woodhead Publishing, 2020. 213-250 p. (European Federation of Corrosion (EFC) Series). ISBN 978-0-12-823719-9.
- ROBINSON, J. O.; DREWS, T. Resolving Flow-Accelerated Corrosion Problems in the Industrial Steam Plant. *Corrosion, All Days*.
- SANTOS, J. G. de F. Mathematical and computational modeling of gas-solid flows in dynamic adaptive mesh. *Master thesis, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, Brazil, 2019*.
- SENSITIZATION of the modified SST model to the swirling and curvature for turbulent impinging jet heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 182, p. 121980, 2022. ISSN 0017-9310. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121980>.

- SI, X. et al. Effects of local velocity components on flow-accelerated corrosion at 90° elbow. *Materials Research Express*, IOP Publishing, v. 6, n. 1, p. 016557, oct 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1088/2053-1591/aae9d5>.
- SILVEIRA-NETO, A. *Escoamentos Turbulentos - Análise Física e Modelagem Teórica*. 1. ed. Uberlândia: Composer, 2020. 653 p. ISBN 978-65990365146.
- SILVERIO, V. Simulação de sistema de geração de vapor : avaliação de ocorrência de fac. *Dissertação, Universidade Federal do Paraná.*, Curitiba, Brasil, 2019.
- SOUZA, P. R. C. et al. Multi-phase fluid–structure interaction using adaptive mesh refinement and immersed boundary method. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 2022.
- SUBRAMANIAN, R. S. Drag on spherical particles and steady settling velocities. *Available online*, p. 1–3, 2003. Disponível em: <http://www.clarkson.edu/subramanian/ch301/notes/index.htm>.
- SYDBERGER, T.; LOTZ, U. Relation between mass transfer and corrosion in a turbulent pipe flow. *Journal of The Electrochemical Society*, The Electrochemical Society, Inc., v. 129, n. 2, p. 276, feb 1982. Disponível em: <https://dx.doi.org/10.1149/1.2123812>.
- TOMBOULIDES, A. G.; ORSZAG, S. A. Numerical investigation of transitional and weak turbulent flow past a sphere. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 416, p. 45–73, 2000. Disponível em: <https://doi.org/10.1017/S0022112000008880>.
- TREVIN, S. Flow accelerated corrosion (fac) in nuclear power plant components. In: FÉRON, D. (Ed.). *Nuclear Corrosion Science and Engineering*. Woodhead Publishing, 2012, (Woodhead Publishing Series in Energy). p. 186–229. ISBN 978-1-84569-765-5. Disponível em: <https://doi.org/10.1533/9780857095343.2.186>.
- TSANG, C. *Mass Transfer to an Impinging Jet Electrode: A Thesis*. Clarkson College of Technology, 1978. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=YGrltgAACAAJ>.
- UHLMANN, M. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, v. 209, n. 2, p. 448–476, 2005. ISSN 0021-9991. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.03.017>.
- VEDOVOTO, J. M.; SERFATY, R.; NETO, A. D. S. Mathematical and numerical modeling of turbulent flows. *Anais da Academia Brasileira de Ciências*, Academia Brasileira de Ciências, v. 87, n. An. Acad. Bras. Ciênc., 2015 87(2), 2015. ISSN 0001-3765. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/0001-3765201520140510>.
- VILLAR, M. Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais. *Ph.D. thesis, Universidade Federal de Uberlândia*, Uberlândia, Brasil, 2007.
- WANG, D.; RUUTH, S. J. Variable step-size implicit-explicit linear multistep methods for time-dependent partial differential equations. *Journal of Computational Mathematics*, v. 26, n. 6, p. 838–855, 2008. ISSN 1991-7139. Disponível em: http://global-sci.org/intro/article_detail/jcm/8663.html.

WANG, Y. Flow-dependent corrosion in turbulent pipe flow. *Tese (Doutorado em Engenharia Química), University of Saskatchewan, Saskatchewan, Canada, 1997.*

WATANABE, S.; MORITA, R. Development of Predictive Evaluation Methods of Pipe Wall Thinning by Flow Accelerated Corrosion at Drift Region in Junction Piping. Volume 4A: Materials and Fabrication, 07 2022. V04AT06A047. Disponível em: [〈https://doi.org/10.1115/PVP2022-84566〉](https://doi.org/10.1115/PVP2022-84566).

WHITAKER, S. Forced convection heat transfer correlations for flow in pipes, past flat plates, single cylinders, single spheres, and for flow in packed beds and tube bundles. *AIChE Journal*, v. 18, n. 2, p. 361 – 371, 1972. Disponível em: [〈https://doi.org/10.1002/aic.690180219〉](https://doi.org/10.1002/aic.690180219).

WILKIN, S. J.; OATES, H.; CONEY, M. Mass Transfer on Straight Pipes and 90° Bends Measured by the Dissolution of plaster. *Central Electricity Research Laboratories*, 1983.

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. 8, p. 3190–3200, 2011. ISSN 0029-5493. Disponível em: [〈https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2011.06.028〉](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2011.06.028).