



MODELAGEM NUMÉRICA DA SOLIDIFICAÇÃO EM MOLDES:
APLICAÇÃO A GRANADAS DE GRANDE CALIBRE

Aline Cruz Soares

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha
Lage
Luiz Fernando Lopes Rodrigues
Silva

Rio de Janeiro
Agosto de 2017

MODELAGEM NUMÉRICA DA SOLIDIFICAÇÃO EM MOLDES:
APLICAÇÃO A GRANADAS DE GRANDE CALIBRE

Aline Cruz Soares

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:

Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Prof. Fernando da Cunha Peixoto, D.Sc.

Prof. Letivan Gonçalves de Mendonça Filho, D.Sc.

Prof. Su Jian, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
AGOSTO DE 2017

Soares, Aline Cruz

Modelagem numérica da solidificação em moldes:
aplicação a granadas de grande calibre/Aline Cruz Soares.
– Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2017.

XXIII, 118 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de
Engenharia Química, 2017.

Referências Bibliográficas: p. 79 – 82.

1. Solidificação. 2. Método da entalpia. 3.
OpenFOAM. I. Lage, Paulo Laranjeira da Cunha *et al.*
II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE,
Programa de Engenharia Química. III. Título.

Àqueles que buscam a paz.

Agradecimentos

A Deus, Pai e Criador, e a Jesus, Mestre e Caminho, agradeço primeira e infinitamente.

Aos meus pais, Nadia e Gilson, que me incentivaram aos estudos desde a tenra idade e me deram todo o suporte possível para que eu alcançasse os meus objetivos, que eles sempre respeitaram.

Ao meu noivo, Carlos, que me acompanhou em todas as fases deste curso, em todos os dias.

Aos familiares e amigos de longa data, que compreenderam minha ausência em inúmeros eventos e me inundaram de palavras de incentivo e carinho.

Sou grata aos meus orientadores, os professores Paulo Laranjeira da Cunha Lage, do Programa de Engenharia Química da COPPE/UFRJ, e Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, da Escola de Química da UFRJ, não apenas pelos conhecimentos técnicos transmitidos mas também pelos ensinamentos de vida a que me conduziram.

Aos companheiros de Exército Brasileiro, superiores, pares e subordinados, que entenderam todas as minhas dificuldades e necessidades e me apoiaram durante todo o curso.

Às novas amizades, forjadas nesta árdua trajetória, companheiros de incontáveis horas. Nós sabemos o que passamos, Ana, Camila, Reinaldo, Daniel, ThiagoS, Nayher, Fábio, Lucas, França, Luciana, Henrique, Jonathan, Marcel, Daniele, Dayana, Guilherme, Thomas H. e todos os outros que ingressaram em 2015.

Aos indispensáveis monitores e demais apoiadores técnicos Athayde, Afrânio, Rafael, Chicrala, Felipe, Demuner, Iury, Mariana, Gustavo e Gobério.

Tornaram esta dissertação possível: Sônia, Carlos Eduardo e Flávio; Amanda, Jovani, Samel, Gabriel, Thainá, Luiz Felipe, André, seu Antônio, Andressa e demais companheiros do LTFD, sempre (sempre mesmo) muito solícitos, sempre deixando de lado suas inúmeras preocupações para dirimir uma dúvida ou abrandar uma preocupação; a Indústria de Material Bélico do Brasil (IMBEL), nas pessoas dos Srs Marcílio Melquíades e Luciano Paiva, ambos da Fábrica de Juiz de Fora; os novos companheiros de seção: TC Rebello, Maj Ermírio, Sgt Serpa, Sgt Pedro, Luiz e Sd Leonardo, que me proporcionaram incontestável apoio para o término deste trabalho.

Agradeço os conteúdos lecionados pelos outros professores dos quais tive a honra de ser aluna no programa e aos professores que compuseram a banca dos seminários de acompanhamento. Agradeço também aos integrantes da secretaria do programa, Vera, Luan e Luciana, sempre muito prestativos e atenciosos.

Aos professores Fernando da Cunha Peixoto (UFF), Maj Letivan Gonçalves de Mendonça Filho (IME) e Su Jian (COPPE/UFRJ), por terem aceitado prontamente fazer parte da banca de defesa desta dissertação.

Não poderia deixar de citá-los: Gen Luís Henrique, Gen Barroso Magno, Cel Carlos, Cel Menelau, Sgt Rodrigo Vieira, meu tutor acadêmico TC Conde, Luís Paulo da Silva Barra, Elson de Magalhães Toledo, Luiz Eduardo Pizarro Borges e Maj Galante.

A todos que me ofereceram palavras encorajadoras nas mais diversas ocasiões e nos mais variados corredores.

Por fim, agradeço a confiança em mim depositada pelas instituições Exército Brasileiro e Programa de Engenharia Química do Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa, da Universidade Federal do Rio de Janeiro.

*“Ninguém se eleva sem atender às
imposições da subida.”
(Emmanuel)*

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

MODELAGEM NUMÉRICA DA SOLIDIFICAÇÃO EM MOLDES:
APLICAÇÃO A GRANADAS DE GRANDE CALIBRE

Aline Cruz Soares

Agosto/2017

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage
Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva

Programa: Engenharia Química

No contexto do processo industrial de carregamento de granadas de grosso calibre com materiais energéticos, no presente trabalho foram simuladas diferentes condições de resfriamento, fase da fabricação representada fisicamente pela solidificação em moldes. Defeitos na carga solidificada, como bolhas, descontinuidades e tensões residuais, comprometem o emprego da granada e, por isso, projéteis com essas irregularidades são retrabalhados. O objetivo deste trabalho, então, é comparar diferentes condições de resfriamento e suas consequências no produto final, a fim de reduzir a taxa de retrabalho. O modelo matemático para representar a solidificação segue a formulação multifásica Euleriana e o procedimento numérico abrange as técnicas do método entalpia-porosidade e da aproximação de Boussinesq para tratar a convecção natural decorrente do gradiente de massa específica entre as fases líquida e sólida. As simulações foram realizadas no pacote aberto de CFD *Open-FOAM*, tendo-se realizado verificações com a solução de Neumann para o problema de Stefan e com resultados experimentais presentes na literatura. Os resultados com os dados dos explosivos sugerem a aplicação de uma ventilação forçada a 60 ou a 70°C para a obtenção de uma carga solidificada de melhor qualidade.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

NUMERICAL MODELING OF SOLIDIFICATION IN SHELLS: APPLIED TO
LARGE-CALIBRE PROJECTILES

Aline Cruz Soares

August/2017

Advisors: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva

Department: Chemical Engineering

In the context of casting mortar shells with energetic materials, in this work, various cooling conditions have been simulated, which physically involves the solidification phenomena. Defects in the solidified charge, such as bubbles, discontinuities and residual stress, compromises the employment of the artefact and, hence, projectiles that present those irregularities are reworked. The goal of this project is the comparison of various freezing conditions and their consequences on the quality of the final product, aiming the reduction of the rework rate. The mathematical model for representing the freezing process is based on an Eulerian multiphase formulation and the numerical procedure includes the enthalpy-porosity technique and the Boussinesq approximation, for dealing with the natural convection originated from the variations in the liquid and solid phases' densities. Simulations have been performed through the open-source CFD package *OpenFOAM* and verifications have been carried out using the analytical solution for the Stefan problem proposed by Neumann and experimental results from the literature. The results obtained using thermophysical data of actual explosive materials suggest the application of a forced ventilation at 60 or 70°C for a better quality in the product.

Sumário

Lista de Figuras	xii
Lista de Tabelas	xv
Lista de Símbolos	xvi
Lista de Abreviaturas	xxii
1 Introdução	1
1.1 Contextualização	1
1.2 Objetivo	2
1.3 Estrutura da dissertação	3
2 Revisão Bibliográfica	4
2.1 Histórico do tratamento do problema de solidificação	4
2.1.1 Solução analítica	4
2.1.2 Modelos matemáticos e soluções numéricas	7
2.1.3 Análises experimentais e numérico-experimentais	10
2.2 Fluidodinâmica computacional e o OpenFOAM	13
3 Metodologia	17
3.1 Modelo matemático	17
3.1.1 Abordagem de meio poroso: lei de Darcy	21
3.1.2 Aproximação de Boussinesq	24
3.1.3 Método da entalpia	25
3.1.4 Modelo multifásico aplicado ao problema de solidificação	27
3.2 Aspectos da implementação do modelo	31
3.3 Estudo de casos	35
3.3.1 Verificação com a solução de Neumann	35
3.3.2 Comparação com os artigos de BRENT <i>et al.</i> [1] e de GAU e VISKANTA [2]	37
3.3.3 Verificação da condição de contorno de 3 ^o tipo	38

3.3.4	Simulações de solidificação de explosivos em granadas	40
3.4	Procedimento numérico	45
4	Resultados e Discussões	49
4.1	Verificação com a solução de Neumann	49
4.2	Verificação com resultados de trabalhos anteriores	52
4.3	Verificação da condição de contorno de 3 ^o tipo	56
4.4	Simulações aplicadas ao carregamento de granadas	57
5	Conclusão e sugestões	77
	Referências Bibliográficas	79
A	Códigos <i>buoyantPimpleFoam</i> e <i>solidificationMeltingSource</i>	83
A.1	O <i>buoyantPimpleFoam</i>	83
A.2	O <i>solidificationMeltingSource</i>	95
B	Balanco de energia em função da energia interna sensível	112
C	Código <i>StefanNeumannFoam</i>	114

Lista de Figuras

2.1	Figura esquemática do problema de Stefan de solidificação unidimensional.	5
2.2	Volume de controle unidimensional ao redor do ponto P [3].	14
3.1	Representação genérica da zona <i>mushy</i> (adaptada de VOLLER <i>et al.</i> [4]).	23
3.2	Representação de diferentes morfologias da zona <i>mushy</i> [5].	24
3.3	Conjunto corpo da granada e aumentador: (a) modificada de SUN e GARIMELLA [6], esquema que mostra a localização aproximada do defeito de contração; (b) foto de MUDRYY <i>et al.</i> [7].	29
3.4	Domínio do problema unidimensional e suas condições de contorno.	36
3.5	Representação do domínio do problema do gálio com os nomes dos contornos.	37
3.6	Representação do domínio do problema da verificação da condição de contorno de 3º tipo.	39
3.7	Corte no plano xy do domínio do espaço interno da granada e denominação das condições de contorno.	42
4.1	Testes de convergência (a) de malha e (b) temporal do <i>bouyantPimpleFoam</i> nos instantes 5×10^{-6} , 1×10^{-5} e 2×10^{-5} s.	50
4.2	Testes de convergência (a) de malha e (b) temporal do <i>StefanNeumannFoam</i> nos instantes 5×10^{-6} , 1×10^{-5} e 2×10^{-5} s.	51
4.3	Confronto dos resultados do <i>bouyantPimpleFoam</i> e da solução analítica: (a) frentes de solidificação e (b) erro relativo nos instantes 5×10^{-6} , 1×10^{-5} e 2×10^{-5} s.	53
4.4	Estudo de convergência de malha para o caso 2D - isotermas no instante $t=10\text{min}$ (temperaturas em °C).	54
4.5	Comparação entre os resultados das isotermas obtidas por meio do <i>bouyantPimpleFoam</i> e do artigo de BRENT <i>et al.</i> [1] nos instantes (a) $t=3\text{min}$, (b) $t=10\text{min}$ e (c) $t=19\text{min}$ (temperaturas em °C).	54

4.6	Comparação entre os resultados das linhas de corrente obtidas por meio do <i>buoyantPimpleFoam</i> e do artigo de BRENT <i>et al.</i> [1] nos instantes (a) $t=3\text{min}$, (b) $t=10\text{min}$ e (c) $t=19\text{min}$	55
4.7	Frentes de fusão ($r_l = 0,5$), nos instantes $t=3$, $t=10$ e $t=19\text{min}$, obtidas por GAU e VISKANTA [2](GV), BRENT <i>et al.</i> [1](BVR) e por meio do <i>buoyantPimpleFoam</i> (OF) com as geometrias de BVR (2D) e GV (3D).	56
4.8	Comparação entre os erros relativos percentuais dos resultados da temperatura adimensionalizada, no ponto central do domínio, do método <i>backward</i> (bw), com os passos de tempo $dt = 1$ e $0,5\text{s}$, e do Euler implícito (Euler), com passo $dt = 1\text{s}$, de $t = 0$ a 10.000s	57
4.9	Confronto dos resultados para a temperatura adimensional no centro do domínio obtidos por meio do <i>buoyantPimpleFoam</i> com a condição de contorno de 3 ^o tipo e da solução analítica de $t=0$ a $t=10.000\text{s}$	58
4.10	Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) com as malhas grossa, média e fina para o caso I-3 (a) $t = 3.600\text{s}$ e (b) $t = 5.400\text{s}$	59
4.11	Corte da malha no plano xy em $t = 3.600\text{s}$	60
4.12	Corte da malha no plano xy em $t = 5.400\text{s}$	61
4.13	Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) nas condições I-1 a I-9 em (a) $t = 600\text{s}$ e (b) $t = 3.600\text{s}$	62
4.14	Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t=5.400\text{s}$ nos casos (a) I-1 a I-5 e (b) I-1 e I-6 a I-9.	64
4.15	Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t=5.800\text{s}$ nos casos (a) I-1 a I-5 e (b) I-1 e I-6 a I-9.	65
4.16	Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t=8.500\text{s}$ nos casos (a) I-1 a I-5 e (b) I-1 e I-6 a I-9.	66
4.17	Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 10.000\text{s}$ nos casos (a) I-1 a I-5 e (b) I-1 e I-6 a 9.	67
4.18	Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 13.650\text{s}$ nos casos (a) I-1 a I-5 e (b) I-1 e I-6 a 9.	68
4.19	Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) nos casos II-1 a II-9 nos instantes (a) $t = 600\text{s}$ e (b) $t = 3.600\text{s}$	70
4.20	Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 5.400\text{s}$ nos casos (a) II-1 a II-5 e (b) II-1 e II-6 a 9.	71
4.21	Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 5.800\text{s}$ nos casos (a) II-1 a II-5 e (b) II-1 e II-6 a II-9.	72
4.22	Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 8.500\text{s}$ nos casos (a) II-1 a II-5 e (b) II-1 e II-6 a II-9.	73
4.23	Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 10.000\text{s}$ nos casos (a) II-1 a II-5 e (b) II-1 e II-6 a II-9.	74

4.24 Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 13.650s$ nos casos (a) II-1 a II-5 e (b) II-1 e II-6 a II-9.	75
A.1 buoyantPimpleFoam.C (página 1 de 2).	84
A.2 buoyantPimpleFoam.C (página 2 de 2).	85
A.3 rhoEqn.H (página 1 de 1).	86
A.4 UEqn.H (página 1 de 1).	87
A.5 EEqn.H (página 1 de 1).	88
A.6 pEqn.H (página 1 de 2).	89
A.7 pEqn.H (página 2 de 2).	90
A.8 solidificationMeltingSource.H (página 1 de 5).	97
A.9 solidificationMeltingSource.H (página 2 de 5).	98
A.10 solidificationMeltingSource.H (página 3 de 5).	99
A.11 solidificationMeltingSource.H (página 4 de 5).	100
A.12 solidificationMeltingSource.H (página 5 de 5).	101
A.13 solidificationMeltingSourceIO.C (página 1 de 1).	102
A.14 solidificationMeltingSource.C (página 1 de 6).	103
A.15 solidificationMeltingSource.C (página 2 de 6).	104
A.16 solidificationMeltingSource.C (página 3 de 6).	105
A.17 solidificationMeltingSource.C (página 4 de 6).	106
A.18 solidificationMeltingSource.C (página 5 de 6).	107
A.19 solidificationMeltingSource.C (página 6 de 6).	108
A.20 solidificationMeltingSourceTemplates.C (página 1 de 1).	109
C.1 StefanNeumannFoam.C (página 1 de 1).	116
C.2 interfaceEqn.H (página 1 de 1).	117
C.3 TempEqn.H (página 1 de 1).	118

Lista de Tabelas

2.1	Hipóteses simplificadoras para o problema de Stefan (tabela adaptada de ALEXIADES e SOLOMON [5]).	5
3.1	Propriedades termo-físicas do <i>phase change material</i>	36
3.2	Condições iniciais e de contorno do problema de verificação com a solução de Neumann.	36
3.3	Condições iniciais e de contorno do problema do gálio (<i>*frontAndBack</i> denomina os contornos das paredes da frente e de trás no caso 3D).	38
3.4	Propriedades termo-físicas do gálio [1].	38
3.5	Condições iniciais e de contorno do problema da verificação da condição de contorno de 3 ^o tipo.	39
3.6	Propriedades termo-físicas para a verificação da condição de 3 ^o tipo.	39
3.7	Constantes ζ_1 a ζ_4 para o cálculo da solução analítica de Robin [8].	40
3.8	Casos simulados para cada explosivo.	41
3.9	Propriedades termo-físicas do TNT [9][10].	41
3.10	Propriedades termo-físicas da Composição B [9][11].	41
3.11	Condições iniciais e de contorno das simulações com TNT e Composição B.	43
3.12	Propriedades termo-físicas do ar.	45
3.13	Números adimensionais e coeficiente de convecção médio do ar.	45
3.14	Resumo dos casos com o TNT.	46
3.15	Resumo dos casos com a Composição B.	47
A.1	Variáveis das equações do conjunto <i>bPF+sMS</i> [12].	91
A.2	Operações e funções das equações do conjunto <i>bPF+sMS</i> [12].	93
C.1	Variáveis do código <i>StefanNeumannFoam</i>	114

Lista de Símbolos

A	entre “[]”, matriz de coeficientes em um sistema linear, p. 15
Bi	número de Biot, p. 40
C_n	coeficientes da solução analítica da condição de contorno de 3º tipo, p. 39
E_k	fonte de energia devido à interação da fase k com as outras presentes em um elemento, p. 21
$ Fo$	número de Fourier, p. 40
$ Gr_Z$	número de Grashof, p. 43
$ H_k$	entalpia total da fase k por unidade de massa, p. 25
$ K_k$	energia cinética da fase k por unidade de massa, p. 20
$ L$	calor latente por unidade de massa, p. 4
$ MM$	massa molar, p. 36
$ Pr$	número de Prandtl, p. 43
$ R_k$	atribuído a fontes de calor de campo externas por unidade de massa, p. 21
$ Ra_Z$	número de Rayleigh, p. 43
$ Re_D$	número de Reynolds, p. 43
$ S_C, S_P$	termos que surgem da linearização de \bar{S}_Ψ , p. 15
$ S_\Psi$	termo-fonte da equação de conservação de Ψ , p. 14
$ S_\rho$	soma dos termos-fonte da equação da continuidade da mistura no código <i>buoyantPimpleFoam</i> , p. 94
$ T$	temperatura, p. 4

T_∞	temperatura no fluido quiescente, p. 40
T_f	temperatura de filme, p. 44
T_i	temperatura inicial, p. 4
T_m	ponto de solidificação, p. 4
T_w	temperatura na parede, p. 4
U_k	energia interna total da fase k por unidade de massa, p. 20
V	volume de um elemento de controle, p. 18
V_k	volume ocupado pelo componente k em V , p. 18
$X_{sl}(t)$	posição de um ponto material da frente de solidificação, p. 4
Z	altura do domínio sob convecção, p. 43
ΔH_k	parcela da entalpia total da fase k relativa ao calor latente, p. 26
Δx	intervalo espacial, p. 15
$\Gamma_k U_{ki}$	fonte de energia que provém da massa de k gerada, p. 21
Γ_k	taxa de produção de massa de k por unidade de volume devido à mudança de fase, p. 18
$\Gamma_k \mathbf{u}_{ki}$	fonte de quantidade de movimento linear devido ao transporte de massa entre as fases, p. 19
Ψ	variável dependente qualquer (escalar ou não), p. 14
$\Psi_k(\mathbf{X}_k, t)$	descrição material de uma propriedade da fase k , p. 18
α_k	difusividade térmica de uma fase k , p. 4
\bar{C}	constante para o cálculo de $\bar{N}u$, p. 43
\bar{K}	escalar que representa a permeabilidade de um meio poroso isotrópico, p. 22
$\bar{N}u$	número de Nusselt médio, p. 43
\bar{T}	temperatura em uma condição de referência, p. 24
$\bar{\beta}$	fator de compressibilidade térmica, p. 24

$\bar{\rho}_l$	massa específica em uma condição de referência, p. 24
\bar{m}	constante para o cálculo de $\bar{N}u$, p. 43
\dot{Q}_k	taxa de calor trocado pela fase k por unidade de área do contorno de V_k , p. 21
$\dot{\bar{Q}}_k$	taxa de calor trocado pela fase k por unidade de área total do contorno do elemento, p. 21
ϵ_k	energia total da fase k por unidade de massa, p. 20
η	porosidade do meio, p. 22
$\dot{\rho}_k$	densidade mássica da fase k no elemento de volume V , p. 18
$\dot{\rho}_k \mathbf{b}_k$	resultante das forças de campo externas atuantes em k por unidade de massa, p. 19
I	tensor identidade, p. 20
K	tensor permeabilidade do meio poroso, p. 22
M_k	força sobre k devido à sua interação com as outras fases no elemento, p. 19
T_k	tensor tensão total que atua na fase k , p. 20
$\dot{\mathbf{q}}_k$	fluxo de calor da fase k por unidade de área total do contorno do elemento, p. 21
$\dot{\mathbf{t}}_k$	tração por unidade de área total sobre k , p. 19
\mathcal{F}_k^b	fonte de quantidade de movimento linear de campo, p. 19
\mathcal{F}_k^s	fonte de quantidade de movimento linear superficial da fase k , p. 19
$\boldsymbol{\tau}_k$	tensão viscosa na fase k , p. 20
\mathbf{q}_k	fluxo de calor da fase k por unidade de área no contorno de V_k , p. 21
\mathbf{t}_k	tração por unidade de área da fase k , p. 19
\mathbf{u}_k	velocidade intersticial da fase k , p. 18
\mathbf{u}_l	velocidade intersticial da fase líquida, p. 22

\mathbf{u}_{ar}	velocidade do ar na ventilação forçada, p. 43
\mathbf{u}_{ki}	velocidade de k em relação à interface i , p. 19
\mathbf{u}	velocidade superficial, p. 14
\mathbf{z}	a altura do centro do volume em relação à base da geometria, p. 32
λ	parâmetro da solução de Neumann, p. 7
\mathcal{D}	diâmetro do domínio sob convecção, p. 43
\mathcal{L}	comprimento característico, p. 39
\mathcal{P}_l	pressão modificada, p. 22
\mathcal{W}_k^b	fonte de energia de campo para a fase k , p. 21
\mathcal{W}_k^s	fonte de energia superficial da fase k , p. 21
ν	viscosidade cinemática, p. 44
\bar{S}_Ψ	valor médio de S_Ψ , p. 15
∂V	contorno total do volume de controle, p. 19
$\psi_k(\mathbf{x}, t)$	descrição espacial de uma propriedade da fase k , p. 18
ρ	massa específica (da mistura), p. 14
ρ_k	massa específica de uma fase k , p. 4
σ	fator de relaxação para o cálculo de r_l , p. 31
θ^*	temperatura adimensionalizada, p. 39
θ_Ψ	coeficiente de difusão da variável Ψ , p. 14
$\hat{\mathbf{n}}$	vetor unitário normal à superfície de V e que aponta para fora de V , p. 20
ϖ	coeficiente de convecção, p. 40
ζ_n	coeficientes da solução analítica da condição de contorno de 3º tipo, p. 39
b	entre “[]”, vetor independente em um sistema linear, p. 15
b	termo-fonte da equação discretizada, p. 15

c_k	calor específico a pressão constante por unidade de massa de uma fase k , p. 7
dt	passo de tempo, p. 49
h	entalpia sensível da mistura, p. 30
h_k	parcela da entalpia total da fase k relativa à entalpia sensível, p. 26
i	interface líquido-sólido, p. 19
k	condutividade térmica da mistura, p. 30
k_f	condutividade térmica do fluido na temperatura do filme, p. 43
k_k	condutividade térmica de uma fase k , p. 4
m_k	massa da fase k no elemento de volume V , p. 18
p_k	pressão na fase k , p. 20
p_l	pressão na fase líquida, p. 22
p_{ld}	pressão dinâmica no fluido, p. 24
p_{le}	pressão estática no fluido, p. 24
r_k	fração volumétrica média da fase k , p. 18
r_{l_p}	entre “[] ^{n+1*} ”: valor corrigido da fração de fase no instante de tempo atual, p. 31
r_l	entre “[] _{aux} ”: variável auxiliar para armazenar o valor calculado para a fração de fase antes da correção, p. 110
t	variável de tempo, instante, p. 4
u	energia interna sensível da mistura, p. 94, 113
u_k	energia interna sensível da fase k , p. 112
$u_l(t)$	velocidade da fase líquida, p. 4
x	entre “[]”, vetor de incógnitas em um sistema linear, p. 15
x	variável espacial, posição, p. 4

x^*	posição adimensionalizada, p. 39
C	constante do meio poroso, p. 22
subscrito E	centro do volume vizinho à direita do volume de P , p. 14
subscrito W	centro do volume vizinho à esquerda do volume de P , p. 14
subscrito e	referente à face direita, p. 14
subscrito k	uma fase qualquer, p. 4
subscrito l	relativo à fase líquida, p. 4
subscrito s	relativo à fase sólida, p. 4
subscrito sl	relativo à região da interface sólido-líquido, p. 4
subscrito w	referente à face esquerda, p. 14
subscrito c	referente a valor crítico, p. 44

Lista de Abreviaturas

CFD	Fluidodinâmica Computacional - <i>Computational Fluid Dynamics</i> , p. 2
FFAA	Forças Armadas, p. 1
FJF	Fábrica de Juiz de Fora, p. 2
IMBEL	Indústria de Material Bélico do Brasil, p. 2
OpenFOAM	<i>Open Source Field Operation And Manipulation</i> , p. 2
TNT, α -TNT	2,4,6-trinitro-tolueno, p. 2
<i>OF</i>	<i>OpenFOAM</i> ou, no contexto dos resultados, <i>bPF+sMS</i> , em oposição a soluções analíticas ou experimentais, p. 49
<i>PCM</i>	<i>phase change material</i> , p. 35
<i>PHOENICS</i>	<i>Parabolic Hyperbolic Or Elliptic Numerical Integration Codes</i> , p. 9
<i>PIMPLE</i>	composição dos algoritmos <i>PISO</i> e <i>SIMPLE</i> , p. 32
<i>PISO</i>	<i>Pressure-implicit split-operator</i> , p. 32
<i>PRESTO</i>	<i>pressure staggered option</i> , p. 11
<i>SIMPLEC</i>	<i>SIMPLE-Consistent</i> , p. 11
<i>SIMPLER</i>	<i>SIMPLE-Revised</i> , p. 8
<i>SIMPLE</i>	<i>Semi implicit method for pressure linked equations</i> , p. 9
<i>SNF</i>	<i>StefanNeumannFoam</i> , aplicativo no qual foi implementada a solução analítica de Neumann para o problema de Stefan, p. 49
<i>Sol An</i>	Solução analítica, p. 49

<i>VOF</i>	<i>Volume of fluid</i> , p. 10
<i>bPF+sMS</i>	quando é utilizado o <i>buoyantPimpleFoam</i> com as <i>fvOptions</i> do <i>solidificationMeltingSource</i> , p. 49
<i>fv</i>	<i>finite volume method</i> , p. 16

Capítulo 1

Introdução

1.1 Contextualização

O Brasil é um país onde a mentalidade geral do povo é pacífica e inclusiva, sendo marcado pela mistura de origens étnicas e aceitação das diferenças. Nosso Exército foi formado segundo esse mesmo padrão, com o objetivo de defender a nação por ocasião da Guerra do Paraguai e, desde então, manter nosso território incólume e nosso povo protegido constituem não apenas filosofias mas missões de nossas Forças Armadas (FFAA). Trabalhando nesse ideal diuturnamente, uma das atribuições das nossas Forças é desenvolver e aprimorar as tecnologias que equipam nossas tropas, proporcionando maiores eficácia, acurácia e segurança no seu uso, visando principalmente à proteção de todos [13].

Em uma das ramificações dessas tecnologias, estão contidas as munições de grande calibre que, nos tempos atuais, alimentam morteiros, obuses, canhões, mísseis e outros lançadores. Sua provável origem remonta às histórias de guerra grega e romana, quando pedras e outros objetos eram lançados em catapultas com o intuito de causar no inimigo expressivo número de baixas e avarias em veículos, armamentos e construções de grande porte, fosse visando à conquista de uma cidade, em posição de ataque, ou à defesa da população e do patrimônio de determinado local. As munições de grande calibre como as conhecemos atualmente começaram a ser fabricadas em larga escala durante a Primeira Guerra Mundial [14], enquanto a Indústria de Material Bélico do Brasil foi constituída em 1975 pela Lei Federal 6.227. A unidade industrial da IMBEL responsável pela fabricação das munições supramencionadas tem sua origem na Fábrica de Estojos e Espoletas de Artilharia, criada em 1933 pelo Decreto 23.624 de 20 de dezembro de 1933.

A evolução desses artefatos tem-lhes conferido novos atributos, como o aumento da quantidade de baixas na tropa inimiga e a diminuição de riscos no seu manuseio. Sendo seus núcleos compostos basicamente por um chamado “corpo” de aço ou ferro

fundido, tais granadas são preenchidas geralmente por algum material explosivo, que pode ser prensado ou vazado em estado fundido, vindo a solidificar-se posteriormente no processo produtivo. O explosivo de mais amplo emprego como carga principal, em alta pureza ou como parte de composições, é o 2,4,6-trinitro-tolueno, mais conhecido como TNT [9], sendo classificado como um alto explosivo secundário, devido à sua capacidade de detonação e ao seu grau de sensibilidade. Na indústria bélica, a etapa que abrange o preenchimento dos corpos de granada com explosivo fundido e a solidificação da carga é intitulada carregamento.

O fenômeno da solidificação é bastante explorado na engenharia, uma vez que o formato do molde e as condições de resfriamento influenciam diretamente na qualidade final do material, cujos requisitos técnicos podem não ser cumpridos devido à presença de bolhas, separações do molde, cavidades e outros defeitos que geram concentrações de tensão e outras anomalias. Quando se trata da indústria de munições, a preocupação é ainda mais genuína, dado que variações na carga, muitas vezes mencionadas como *hot spots*, constituem causa comum de detonações prematuras e explosões acidentais [15], levando a elevado número de óbitos tanto na tropa que atira quanto de civis.

Por esse motivo, 100% das munições produzidas na Fábrica de Juiz de Fora (FJF), uma das unidades de produção da Indústria de Material Bélico do Brasil (IMBEL), são radiografadas após o carregamento para, só depois de aprovadas mediante padrões de qualidade internacionais, seguirem seu curso na cadeia produtiva. Quando reprovadas, as granadas são retornadas à oficina, sendo submetidas à refusão parcial ou totalmente esvaziadas, o que gera descarte de grande parte do material explosivo.

Nesse sentido, a motivação deste estudo é a diminuição de custos de produção com a mitigação de defeitos na carga e consequente redução da taxa de retrabalho e perda de insumo, por meio de simulações computacionais da fase de resfriamento da etapa referida sob diferentes condições de contorno, com a finalidade de compará-los e de sugerir os que apresentem melhores resultados segundo esta técnica.

1.2 Objetivo

Em face do que foi abordado na seção anterior, o objetivo deste estudo foi uma melhor compreensão do fenômeno da solidificação em moldes, apresentando-a na seleção de modelos matemáticos que a representem, e a simulação de alguns casos de resfriamento, natural e forçado, no pacote livre *OpenFOAM* [16], de fluidodinâmica computacional (CFD), mais especificamente utilizando o aplicativo, também chamado de *solver*, *buoyantPimpleFoam* e a rotina *solidificationMeltingSource*.

1.3 Estrutura da dissertação

O presente trabalho está dividido da seguinte forma:

1. neste capítulo, foram abordados a motivação e o objetivo desta dissertação, situando-os brevemente no contexto militar e industrial do nosso país;
2. no Capítulo 2, foi redigido um histórico do tratamento da problemática aqui abordada, que embasou a seleção das técnicas que foram adotadas neste estudo;
3. os modelos matemáticos, o procedimento numérico e a caracterização das simulações foram apresentados no Capítulo 3;
4. no Capítulo 4 foram expostos e discutidos os resultados obtidos; e,
5. por fim, no Capítulo 5, constam as conclusões do trabalho e algumas propostas para continuação do mesmo.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Histórico do tratamento do problema de solidificação

2.1.1 Solução analítica

A primeira formulação relacionada ao fenômeno da transição de fase entre os estados líquido e sólido foi documentada no final do século XIX pelo matemático Jozef Stefan (apud [5]). Tal categoria de problemas, à qual foi atribuído o sobrenome do matemático, destaca-se por ao menos uma parte do contorno ser móvel, a frente de mudança de fase, que constitui uma das saídas da própria solução. Sistemas com essa característica são conhecidos como problemas de contorno livre (*free boundary problems*) ou móvel (*moving boundary problems*).

Stefan, no estudo do mapeamento da temperatura e da frente de solidificação durante o congelamento da água, obteve resultados satisfatórios entre experimentos práticos e o emprego de equações para o balanço de energia de cada uma das fases e da interface. A principal peculiaridade do modelo é a presença de um termo de condição de salto [5], como será mostrado a seguir.

Propõe-se o caso de um domínio unidimensional semi-infinito preenchido por um fluido cujo ponto de solidificação é T_m , inicialmente à temperatura $T_i > T_m$ e que tem, em sua origem, uma parede submetida à temperatura $T_w < T_m$ a partir do instante $t = 0$, conforme a Figura 2.1. Sob as hipóteses que constam na Tabela 2.1 e sendo T a temperatura, x a variável espacial, ρ_l e ρ_s as massas específicas das fases líquida (subscrito l) e sólida (subscrito s) respectivamente, α_l e α_s suas difusividades térmicas, k_l e k_s suas condutividades térmicas, $X_{sl}(t)$ e $u_l(t)$ a posição e a velocidade de um ponto material da frente de solidificação e L o calor latente por unidade de massa, Stefan derivou o modelo matemático posto nas Equações 2.1-2.9 [17]:

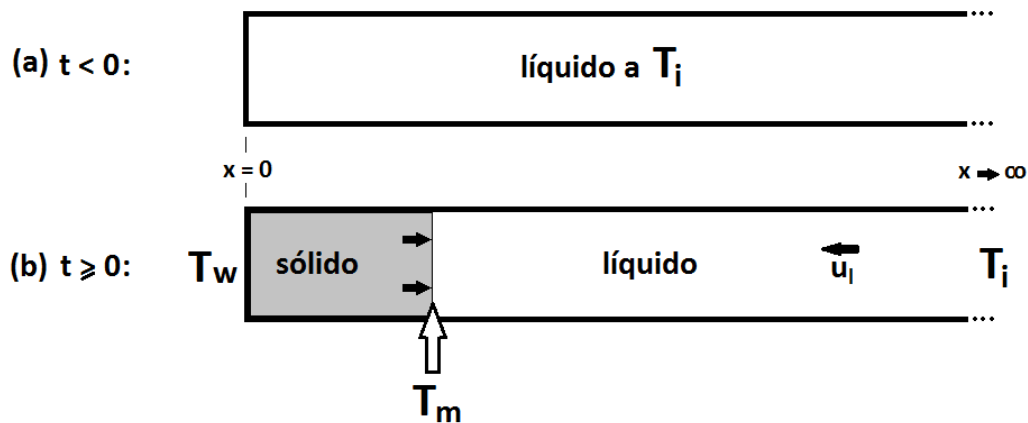


Figura 2.1: Figura esquemática do problema de Stefan de solidificação unidimensional.

Tabela 2.1: Hipóteses simplificadoras para o problema de Stefan (tabela adaptada de ALEXIADES e SOLOMON [5]).

Fatores físicos	Hipóteses
Transferência de calor e massa por condução, convecção, radiação e outros efeitos	Calor transferido por condução isotrópica e por convecção
Liberação ou absorção de calor latente	Calor latente constante transferido na temperatura de mudança de fase
Variação da temperatura de mudança de fase	Temperatura de mudança de fase única e conhecida, uma propriedade do material
Nucleação e efeitos de super-resfriamento	Negligenciados
Espessura e estrutura da interface	Interface localmente planar e infinitesimal, estando na temperatura de mudança de fase
Tensão superficial e efeitos de curvatura na interface	Negligenciados
Variação das propriedades termofísicas	$c_s \neq c_l$ e $k_s \neq k_l$ constantes
Variação na massa específica	$\rho_s > \rho_l$, constantes

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_s \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad 0 < x < X(t), \quad t > 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_l(t) \frac{\partial T}{\partial x} = \alpha_l \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad x > X(t), \quad t > 0 \quad (2.2)$$

$$u_l(t) = - \left(\frac{\rho_s}{\rho_l} - 1 \right) \frac{dX_{sl}}{dt}, \quad t > 0 \quad (2.3)$$

$$k_s \frac{\partial}{\partial x} T(X_{sl}(t)^-, t) - k_l \frac{\partial}{\partial x} T(X_{sl}(t)^+, t) = \rho_l L \frac{dX_{sl}}{dt} + \frac{1}{2} \rho_l \left[1 - \left(\frac{\rho_l}{\rho_s} \right) \right]^2 \left(\frac{dX_{sl}}{dt} \right)^3 \quad (2.4)$$

$$T(x, 0) = T_i, \quad \forall x \quad (2.5)$$

$$T(0, t) = T_w, \quad t > 0 \quad (2.6)$$

$$T(X(t), t) = T_m, \quad t > 0 \quad (2.7)$$

$$X_{sl}(0) = 0 \quad (2.8)$$

$$T(x, t) = T_i, \quad x \rightarrow \infty \quad (2.9)$$

A Equação 2.1 constitui o balanço de energia na fase sólida, que se mantém imóvel e adquire massa e, conseqüentemente, volume no decorrer da mudança de fase (Figura 2.1), enquanto que a Equação 2.2 trata do balanço de energia na fase líquida, que se movimenta devido à contração do material na solidificação, pois $\rho_s > \rho_l$; eis a relevância de o domínio ser semi-infinito: permitir o repletamento contínuo de massa líquida no sistema. A Equação 2.3, derivada do princípio da conservação de massa, traz a velocidade de um ponto material da frente de solidificação que, no caso em que as propriedades termo-físicas são constantes, é proporcional à velocidade da interface dX_{sl}/dt . A Equação 2.4 é a dita condição de Stefan, que modela o balanço de energia na interface. Uma vez que o termo associado à variação de energia cinética é muito menor que aquele relativo ao calor latente, $(1/2)\rho_l[1-(\rho_l/\rho_s)]^2(dX_{sl}/dt)^3 \ll \rho_l L(dX_{sl}/dt)$, o último termo do lado direito dessa equação pode ser desprezado [5]. Nas Equações 2.5-2.9 constam as condições iniciais e de contorno.

Negligenciando-se o último termo do lado direito da Equação 2.4, o sistema de equações do modelo descrito acima admite solução analítica [5]. Ao se aplicar

uma variável de similaridade da forma $\xi = x/\sqrt{t}$, obtém-se a conhecida solução de Neumann, reunida nas Equações 2.10-2.12:

$$X_{sl}(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha_s t}, \quad t > 0 \quad (2.10)$$

$$T(x, t) = T_w + \frac{T_m - T_w}{\operatorname{erf} \lambda} \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_s t}} \right), \quad 0 \leq x \leq X_{sl}(t), \quad t > 0 \quad (2.11)$$

$$T(x, t) = T_i - (T_i - T_m) \left[\operatorname{erfc} \left(\lambda \frac{\rho_s \sqrt{\alpha_s}}{\rho_l \sqrt{\alpha_l}} \right) \right]^{-1} \operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2\sqrt{\alpha_l t}} + \frac{\lambda(\rho_s - \rho_l)\sqrt{\alpha_s}}{\rho_l \sqrt{\alpha_l}} \right], \quad x \geq X_{sl}(t), \quad t > 0 \quad (2.12)$$

nas quais erf e erfc são, respectivamente, as funções erro e erro complementar e λ é a única raiz positiva da Equação 2.13 [5]:

$$\frac{\exp(-\lambda^2)}{\operatorname{erf}(\lambda)} - \frac{(T_i - T_m)k_l\sqrt{\alpha_s}}{(T_m - T_w)k_s\sqrt{\alpha_l}} \frac{\exp \left[- \left(\frac{\lambda\rho_s\sqrt{\alpha_s}}{\rho_l\sqrt{\alpha_l}} \right)^2 \right]}{\operatorname{erfc} \left(\lambda \frac{\rho_s\sqrt{\alpha_s}}{\rho_l\sqrt{\alpha_l}} \right)} = \frac{L\lambda\sqrt{\pi}}{c_s(T_m - T_w)} \quad (2.13)$$

em que c_s é o calor específico à pressão constante da fase sólida.

A Equação 2.10 traz a posição da interface no instante t , enquanto as Equações 2.11 e 2.12 permitem calcular a distribuição de temperatura no instante t respectiva e estritamente na região que se encontra na fase sólida e naquela em fase líquida.

Além do problema supracitado, sistemas unidimensionais com outras peculiaridades, como com algumas propriedades iguais para ambas as fases ou com a formação de um “vazio” entre a parede e a fase sólida ou ainda abordando a solidificação de ligas em vez de materiais puros, e até alguns sistemas bi ou tridimensionais com geometria e condições simples também apresentam solução ou aproximação analítica [5], sendo imprescindível ignorar o termo cúbico na equação da interface.

2.1.2 Modelos matemáticos e soluções numéricas

GANESAN e POIRIER [18] obtiveram equações individuais de conservação de massa e de movimento para modelar o escoamento da fase líquida na interface de solidificação, que é considerada uma região finita. Para tanto, utilizam promediação volumétrica, valendo-se da hipótese do *continuum* de que as quantidades médias devem ser funções contínuas do tempo e do espaço e independentes do tamanho do volume médio. O balanço de energia não foi tratado, uma vez que a região abrangida encontra-se toda no ponto de solidificação.

A característica finita, e não infinitesimal, da interface se deve à natureza acidentada de sua geometria dendrítica, motivo pelo qual os autores, para reduzirem a complexidade da solução, migraram da escala microscópica para a macroscópica através das médias e de algumas simplificações. A fase líquida foi considerada um fluido Newtoniano, a fase sólida é imóvel e todo o domínio constitui um meio poroso, o qual foi modelado segundo a lei de Darcy.

TROVANT e ARGYROPOULOS [19] modelaram, com equacionamento de fase combinada, popularmente tratado como de mistura, a contração de um material que sofre solidificação, causada tanto pela redução da temperatura na fase líquida até o ponto de solidificação quanto pela diferença de massas específicas entre as fases líquida e sólida na solidificação propriamente dita. Para tanto, definiram, como hipóteses, que o material é homogêneo e isotrópico, as fases são incompressíveis e a fase líquida é Newtoniana e desenvolve escoamento laminar.

Na equação do movimento, incluíram o termo de Boussinesq para induzir empuxo e produzir convecção natural e, para evitarem descontinuidades devido ao salto das propriedades na interface de mudança de fase, utilizaram-se da estratégia de modelar a viscosidade como função da temperatura, de modo que, à medida em que o material vai solidificando e esfriando, torna-se bem viscoso, o que praticamente impede o seu movimento. Tensões superficiais foram desprezadas. No tratamento da energia, para obter a temperatura em função da massa específica, citou-se a adoção de um método de integração do calor para lidar com o salto na solidificação devido ao calor latente.

A formulação permitiu a simulação utilizando malha fixa. Para a discretização, TROVANT e ARGYROPOULOS [19] empregaram o método das diferenças finitas em volumes de controle, e as equações foram acopladas segundo o algoritmo *SIMPLER*, *Semi implicit method for pressure linked equations-Revised*. A implementação foi verificada com a solução de Neumann para um problema unidimensional.

VOLLER e PRAKASH [20] apresentaram uma modelagem matemática para tratamento numérico, também com malha fixa, para problemas nos quais a mudança de fase não é necessariamente isotérmica, podendo ocorrer em um intervalo de temperaturas (geralmente em materiais não puros, ligas metálicas) e levando a uma frente de solidificação de espessura considerável, chamada região *mushy*. O sistema é composto apenas por material solidificado, *mushy* ou líquido, considerando fluido Newtoniano.

Para sua formulação, que, embora tal informação não esteja clara no artigo, é de fase combinada, fizeram uso da modelagem de meio poroso de Darcy, por meio da equação de Carman-Kozeny, e do método da entalpia, empregando uma função linear para calcular a fração de fase em função da temperatura sem perda

de generalidade do método [20]. Utilizaram-se ainda do termo de Boussinesq na equação do movimento para forçar convecção natural [20].

As equações do artigo de VOLLER e PRAKASH [20], discretizadas segundo o método dos volumes finitos descrito por PATANKAR [21], foram implementadas no pacote comercial *PHOENICS*[22], *Parabolic Hyperbolic Or Elliptic Numerical Integration Codes*, por meio do algoritmo *SIMPLE*. Os resultados, obtidos para um problema bidimensional, foram qualitativos, apresentando a evolução da frente de solidificação no tempo e a redução gradativa da velocidade na zona *mushy*.

O método da entalpia-porosidade é novamente empregado em BRENT *et al.* [1], que buscam mostrar sua eficiência na modelagem de sistemas sob mudança de fase isotérmica sólido-líquido que apresentam efeitos de difusão e convecção. Neste estudo também é justificado o emprego do método para a simulação com malhas fixas.

O modelo matemático utilizado por BRENT *et al.* [1] é, em sua base, o mesmo utilizado para fluidos Newtonianos incompressíveis, com a adição de termos-fonte que lidam com a mudança de fase. A aproximação de Boussinesq é empregada para tratar a convecção natural, enquanto a porosidade é modelada com o termo de Darcy traduzido na equação de Carman-Kozeny. A equação para o cálculo da fração de fase líquida advém da discretização da equação da energia.

Nesse artigo consta ainda que foi utilizado o algoritmo de acoplamento *SIMPLE*, o esquema de discretização espacial *power law* para todos os termos e um esquema de discretização temporal implícito (não especificado).

Os resultados da simulação são confrontados com os resultados do experimento de GAU e VISKANTA [2] para uma placa vertical do metal gálio, que será citado posteriormente, havendo uma boa concordância entre ambos. São ainda gerados gráficos do acompanhamento do perfil de temperaturas e do fluxo de corrente ao longo do tempo.

RAESSI e MOSTAGHIMI [23] modelaram a variação de densidade durante a solidificação de gotículas de estanho lançadas em uma superfície, processo empregado para criar uma camada de proteção contra corrosão e choques térmicos em estruturas diversas e que, para ser efetivo, não pode admitir falhas no encamisamento, motivo pelo qual se desejou compreender a contração da massa de estanho durante sua solidificação.

Para tanto, consideraram constantes, embora diferentes entre si, as massas específicas das fases líquida e sólida, decorrendo disso que apenas a contração durante a solidificação fosse contabilizada. A fase líquida é assumida Newtoniana e o escoamento do líquido é laminar através do meio poroso sólido, que se mantém imóvel. Apenas a tensão normal, na superfície livre do líquido, é considerada e os efeitos do ar ambiente são ditos desprezados, embora haja um tratamento com método

VOF (*Volume of fluid*) para a superfície livre do material com a definição da função escalar f como sendo a “fração volumétrica de material”:

$$f := \begin{cases} 1, & \text{se é o material em questão (sólido ou líquido)} \\ 0, & \text{se não é o material (se é ar, por exemplo)} \end{cases} \quad (2.14)$$

Os autores utilizaram a abordagem multi-fluido com uma equação de fase combinada para o balanço de massa, enquanto que as equações para o balanço da quantidade de movimento do líquido e de energia para ambas as fases foram geradas a partir de manipulações da abordagem mono-fluido, sem termos de interação entre as fases.

Os métodos numéricos empregados foram o *RIPPLE* (que significa “ondulação” em tradução livre), baseado em diferenças finitas [24], para um problema bidimensional e volumes finitos para os problemas tridimensionais, e as implementações foram validadas primeiramente com a solução de Neumann para o problema de Stefan unidimensional. A segunda validação conferiu apenas a contração final do volume, quando todo o material líquido tornou-se sólido.

Não foram encontrados trabalhos que intencionassem a simulação de carregamento de explosivos no *OpenFOAM* [16], mas há os que tenham simulado problemas de solidificação.

KASCHNITZ *et al.* [25] compararam o desempenho de diferentes pacotes, como *MAGMASOFT*, *FLOW-3D*, *ANSYS* e o próprio *OpenFOAM*, no que se refere à solidificação em moldes, entretanto não consideraram efeitos de convecção, constando no modelo apenas a equação da energia.

Outro trabalho implementado no *OpenFOAM* foi o de BOURDILLON *et al.* [26], que será comentado na Subseção 2.1.3.

2.1.3 Análises experimentais e numérico-experimentais

Um dos trabalhos experimentais mais expressivos no estudo da evolução da mudança de fase sólido-líquido é o de GAU e VISKANTA [2]. Os autores realizaram experimentos de fusão e de solidificação utilizando o metal gálio que, além de apresentar ponto de fusão/solidificação bem próximo à temperatura ambiente, tem propriedades termo-físicas bem estabelecidas e grande importância industrial.

No referido estudo, foi obtido o acompanhamento da frente de fusão de três diferentes placas verticais ao longo do tempo, cada uma sujeita a uma temperatura mais alta que o ponto de fusão em uma das paredes laterais, a uma temperatura mais baixa na parede oposta e isoladas termicamente nas outras paredes (superior, inferior, frente e trás). Na documentação das curvas geradas pelos resultados, foram desprezadas as discrepâncias observadas entre essas curvas nos diferentes planos paralelos às paredes da frente e de trás, por terem sido constatadas negligenciáveis.

Não foi obtida, contudo, a evolução do perfil da frente de solidificação, uma vez que foi constatado alto índice de irregularidade na frente, provavelmente devido ao notável grau de anisotropia do material.

SUN e GARIMELLA [6] simularam a contração que ocorre durante o processo de solidificação do TNT em um molde cilíndrico, com o objetivo de obter numericamente o perfil da cavidade formada devido à contração da massa, conhecida como rechupe. O sistema é composto por TNT líquido e sólido e também por ar, que preenche a cavidade e, para isso, foi utilizada a técnica do *VOF*. A fase líquida foi considerada Newtoniana e incompressível e a fase sólida mantida fixa. Como fontes para o modelo matemático, SUN e GARIMELLA [6] utilizaram os artigos de GANESAN e POIRIER [18] e RAESSI e MOSTAGHIMI [23]. Contudo, as equações que constam impressas no artigo não correspondem àsquelas dos artigos originais e a autora do presente trabalho não conseguiu derivá-las na exata forma como se apresentam.

Supõe-se que os autores tenham empregado, simultaneamente, duas técnicas cuja função é evitar o salto das propriedades na interface de solidificação: a viscosidade em função da temperatura e o termo-fonte de meio poroso, ambas mencionadas na Subseção 2.1.2. A suposição está no nome do método utilizado, entalpia-porosidade (tradução livre de *enthalpy-porosity*), e do fato de haver um termo na equação do movimento o qual não foi explicado mas tem a mesma notação do termo de Darcy do pacote comercial *ANSYS FLUENT* [27], que foi a ferramenta utilizada.

A simulação também foi realizada em malhas fixas e, para o acoplamento pressão-velocidade, utilizou-se o algoritmo *SIMPLEC*, *SIMPLE-Consistent*, com a opção *PRESTO*, *pressure staggered option*, para a correção da velocidade.

O modelo foi validado com a solução de Neumann para o problema de Stefan unidimensional com formação de vazão. Os autores procederam experimentos de carregamento de um molde cilíndrico com TNT, fixando termopares a diferentes alturas, com cujos resultados a simulação tridimensional foi confrontada, tendo-se conseguido um bom comportamento dos perfis de temperatura obtidos nas simulações em comparação com os resultados experimentais.

MUDRYY *et al.* [7] realizaram experimentos reais e numéricos no estudo de soluções para a redução de defeitos na massa explosiva solidificada no processo de carregamento de granadas em projéteis. Foram impostas e simuladas condições de pré-aquecimento do molde, resfriamento forçado com o uso de vapor, água e resistência elétrica, e de vibração mecânica, com o intuito de facilitar o recompletamento do rechupe com fundido.

Para a modelagem matemática do problema, foram utilizadas as equações de balanço para fluido Newtoniano incompressível com o acréscimo da aproximação de Boussinesq e do termo-fonte de Darcy, com o uso da equação de Carman-Kozeny, e

o transporte de energia foi tratado pelo método da entalpia. As simulações foram executadas nos programas *ANSYS FLUENT*[27], *ANSYS MECHANICAL*[28], *NO-VAFLOW&SOLID*[29] e *ProCast*[30] com a geometria de uma munição de morteiro 120 mm, tendo sido empregado o método *VOF* para o acompanhamento do rechupe.

Os resultados conduziram à proposição de um novo formato de aumentador, no qual deve ser mantida uma temperatura alta, enquanto o corpo da granada é submetido a uma temperatura gradualmente mais baixa com o objetivo de se obter uma frente de solidificação suave e uniforme, controlando-se, assim, o formato do rechupe e reduzindo as tensões térmicas. Dentre as propostas de estudos futuros, consta o estudo dos efeitos do aquecimento do conjunto aumentador-corpo da granada com vapor.

BOURDILLON *et al.* [26] implementaram, no *OpenFOAM*, dois modelos de solidificação para a formação de gelo baseados no método de entalpia-porosidade: um deles considera a presença de uma zona *mushy*, quando placas de gelo são formadas, enquanto o outro contabiliza, além da zona *mushy*, efeitos de *slurry* (“pasta” ou “lama”, em tradução livre), que acontece quando há pequenas partículas sólidas recém-formadas no líquido. A transição da região *slurry* para a *mushy* se dá a partir de um valor de fração volumétrica de sólido considerado crítico.

Para modelar o meio poroso, foi utilizada a lei de Darcy, sendo que o termo que a representa, na equação do movimento, recebe uma modificação quando o efeito *slurry* é considerado. O cálculo da viscosidade também é modificado nessa região. Em ambos aplicativos, para o cálculo da fração de fase líquida a cada iteração, empregou-se, no lugar da função linear proposta por VOLLER e PRAKASH [20], uma função erro para melhor distinção entre as regiões de fase líquida, *slurry* (quando considerada), *mushy* e de fase sólida (apud [26]). A utilização dessa função foi validada com resultados experimentais (apud [26]).

Para inicializar os dois aplicativos supracitados, uma terceira rotina foi implementada. Nela, a equação de balanço de massa é a comum aos modelos incompressíveis e a equação do movimento utiliza a aproximação de Boussinesq para simular a convecção natural. Neste programa de inicialização, não foi utilizado o método da entalpia, mas uma equação de calor em função da temperatura, pois ele não trata da mudança de fase, ficando isso a critério dos outros dois.

As aplicações computacionais foram validadas com resultados experimentais ou obtidos por meio de simulações em pacotes comerciais. Os resultados obtidos pelo aplicativo que prevê a região de *slurry* mostraram maior acréscimo de erro ao longo do tempo, nas regiões de transição de fase, que aquele que não considera essa região, mas as discrepâncias foram atribuídas à modelagem utilizada para representar o recipiente do experimento, de modo que os resultados foram considerados satisfatórios [26].

2.2 Fluidodinâmica computacional e o Open-FOAM

Segundo VERSTEEG e MALALASEKERA [3], o conjunto de ferramentas a que se denomina fluidodinâmica computacional (CFD), que reúne técnicas de simulação computacional de sistemas que abrangem escoamentos, transferência de calor e outros fenômenos acoplados, teria sido introduzido na indústria na década de 60. A evolução inexorável dos processadores possibilitou o tratamento de sistemas de crescentes níveis de complexidade, levando à ampliação contínua de seu emprego, que alcança nichos cada vez mais diversificados.

Sua importância ressalta-se pelo fato de possibilitar a redução expressiva da quantidade de experimentos físicos e gerar resultados em um intervalo de tempo também reduzido [21], o que leva a custos de produção cada vez mais baixos e, principalmente, à menor exposição a procedimentos arriscados em termos de segurança, como o podem ser os que envolvem explosivos, permitindo serem testadas condições diversas e previstos comportamentos anômalos ou ótimos. Em contrapartida, há o fato de que as simulações numéricas são baseadas em modelos matemáticos, que não tratam exatamente a realidade como os experimentos o fazem, embora possam alcançar níveis bastante satisfatórios [21].

A aplicação de CFD resume-se em transformar as equações diferenciais que modelam um sistema físico em equações algébricas, conjugando-se variadas estratégias de discretização de termos temporais e espaciais, que podem apresentar um viés puramente matemático ou relevar características reais do escoamento para melhor representá-lo, quando essa consideração gera alterações significativas nos resultados. Vale ressaltar, contudo, que os métodos numéricos obtêm resultados em pontos determinados no domínio, isto é, discretos, e não na forma de uma função contínua [21].

Dentre as técnicas de discretização espacial, destacam-se elementos finitos, diferenças finitas e volumes finitos, enquanto, no que se refere à discretização temporal, são mais utilizados os algoritmos de Euler explícito, implícito ou semi-implícito (uma combinação linear dos dois anteriores).

Na maior parte dos programas do pacote aberto *OpenFOAM*, as equações estão discretizadas espacialmente segundo o método dos volumes finitos e os métodos de interpolação podem ser selecionados no momento das simulações.

Em linhas gerais, o método de discretização por volumes finitos baseia-se em dividir o domínio em, como o próprio nome sugere, volumes de controle finitos, que não se sobrepõem e, ao mesmo tempo, preenchem-no completamente, e integrar as equações diferenciais do modelo em cada um desses volumes [21]. Uma das grandes vantagens desse procedimento é que as equações algébricas obtidas satisfazem

aos princípios de conservação [21], o que não necessariamente ocorre com outros métodos, como o de elementos finitos ou de diferenças finitas.

Por exemplo, a equação de conservação de uma variável dependente qualquer (escalar ou não) Ψ em estado estacionário e em sua forma conservativa [31] é:

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \Psi) = \nabla \cdot (\theta_\Psi \nabla \Psi) + S_\Psi \quad (2.15)$$

na qual ρ é a massa específica do fluido, \mathbf{u} é a sua velocidade, θ_Ψ é o coeficiente de difusão da variável Ψ e S_Ψ é um termo-fonte. Em um volume de controle de um domínio unidimensional que tem como centro o ponto P , como o da Figura 2.2, a Equação 2.15 seria integrada da seguinte forma:

$$(\rho \mathbf{u} \Psi)_e - (\rho \mathbf{u} \Psi)_w = \left(\theta_\Psi \frac{d\Psi}{dx} \right)_e - \left(\theta_\Psi \frac{d\Psi}{dx} \right)_w + \int_w^e S_\Psi dx \quad (2.16)$$

sendo o índice e referente à face à direita de P e w à face à esquerda.

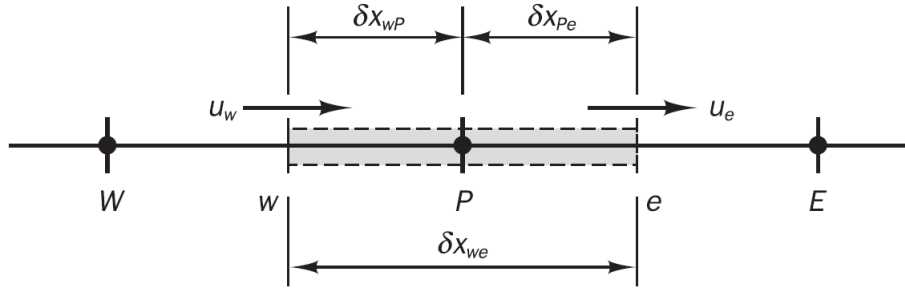


Figura 2.2: Volume de controle unidimensional ao redor do ponto P [3].

Para calcular os fluxos que atravessam as faces e ou w , podem ser assumidas diferentes expressões [21]: baseadas puramente nos valores estabelecidos para o ponto P , ou interpolações essencialmente matemáticas (lineares ou *splines*) ou ainda que considerem características do escoamento, como a velocidade do fluido (*upwind* ou *downwind*). Independentemente da aproximação escolhida, sendo E e W os centros dos volumes vizinhos à direita e à esquerda de P , pode-se obter uma equação da forma:

$$a_P \Psi_P = a_e \Psi_e + a_w \Psi_w + b \quad (2.17)$$

ou

$$\begin{aligned} a_P \Psi_P &= a_E \Psi_E + a_W \Psi_W + b \\ &= \sum_{nb} a_{nb} \Psi_{nb} + b \end{aligned} \quad (2.18)$$

consistindo a_P , a_e , a_w , a_E e a_W em constantes calculadas, segundo a aproximação escolhida, a partir dos valores de ρ e θ_Ψ para os respectivos pontos ou faces e das

distâncias entre os pontos, nb representando os pontos nos centros dos volumes vizinhos a P e $b = \bar{S}_\Psi \Delta x$, onde \bar{S}_Ψ é um valor médio de S_Ψ . Adota-se procedimento análogo ao descrito para sistemas de mais dimensões.

Quatro são os requisitos para a estabilidade do método: o fluxo da variável Ψ que “entra” em cada face deve ser igual ao que “sai” dela; as constantes a_i devem ter o mesmo sinal; dado que \bar{S}_Ψ geralmente é linearizado para o formato $S_C + S_P \Psi_P$, em que S_C e S_P são constantes, S_P deve ser nulo ou ter o sinal oposto ao de a_P ; e $a_P = \sum_{nb} a_{nb}$ para satisfazer casos para os quais $\Psi = 0$ [21]. Em problemas transientes, para atender a alguns desses requisitos, geralmente faz-se uso do esquema de discretização temporal, optando-se por calcular alguns termos de forma explícita para que não componham a matriz de coeficientes, mas sim o termo-fonte. Observa-se ainda que a linearização de \bar{S}_Ψ gera modificações no cálculo das constantes da Equação 2.18.

Outra característica do método é que diferentes variáveis dependentes podem ser representadas pelos seus valores nos centros dos volumes, como no caso de Ψ no exemplo, ou em pontos pertencentes às faces, permitindo, o método, utilizar arranjos descontraídos de variáveis em um mesmo problema [31].

O conjunto das equações da forma da Equação 2.18, advindas da integração da equação diferencial em todos os volumes de controle do domínio, é, então, escrito na forma de um sistema linear $[A][x] = [b]$, em que a $[A]$ é a matriz composta pelos coeficientes a_i , $[x]$, é o vetor de incógnitas, tendo como componentes os valores da função Ψ no centro de cada volume, e $[b]$ é o vetor dos termos independentes. Uma ampla gama de métodos numéricos pode ser utilizada para solucionar esse sistema, sendo escolhidos em conformidade com as peculiaridades de cada problema.

O *Open Source Field Operation And Manipulation*, comumente referido como *OpenFOAM*, é, então, um pacote de bibliotecas de *CFD* majoritariamente escritas na linguagem *C++*, aberto e composto basicamente por aplicações, utilitários para manipulação de dados e casos tutoriais que funcionam como um estudo dirigido para os usuários [16]. O acesso a esses componentes é bastante intuitivo, sendo os diretórios, as aplicações e os casos tutoriais denominados de acordo com a área do conhecimento, a funcionalidade ou o problema físico.

A disponibilidade de seus códigos proporciona muitas possibilidades de aplicação, desde a variação dos casos tutoriais até a dos aplicativos e outros utilitários. É inerente à linguagem na qual os códigos são programados, em sua maioria, a característica da orientação a objetos, o que foi aproveitado eficazmente para fazer com que os códigos mais utilizados pelos usuários tivessem notação bastante próxima à da matemática, como se pode observar no seguinte exemplo: a solução de uma

equação conservativa da entidade Ψ na forma:

$$\frac{\partial(\rho\Psi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\Psi) = \nabla \cdot (\theta_\Psi \nabla \Psi) \quad (2.19)$$

pode se resumir ao excerto de código abaixo:

```
solve
(
    fvm::ddt(rho,Psi)
+   fvm::div(phi,Psi)
==
    fvm::laplacian(thetaPsi,Psi)
);
```

no qual a expressão `fvm::ddt(rho,Psi)` corresponde a $\partial(\rho\Psi)/\partial t$, `fvm::div(phi,Psi)` é $\nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\Psi)$ (sendo `phi` = $\rho\mathbf{u}$ interpolado na face) e `fvm::laplacian(thetaPsi,Psi)` é $\nabla \cdot (\theta_\Psi \nabla \Psi)$, não se fazendo necessário, todavia admissível, penetrar nos níveis dos métodos numéricos e das entidades tensoriais. *fvm* é uma entidade do *OpenFOAM* e significa *finite volume method*; ela identifica os termos dos quais serão calculados os coeficientes de [A] supracitados, enquanto os valores de Ψ serão calculados em [x].

A comunidade de programadores de diferentes graus de experiência é extremamente colaborativa, sendo promovida em fóruns na internet a sinergia entre os interessados por sistemas físicos restritos ou pelo desenvolvimento do pacote como um todo, em prol do aprimoramento contínuo dos resultados obtidos.

Capítulo 3

Metodologia

3.1 Modelo matemático

BRENNEN [32] define escoamentos multifásicos como aqueles em que se encontra mais de uma fase ou componente, classificando-os, quanto à topologia, em dispersos ou separados.

Escoamentos dispersos são caracterizados pela presença de uma fase distribuída em elementos finitos, como bolhas ou gotas, que se encontra dispersa em um volume conexo da fase contínua. Já os escoamentos separados seriam aqueles nos quais coexistem duas ou mais fases separadas por interfaces [32].

Os modelos de escoamento separado usualmente resolvem as equações de conservação para cada um dos fluidos, utilizando-se das condições na interface para acoplá-las [32]. Por sua vez, a modelagem dos escoamentos dispersos geralmente é feita por meio de uma das duas abordagens: Lagrangeana, ou de trajetória, e Euleriana, ou multi-fluido [32]. Na primeira delas, obtém-se o movimento da fase dispersa acompanhando todas as partículas ou um grupo representativo delas, o que pode ser bastante oneroso computacionalmente com o aumento do número de partículas [32]. Já nos modelos multi-fluido, a fase dispersa também é tratada como uma fase contínua, isto é, supõe-se que as duas fases coexistam em qualquer posição do domínio compondo um *continuum*. Para obter as equações de conservação de ambas as fases, são adotados procedimentos de promediação, que pode ser volumétrica, temporal ou amostral [33].

As equações de conservação dos modelos multifásicos, ou Eulerianos, de cada uma das fases são denominadas equações individuais de fase, de modo que podem existir, em cada uma delas, termos que contabilizem a interação entre essas fases [32]. Quando tais equações são somadas, formando as chamadas equações de fase combinada ou da mistura, os termos de interação se anulam [32].

A formulação de um problema multifásico requer, além da caracterização das

fases, informações a respeito da geometria, da natureza das forças atuantes e das posições e velocidades iniciais dos componentes [33]. Após a promediação, não se tem mais a descrição das partículas, o que significa que o modelo é incapaz de descrever o movimento individual de cada uma delas ou o escoamento por cada poro [33]. No caso da utilização de média volumétrica, o volume característico, no qual são calculadas as médias das propriedades, deve ser grande o suficiente para que tais propriedades médias variem continuamente, sem serem influenciadas pela fase na qual se encontra o centróide do volume ou pelo tamanho dele, e pequeno o suficiente para que essas propriedades não variem globalmente [18].

Neste estudo, foi adotada a abordagem Euleriana, que apresentou resultados satisfatórios, como visto no Capítulo 2, e será desenvolvida a partir deste ponto usando a média volumétrica.

Seja, então, $\psi_k(\mathbf{x}, t)$ a descrição espacial (Euleriana) de uma propriedade da fase k de um sistema em solidificação, em função da posição \mathbf{x} e do instante t , e $\Psi_k(\mathbf{X}_k, t)$ a sua descrição material (Lagrangeana), em função do ponto material \mathbf{X}_k e do instante t ; se \mathbf{u}_k é a velocidade dessa fase, a derivada material de ψ_k será [33]:

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt}\psi_k(\mathbf{x}, t) &= \frac{\partial}{\partial t}\Psi_k(\mathbf{X}_k, t) \\ &= \frac{\partial}{\partial t}\psi_k(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \cdot \nabla \psi_k(\mathbf{x}, t) \\ &= \frac{\partial}{\partial t}\psi_k(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}_k(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \psi_k(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (3.1)$$

Faz-se mister definir, também, a fração volumétrica média da fase k , que ocupa um volume V_k em um elemento de volume V [33]:

$$r_k = \lim_{V_k, V \rightarrow 0} \frac{V_k}{V} \quad (3.2)$$

Assim, se ρ_k é a massa específica de k e $\dot{\rho}_k$ a sua densidade mássica no elemento ($\dot{\rho}_k \doteq m_k/V$, sendo m_k a massa da fase k presente em V), de modo que

$$\dot{\rho}_k \doteq r_k \rho_k \quad (3.3)$$

a equação do balanço de massa da referida fase no elemento é [33]:

$$\frac{d}{dt} \int_V \dot{\rho}_k \, dv = \int \Gamma_k \, dv \quad (3.4)$$

na qual Γ_k é a taxa de produção de massa de k por unidade de volume devido à mudança de fase, com a aplicação do teorema do transporte de Reynolds e da

Equação 3.1, manipula-se a Equação 3.50 [33]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \dot{\rho}_k \, dv &= \int_V \left[\frac{D\dot{\rho}_k}{Dt} + \dot{\rho}_k (\nabla \cdot \mathbf{u}_k) \right] dv \\ &= \int_V \Gamma_k \, dv \end{aligned} \quad (3.5)$$

ou

$$\int_V \left[\frac{\partial \dot{\rho}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\dot{\rho}_k \mathbf{u}_k) - \Gamma_k \right] dv = 0 \quad (3.6)$$

Sendo V arbitrário [33]:

$$\frac{\partial \dot{\rho}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\dot{\rho}_k \mathbf{u}_k) - \Gamma_k = 0 \quad (3.7)$$

ou, então [33]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_k \rho_k) + \nabla \cdot (r_k \rho_k \mathbf{u}_k) = \Gamma_k \quad (3.8)$$

Em procedimento análogo ao do balanço de massa, tem-se que a quantidade de movimento linear de k no elemento é [33]:

$$\int_V \dot{\rho}_k \mathbf{u}_k \, dv \quad (3.9)$$

Define-se \mathcal{F}_k^b como a fonte de quantidade de movimento linear de campo [33]:

$$\mathcal{F}_k^b \doteq \int (\dot{\rho}_k \mathbf{b}_k + \mathbf{M}_k + \Gamma_k \mathbf{u}_{ki}) \, dv \quad (3.10)$$

na qual $\dot{\rho}_k \mathbf{b}_k$ é a resultante das forças de campo externas que atuam sobre k por unidade de massa, \mathbf{M}_k é a força sobre k devido à sua interação com as outras fases no elemento e $\Gamma_k \mathbf{u}_{ki}$ é a fonte de quantidade de movimento linear relativo ao transporte de massa entre as fases, sendo \mathbf{u}_{ki} a velocidade de k em relação à interface i .

Em seguida, estabelecendo \mathbf{t}_k como a tração por unidade de área da fase k , de forma que $\dot{\mathbf{t}}_k$:

$$\dot{\mathbf{t}}_k \doteq r_k \mathbf{t}_k \quad (3.11)$$

é a tração por unidade de área total sobre k , define-se \mathcal{F}_k^s como a fonte de quantidade de movimento linear superficial de k [33]:

$$\mathcal{F}_k^s \doteq \oint_{\partial V} \dot{\mathbf{t}}_k \, ds \quad (3.12)$$

em que ∂V representa o contorno total do volume de controle. Assim, tem-se a

equação do balanço da quantidade de movimento linear da referida fase [33]:

$$\frac{d}{dt} \int_V \dot{\rho}_k \mathbf{u}_k \, dv = \mathcal{F}_k^b + \mathcal{F}_k^s \quad (3.13)$$

Se o tensor tensão total que atua em k é

$$\mathbf{T}_k \doteq -p_k \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_k \quad (3.14)$$

em que p_k é a pressão na fase k , \mathbf{I} é o tensor identidade e $\boldsymbol{\tau}_k$ é tensão viscosa na fase k .

Com o auxílio do vetor unitário $\hat{\mathbf{n}}$ normal à superfície do elemento e que aponta para fora dele [33], é possível escrever a tração \mathbf{t}_k em função de \mathbf{T}_k :

$$r_k \mathbf{t}_k = r_k \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{T}_k \quad \text{ou} \quad \dot{\mathbf{t}}_k = \hat{\mathbf{n}} \cdot \dot{\mathbf{T}}_k \quad (3.15)$$

Ao substituir as Equações 3.10 e 3.12 na 3.13, a equação do balanço de quantidade de movimento linear torna-se [33]:

$$\frac{d}{dt} \int_V \dot{\rho}_k \mathbf{u}_k \, dv = \int_V (\dot{\rho}_k \mathbf{b}_k + \mathbf{M}_k + \Gamma_k \mathbf{u}_{ki}) \, dv + \oint_{\partial V} \dot{\mathbf{t}}_k \, da \quad (3.16)$$

que, com o auxílio das Equações 3.1, 3.3 e 3.15, com o uso do teorema da divergência e para V arbitrário, torna-se [33]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_k \rho_k \mathbf{u}_k) + \nabla \cdot (r_k \rho_k \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k) = r_k \rho_k \mathbf{b}_k + \mathbf{M}_k + \Gamma_k \mathbf{u}_{ki} + \nabla \cdot (r_k \mathbf{T}_k) \quad (3.17)$$

Para o balanço de energia, define-se ϵ_k como sendo a energia total de k por unidade de massa, isto é:

$$\epsilon_k \doteq U_k + K_k \quad (3.18)$$

em que U_k é sua energia interna total e K_k a cinética

$$K_k \doteq \frac{1}{2} |\mathbf{u}_k|^2 \quad (3.19)$$

(a energia potencial será contabilizada na taxa de energia transferida devido à atuação de forças volumétricas externas), ambas por unidade de massa. A energia total dessa fase em todo o elemento será:

$$\int_V \dot{\rho}_k \epsilon_k \, dv \quad (3.20)$$

Seja \mathcal{W}_k^b a fonte de energia de campo para a fase k :

$$\mathcal{W}_k^b \doteq \int_V [\dot{\rho}_k(R_k + \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{b}_k) + E_k + \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{M}_k + \Gamma_k U_{ki}] dv \quad (3.21)$$

em que R_k é atribuído a fontes de calor de campo externas por unidade de massa, E_k é a fonte de energia devido à interação da fase k com as outras presentes em um elemento, $\Gamma_k U_{ki}$ é a fonte de energia que provém da massa de k gerada e $\dot{\rho}_k \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{b}_k$ e $\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{M}_k$ constituem o trabalho das forças $\dot{\rho}_k \mathbf{b}_k$ e \mathbf{M}_k realizado sobre k .

Se \mathbf{q}_k é o fluxo de calor da fase k por unidade de área no contorno de V_k , $\dot{\mathbf{q}}_k$ o fluxo de calor de k por unidade de área total do contorno do elemento, \dot{Q}_k a taxa de calor trocado pela fase k por unidade de área do contorno de V_k e \dot{Q}_k a taxa de calor trocado pela fase k por unidade de área total do contorno do elemento, de modo que [33]:

$$\dot{Q}_k \doteq \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{q}_k \quad (3.22)$$

e

$$\dot{Q}_k \doteq \hat{\mathbf{n}} \cdot \dot{\mathbf{q}}_k = r_k \dot{Q}_k \quad (3.23)$$

então \mathcal{W}_k^s , fonte de energia superficial, será [33]:

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_k^s &\doteq \oint_{\partial V} (\mathbf{u}_k \cdot \dot{\mathbf{t}}_k - \dot{Q}_k) ds \\ &= \int_V \nabla \cdot (\mathbf{u}_k \cdot \dot{\mathbf{T}}_k - \dot{\mathbf{q}}_k) ds \end{aligned} \quad (3.24)$$

em que $\mathbf{u}_k \cdot \dot{\mathbf{t}}_k$ é o trabalho da força $\dot{\mathbf{t}}_k$.

Das Equações 3.20, 3.21 e 3.24, o balanço de energia total do componente k no volume será [33]:

$$\frac{d}{dt} \int_V \dot{\rho}_k \epsilon_k dv = \mathcal{W}_k^b + \mathcal{W}_k^s \quad (3.25)$$

ou

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (r_k \rho_k \epsilon_k) + \nabla \cdot (r_k \rho_k \epsilon_k \mathbf{u}_k) &= r_k \rho_k (R_k + \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{b}_k) + E_k + \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{M}_k + \Gamma_k U_{ki} + \\ &+ \nabla \cdot (r_k \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{T}_k) - \nabla \cdot (r_k \mathbf{q}_k) \end{aligned} \quad (3.26)$$

3.1.1 Abordagem de meio poroso: lei de Darcy

Com a finalidade de que as mesmas equações de balanço de massa, movimento e energia sejam empregadas em todo o domínio, isto é, tanto nas fases líquida e sólida quanto na interface que as separa, podem ser adotadas diferentes alternativas.

Destaca-se que, para tanto, erros numéricos podem decorrer das descontinuidades nas propriedades físico-químicas do fluido em transição de fase, de modo que, ao se empregar essas alternativas para o tratamento das equações de conservação, deve-se considerar estratégias para suavizar a transformação de fase.

Nesse sentido, uma estratégia é aplicar a lei de Darcy na equação do movimento, considerando todo o domínio como um meio poroso, em total concordância com a abordagem multifásica Euleriana descrita na Seção 3.1, que trata as fases como interpenetrantes. A porosidade η é a própria fração volumétrica média da fase líquida, r_l .

Henry Darcy realizou experimentos para obter a velocidade do escoamento da água através do subsolo da cidade de Dijon, na França, vindo a enunciar uma lei capaz de descrever esse comportamento (apud [34]):

$$\nabla \mathcal{P}_l = -\mu \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{u} \quad (3.27)$$

em que, sendo \mathbf{u}_l e p_l , respectivamente, a velocidade intersticial e a pressão da fase líquida,

$$\nabla \mathcal{P}_l \doteq \nabla p_l - \rho_l \mathbf{g} \quad (3.28)$$

onde \mathcal{P}_l é a pressão modificada,

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &\doteq \eta \mathbf{u}_l \\ &= r_l \mathbf{u}_l \end{aligned} \quad (3.29)$$

é a velocidade superficial do fluido, \mathbf{K} é o tensor permeabilidade do meio poroso e \mathbf{g} , conforme definido na Seção 3.1, é a aceleração da gravidade. Anos mais tarde, WHITAKER [35] obteve-a matematicamente por meio da promediação no volume das equações de balanço de massa e de movimento microscópicas para um fluido incompressível que atravessa um meio poroso em estado estacionário.

Devido à dificuldade em se obter experimentalmente o tensor permeabilidade \mathbf{K} , alguns modelos são empregados para substituí-lo. Para um meio poroso isotrópico, no qual $\mathbf{K}^{-1} = (1/\bar{K})\mathbf{I}$, no lugar de μ/\bar{K} , pode-se aplicar a equação de Carman-Kozeny [20]:

$$\begin{aligned} \nabla \mathcal{P}_l &= -C \frac{(1-\eta)^2}{\eta^3} (\mathbf{I} \cdot \mathbf{u}) \\ &= -C \frac{(1-r_l)^2}{r_l^3} \mathbf{u} \\ &= -C \frac{(1-r_l)^2}{r_l^2} \mathbf{u}_l \end{aligned} \quad (3.30)$$

em que C é uma constante do meio poroso, à qual foi atribuído o valor de $1,6 \times 10^3$

em VOLLER e PRAKASH [20] e de 10^8 em BOURDILLON *et al.* [26].

Assim, se, da Equação 3.17 obtém-se a equação de movimento da fase líquida:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho_l \mathbf{u}_l) + \nabla \cdot (r_l \rho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l) = r_l \rho_l \mathbf{b}_l + \mathbf{M}_l + \Gamma_l \mathbf{u}_{kl} + \nabla \cdot (r_l \mathbf{T}_l) \quad (3.31)$$

no intuito de inserir nela a ação de uma força que represente a resistência que essa fase enfrenta para se mover devido à presença da fase sólida, adiciona-se o chamado termo de Darcy por meio de \mathbf{M}_l :

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho_l \mathbf{u}_l) + \nabla \cdot (r_l \rho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l) = r_l \rho_l \mathbf{b}_l - C \frac{(1 - r_l)^2}{r_l^2} \mathbf{u}_l + \Gamma_l \mathbf{u}_{li} + \nabla \cdot (r_l \mathbf{T}_l) \quad (3.32)$$

Nota-se, na Equação 3.32, que, quando $r_l = 1$, ou seja, quando o conteúdo do elemento é completamente líquido, tal termo é zerado, não tendo qualquer efeito sobre a equação. Quando $r_l \rightarrow 0$, isto é, quando o conteúdo do elemento é quase todo sólido, a magnitude da fração $(1 - r_l)^2/r_l^2$ tende a infinito; daí a importância de um valor grande para a constante C , que torna o termo como um todo finito, de modo que, como todos os outros termos nos quais aparece a fração de fase líquida da equação são levados a zero, a velocidade tende a um valor finito.

É interessante observar que, para uma substância pura, a abordagem de meio poroso constitui apenas uma estratégia matemática e computacional, criando uma interface de espessura finita onde $0 < r_l < 1$. Entretanto, para materiais compostos de duas ou mais substâncias, há um sentido físico, como mostra a Figura 3.1. Neste caso, a interface entre as fases líquida e sólida é, de fato, uma região de espessura considerável onde as duas fases coexistem, denominada *mushy*, que ocorre por conta de a solidificação não se dar apenas em um ponto específico, mas em um intervalo de temperaturas, fazendo da imposição da modelagem porosa uma aproximação ainda mais conveniente. A Figura 3.2 traz diferentes formatos de interface, na qual a letra *a* representa o caso de um ponto de solidificação único e as letras *b*, *c* e *d*, aqueles nos quais a transição se dá em um intervalo de temperaturas.

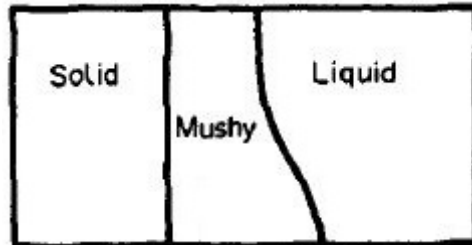


Figura 3.1: Representação genérica da zona *mushy* (adaptada de VOLLER *et al.* [4]).

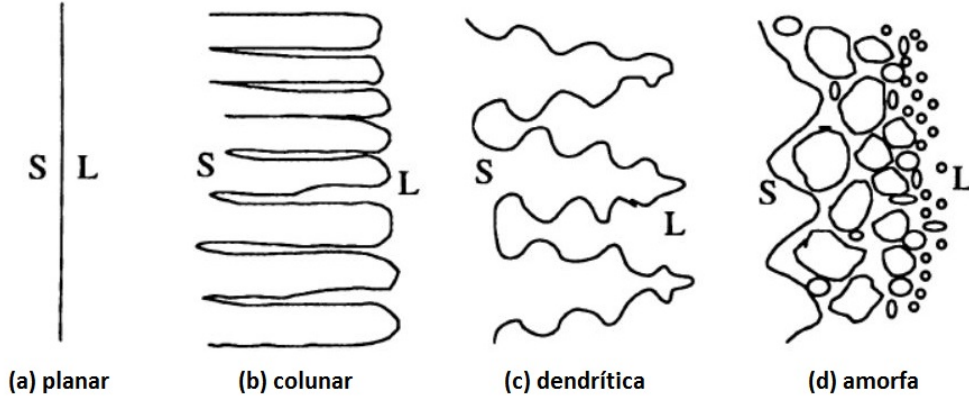


Figura 3.2: Representação de diferentes morfologias da zona *mushy* [5].

3.1.2 Aproximação de Boussinesq

A aproximação de Boussinesq para convecção natural consiste em assumir a massa específica do fluido constante em todos os termos da equação de conservação da quantidade de movimento, exceto para o termo de força de campo, no qual a mesma é aproximada pela série de Taylor [8].

Se a única força de campo a que está sujeito o sistema é a ação da gravidade, de forma que $\mathbf{b}_k = \mathbf{g}$, as forças de pressão e gravitacional, na equação de movimento 3.32 para a fase líquida, podem ser escritas separando-se as parcelas dinâmica e estática da pressão:

$$-\nabla(r_l p_l) + r_l \rho_l \mathbf{g} = -\nabla(r_l p_{ld}) - \nabla(r_l p_{le}) + r_l \rho_l \mathbf{g} \quad (3.33)$$

em que p_{le} e p_{ld} são, respectivamente, as pressões estática e dinâmica no fluido.

Sendo $r_l \nabla p_{le} = r_l \bar{\rho}_l \mathbf{g}$, em que $\bar{\rho}_l$ é a massa específica em uma condição de referência, tem-se que:

$$-\nabla(r_l p_l) + r_l \rho_l \mathbf{g} = -\nabla(r_l p_{ld}) - p_{le} \nabla r_l - r_l \bar{\rho}_l \mathbf{g} + r_l \rho_l \mathbf{g} \quad (3.34)$$

Se $\bar{\beta}$ é o fator de compressibilidade térmica, a aproximação origina-se no truncamento da expansão em série de Taylor de $\partial \rho_l(T)$ até o termo de primeira ordem:

$$\begin{aligned} \bar{\beta} &= -\frac{1}{\bar{\rho}_l} \left(\frac{\partial \rho_l}{\partial T} \right)_p \\ &\approx -\frac{1}{\bar{\rho}_l} \frac{\Delta \rho_l}{\Delta T} \\ &= -\frac{1}{\bar{\rho}_l} \frac{\rho_l - \bar{\rho}_l}{T - \bar{T}} \end{aligned} \quad (3.35)$$

na qual \bar{T} é a temperatura na condição de referência.

Aplicando a Equação 3.35 na Equação 3.33, obtém-se a aproximação de Boussi-

nesq:

$$-\nabla(r_l p_l) + r_l \rho_l \mathbf{g} = -\nabla(r_l p_{ld}) - p_{le} \nabla r_l - r_l \bar{\rho}_l \bar{\beta} \mathbf{g} (T - \bar{T}) \quad (3.36)$$

A importância de tal aproximação reside em tornar possível considerar a massa específica constante em todos os termos e contabilizar a variação dessa grandeza apenas no termo correspondente à aproximação na equação do movimento, viabilizando, inclusive, fazer a mesma consideração nas equações de balanço de massa e de energia.

3.1.3 Método da entalpia

Existem diferentes propostas de tratamento para problemas com contornos móveis, que podem incluir o emprego de malhas móveis, recalculadas a cada passo de tempo para a aplicação das condições de contorno, ou a utilização de malhas fixas, nas quais a frente móvel faz parte da solução [36]. Dentre as maiores vantagens do segundo grupo estão os fatos de não ser necessário satisfazer a condições especiais da interface de mudança de fase e do custo computacional ser bem menos oneroso, por conta de a malha não ser recalculada a cada passo de tempo [36].

Em contrapartida, uma de suas restrições é que a fase sólida deve ser necessariamente imóvel e, para tanto, são sugeridos alguns procedimentos matemáticos que forcem a anulação paulatina da velocidade do sólido [36]. Um desses métodos seria a variação da viscosidade em função da temperatura, de modo a tornar o sólido tão viscoso que permaneça imóvel; outro, o chamado método da entalpia, concebe a frente de solidificação, onde $0 < r_l < 1$, como uma região de espessura finita, porém fina, eliminando descontinuidades nas propriedades do material. É interessante notar que tal método alia-se ao conceito de zona *mushy*, explicado na Subseção 3.1.1, compondo o denominado “Método Entalpia-Porosidade”, tradução livre do termo em inglês *Enthalpy-Porosity Method*, tendo sido esta a estratégia adotada neste trabalho.

O método da entalpia recebe tal denominação por conta de a equação da energia ser escrita, a princípio, em termos dessa variável. O ponto chave disso é que a entalpia pode ser separada em duas parcelas, uma delas correspondendo ao calor sensível, que apresenta um comportamento contínuo na mudança de fase e, a outra, ao calor latente, que constitui a energia transferida na mudança de fase. Esta última parcela pode ser inserida como um termo-fonte na equação da energia.

Assim sendo, a entalpia total da fase k por unidade de massa, H_k , é definida conforme abaixo:

$$\begin{aligned} H_k &\doteq U_k + p_k V_k \\ &= U_k + \frac{p_k}{\rho_k} \end{aligned} \quad (3.37)$$

em que U_k é a energia interna total da fase k , p_k é a pressão na fase e V_k é o volume ocupado pela fase.

Empregando o resultado da Equação 3.37 na Equação 3.18, expressa-se a energia total em termos da entalpia:

$$\epsilon_k = H_k - \frac{p_k}{\rho_k} + K_k \quad (3.38)$$

Se h_k é a entalpia sensível da fase k :

$$h_k(T) \doteq \int_{\bar{T}}^T c_k dT \quad (3.39)$$

em que c_k é o calor específico da fase k a pressão constante, e ΔH_k é a parcela de calor latente da fase:

$$\Delta H_k(T) \doteq \begin{cases} L, & T > T_m \\ 0, & T < T_m \end{cases} \quad (3.40)$$

sendo L o calor latente por unidade de massa e T_m o ponto de solidificação, então a entalpia total de cada fase é

$$H_l = h_l + \Delta H_l = h_l + L \quad \text{e} \quad H_s = h_s + \Delta H_s = h_s \quad (3.41)$$

Das Equações 3.26 e 3.41, obtém-se a equação de balanço de energia para as fases líquida e sólida:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[r_l \rho_l \left(H_l - \frac{p_l}{\rho_l} + K_l \right) \right] + \nabla \cdot \left[r_l \rho_l \left(H_l - \frac{p_l}{\rho_l} + K_l \right) \mathbf{u}_l \right] = \\ = r_l \rho_l (R_l + \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{b}_l) + E_l + \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{M}_l + \Gamma_l U_{li} + \nabla \cdot (r_l \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{T}_l) - \nabla \cdot (r_l \mathbf{q}_l) \end{aligned} \quad (3.42)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[r_s \rho_s \left(H_s - \frac{p_s}{\rho_s} + K_s \right) \right] + \nabla \cdot \left[r_s \rho_s \left(H_s - \frac{p_s}{\rho_s} + K_s \right) \mathbf{u}_s \right] = \\ = r_s \rho_s (R_s + \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{b}_s) + E_s + \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{M}_s + \Gamma_s U_{si} + \nabla \cdot (r_s \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{T}_s) - \nabla \cdot (r_s \mathbf{q}_s) \end{aligned} \quad (3.43)$$

Uma das prerrogativas do método da entalpia constitui em a fase sólida manter-se em repouso, ou seja, $\mathbf{u}_s = \mathbf{0}$. A Equação 3.44 torna-se, então:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[r_s \rho_s \left(H_s - \frac{p_s}{\rho_s} + K_s \right) \right] = r_s \rho_s R_s + E_s + \Gamma_s U_{si} - \nabla \cdot (r_s \mathbf{q}_s) \quad (3.44)$$

Somando as Equações 3.42 e 3.44 chega-se à equação do balanço de energia da

mistura:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[r_l \rho_l \left(H_l - \frac{p_l}{\rho_l} + K_l \right) \right] + \nabla \cdot \left[r_l \rho_l \left(H_l - \frac{p_l}{\rho_l} + K_l \right) \mathbf{u}_l \right] + \frac{\partial}{\partial t} \left[r_s \rho_s \left(H_s - \frac{p_s}{\rho_s} \right) \right] = \\ & = r_l \rho_l (R_l + \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{b}_l) + E_l + \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{M}_l + \Gamma_l U_{li} + \nabla \cdot (r_l \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{T}_l) - \nabla \cdot (r_l \mathbf{q}_l) + \\ & \quad + r_s \rho_s R_s + E_s + \Gamma_s U_{si} - \nabla \cdot (r_s \mathbf{q}_s) \quad (3.45) \end{aligned}$$

ou, rearranjando os termos,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (r_l \rho_l H_l + r_s \rho_s H_s) + \nabla \cdot (r_l \rho_l H_l \mathbf{u}_l) + \frac{\partial}{\partial t} (r_l \rho_l K_l) + \nabla \cdot (r_l \rho_l K_l \mathbf{u}_l) = \\ & = \frac{\partial}{\partial t} (r_l p_l + r_s p_s) + \nabla \cdot (r_l p_l \mathbf{u}_l) + r_l \rho_l (R_l + \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{b}_l) + E_l + \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{M}_l + \Gamma_l U_{li} + \\ & \quad + \nabla \cdot (r_l \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{T}_l) - \nabla \cdot (r_l \mathbf{q}_l) + r_s \rho_s R_s + E_s + \Gamma_s U_{si} - \nabla \cdot (r_s \mathbf{q}_s) \quad (3.46) \end{aligned}$$

Por fim, substituindo a Equação 3.41 na Equação 3.46:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (r_l \rho_l h_l + r_s \rho_s h_s) + \nabla \cdot (r_l \rho_l h_l \mathbf{u}_l) + \frac{\partial}{\partial t} (r_l \rho_l K_l) + \nabla \cdot (r_l \rho_l K_l \mathbf{u}_l) = \\ & = \frac{\partial}{\partial t} (r_l p_l + r_s p_s) + \nabla \cdot (r_l p_l \mathbf{u}_l) + r_l \rho_l (R_l + \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{b}_l) + E_l + \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{M}_l + \Gamma_l U_{li} + \\ & \quad + \nabla \cdot (r_l \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{T}_l) - \nabla \cdot (r_l \mathbf{q}_l) + r_s \rho_s R_s + E_s + \Gamma_s U_{si} - \nabla \cdot (r_s \mathbf{q}_s) - \\ & \quad - \left[\frac{\partial}{\partial t} (r_l \rho_l L) + \nabla \cdot (r_l \rho_l L \mathbf{u}_l) \right] \quad (3.47) \end{aligned}$$

na qual, conforme mencionado anteriormente, a parcela relativa ao calor latente aparece como um termo-fonte.

3.1.4 Modelo multifásico aplicado ao problema de solidificação

Procedendo de maneira análoga à da Subseção 3.1.3, é possível obter as equações de continuidade e movimento da mistura partindo-se das equações de cada fase. Assim, da Equação 3.8, as equações de balanço de massa para as fases líquida e sólida serão:

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_l \rho_l) + \nabla \cdot (r_l \rho_l \mathbf{u}_l) = \Gamma_l \quad (3.48)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_s \rho_s) + \nabla \cdot (r_s \rho_s \mathbf{u}_s) = \Gamma_s \quad (3.49)$$

que, somadas, gerarão a equação de continuidade da mistura:

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_l \rho_l + r_s \rho_s) + \nabla \cdot (r_l \rho_l \mathbf{u}_l + r_s \rho_s \mathbf{u}_s) = \Gamma_l + \Gamma_s \quad (3.50)$$

Da mesma forma, da Equação 3.17 obtém-se a equação de balanço da quantidade de movimento para a fase sólida:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_s \rho_s \mathbf{u}_s) + \nabla \cdot (r_s \rho_s \mathbf{u}_s \mathbf{u}_s) = r_s \rho_s \mathbf{b}_s + \mathbf{M}_s + \Gamma_s \mathbf{u}_{si} + \nabla \cdot (r_s \mathbf{T}_s) \quad (3.51)$$

que, somada à Equação 3.32, na qual se considera a abordagem de meio poroso de Darcy, conduz à equação de movimento para a mistura:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho_l \mathbf{u}_l + r_s \rho_s \mathbf{u}_s) + \nabla \cdot (r_l \rho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l + r_s \rho_s \mathbf{u}_s \mathbf{u}_s) = \\ & = r_l \rho_l \mathbf{b}_l - C \frac{(1 - r_l)^2}{r_l^2} \mathbf{u}_l + \Gamma_l \mathbf{u}_{kl} + \nabla \cdot (r_l \mathbf{T}_l) + r_s \rho_s \mathbf{b}_s + \mathbf{M}_s + \Gamma_s \mathbf{u}_{si} + \nabla \cdot (r_s \mathbf{T}_s) = \\ & = r_l \rho_l \mathbf{b}_l + r_s \rho_s \mathbf{b}_s - C \frac{(1 - r_l)^2}{r_l^2} \mathbf{u}_l + \mathbf{M}_s + \Gamma_l \mathbf{u}_{li} + \Gamma_s \mathbf{u}_{si} + \nabla \cdot (r_l \mathbf{T}_l + r_s \mathbf{T}_s) \end{aligned} \quad (3.52)$$

Assume-se as hipóteses abaixo:

1. os únicos constituintes do sistema de solidificação são as fases líquida e sólida, o que significa que o material é livre de impurezas e de ar e que $r_l + r_s = 1$
2. a fase sólida permanece imóvel, ou $\mathbf{u}_s = \mathbf{0}$ e, conseqüentemente, $\mathbf{T}_s = -p_s \mathbf{I}$ e $K_s = 0$;
3. a única força externa de campo que atua sobre ambas as fases é a da gravidade, ou $\mathbf{b}_l = \mathbf{b}_s = \mathbf{g}$;
4. as fases encontram-se em equilíbrio local [37], ou seja, localmente, a pressão no líquido é igual à do sólido, ou $p_l = p_s$;
5. a soma dos termos de interação entre as fases é zero [33], isto é:

$$\sum_k (E_k + u_k \cdot M_k + \Gamma_k U_{ki}) = 0$$

6. não há calor transmitido por radiação, ou $R_l = R_s = 0$.
7. a velocidade da fase líquida na zona *mushy* é bem pequena, devido à proximidade com a fase sólida

Da Hipótese 1, que se traduz principalmente na ausência de ar no sistema, seja no contato com a atmosfera ou na forma de bolhas que poderiam estar aprisionadas nas demais fases, decorre que o volume que deixa de ser ocupado pela massa inicial presente no domínio, por conta da variação da massa específica da fase líquida para a sólida, é preenchido continuamente por líquido, até que o molde se encontre pleno de material sólido. Esta consideração reflete a situação desejada no processo real, no

qual um funil ou aumentador é mantido sobre o molde, contendo material fundido por grande parte da duração do resfriamento no intuito de recompletar o molde e de nele se concentrarem os efeitos da contração, conforme mostrado na Figura 3.3 [6][7].

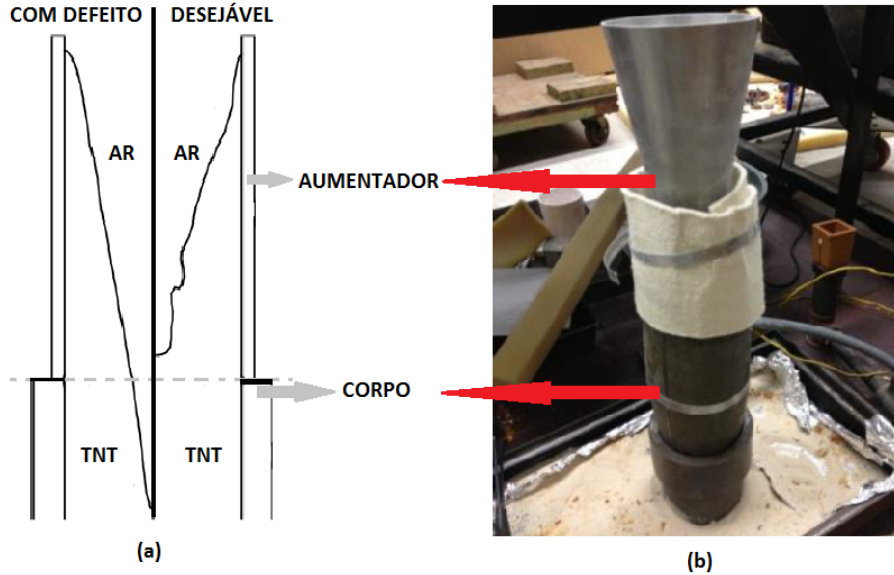


Figura 3.3: Conjunto corpo da granada e aumentador: (a) modificada de SUN e GARIMELLA [6], esquema que mostra a localização aproximada do defeito de contração; (b) foto de MUDRYY *et al.* [7].

Ressalta-se que decorre da hipótese 2 que, no modelo aqui derivado, não são consideradas partículas sólidas dispersas no fluido, em oposição ao que muitas vezes se faz nos processos industriais de solidificação para induzir o fenômeno por nucleação. Em decorrência do acima exposto, faz-se necessária uma segunda simplificação: a massa específica da fase sólida (ρ_s), no intervalo de temperaturas considerado, é constante e uniforme, o que significa que a fase é incompressível.

Além disso, da conservação de massa, a taxa de surgimento de sólido tem a mesma magnitude da taxa de desaparecimento de líquido, ou $\Gamma_l = -\Gamma_s$. Com isso, a equação da continuidade da mistura pode ser reescrita:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho_l + r_s \rho_s) + \nabla \cdot (r_l \rho_l \mathbf{u}_l) = 0 \quad (3.53)$$

Decorre ainda da Hipótese 2 que as velocidades próximas à interface, \mathbf{u}_{li} e \mathbf{u}_{si} são nulas e que a força $\mathbf{M}_s = \mathbf{0}$, pois a fase sólida não sofre qualquer resistência. Aplicando também as Hipóteses 3 e 4 na equação de balanço da quantidade de movimento da fase sólida, Equação 3.51:

$$\nabla(r_s p_s) = r_s \rho_s \mathbf{g} \quad (3.54)$$

e na equação de movimento da mistura, Equação 3.52:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho_l \mathbf{u}_l) + \nabla \cdot (r_l \rho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l) = r_l \rho_l \mathbf{g} - C \frac{(1 - r_l)^2}{r_l^2} \mathbf{u}_l - \nabla(r_l p_l) + \nabla \cdot (r_l \boldsymbol{\tau}_l) \quad (3.55)$$

Utilizando a aproximação de Boussinesq, Equação 3.36, na Equação 3.55, leva-se a equação de movimento da mistura a:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho_l \mathbf{u}_l) + \nabla \cdot (r_l \rho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l) = -\nabla(r_l p_{ld}) - r_l \bar{\rho}_l \bar{\beta} \mathbf{g}(T - \bar{T}) - C \frac{(1 - r_l)^2}{r_l^2} \mathbf{u}_l + \nabla \cdot (r_l \boldsymbol{\tau}_l) \quad (3.56)$$

na observância de que $\nabla r_l = \mathbf{0}$ fora da interface líquido-sólido, afetando apenas a região *mushy*, que é de difícil modelagem, desprezando-se então o termo $-p_{le} \nabla r_l$.

Ademais, se, da lei de Fourier:

$$\mathbf{q}_k = -k_k \nabla T \quad (3.57)$$

empregando o método da entalpia com as Hipóteses 3, 4, 5 e 6, o balanço de energia da mistura fica:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho_l h_l + r_s \rho_s h_s) + \nabla \cdot (r_l \rho_l h_l \mathbf{u}_l) + \frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho_l K_l) + \nabla \cdot (r_l \rho_l K_l \mathbf{u}_l) = \\ & = \frac{\partial p_l}{\partial t} + r_l \rho_l \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{g} + \mathbf{u}_l \cdot \mathbf{M}_l + \nabla \cdot (r_l \mathbf{u}_l \cdot \boldsymbol{\tau}_l) + \nabla \cdot [(r_l k_l + r_s k_s) \nabla T] - \left[\frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho_l L) + \nabla \cdot (r_l \rho_l L \mathbf{u}_l) \right] \end{aligned} \quad (3.58)$$

Definindo-se as seguintes propriedades da mistura:

- massa específica

$$\rho \doteq r_l \rho_l + r_s \rho_s \quad (3.59)$$

- entalpia sensível

$$h \doteq \frac{r_l \rho_l h_l + r_s \rho_s h_s}{\rho} \quad (3.60)$$

- condutividade térmica

$$k \doteq r_l k_l + r_s k_s \quad (3.61)$$

e empregando a Equação 3.29, escreve-se as equações da continuidade, do movimento e da energia da mistura em sua forma final para o modelo derivado neste trabalho:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.62)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_l \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla(r_l p_{ld}) - r_l \bar{\rho}_l \bar{\beta} \mathbf{g}(T - \bar{T}) - C \frac{(1 - r_l)^2}{r_l^3} \mathbf{u} + \nabla \cdot (r_l \boldsymbol{\tau}_l) \quad (3.63)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho_l h_l \mathbf{u}) + \frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho_l K_l) + \nabla \cdot (\rho_l K_l \mathbf{u}) = \\ & = \frac{\partial p_l}{\partial t} + \rho_l \mathbf{u} \cdot \mathbf{g} - \mathbf{u}_l \cdot C \frac{(1 - r_l)^2}{r_l^3} \mathbf{u} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau}_l) + \nabla \cdot (k \nabla T) - \left[\frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho_l L) + \nabla \cdot (\rho_l L \mathbf{u}) \right] \end{aligned} \quad (3.64)$$

A fração volumétrica da fase líquida é obtida a partir de uma operação algébrica baseada na discretização da equação da energia fazendo $\bar{T} = T_m$ [1]:

$$[\Delta H_p]^{n+1} = [\Delta H]^n + \sigma c \{ [T_p]^n - T_m \} \quad (3.65)$$

ou

$$[r_{lp}]^{n+1} = [r_l]^n + \sigma \frac{c}{L} \{ [T_p]^n - T_m \} \quad (3.66)$$

em que σ é um fator de relaxação para o cálculo de r_l . A Equação 3.65 mostra que o excesso de entalpia em relação à entalpia da fase sólida da iteração atual constituir-se-á da soma do excesso correspondente da iteração anterior com uma fração da diferença entre o calor sensível do instante anterior e aquele do material em mudança de fase, ou seja, em $T = T_m$. O segundo termo do lado direito apresenta um fator de relaxação σ que representa a fração da variação de energia que será destinada à mudança de fase, restando a fração $1 - \sigma$ à variação de calor sensível. Assim sendo, é possível encontrar volumes com material sólido ($r_l < 1$) e $T > T_m$ ou volumes com material líquido ($r_l > 0$) e $T < T_m$.

Para que não haja volumes com $\Delta H < 0$ ou $\Delta H > L$, isto é, $r_l < 0$ ou $r_l > 1$, realiza-se uma operação de correção no valor da fração de fase, que será o valor máximo entre 0 e o valor mínimo entre a fração calculada e 1 (linha 173) [1]:

$$[r_{lp}]^{n+1*} = \max(0, \min([r_{lp}]^{n+1}, 1)) \quad (3.67)$$

3.2 Aspectos da implementação do modelo

Para realizar as simulações relatadas nesta dissertação, empregou-se a combinação de duas rotinas nativas do *OpenFOAM* [16]: o *buoyantPimpleFoam* e o *solidificati-*

onMeltingSource.

O *buoyantPimpleFoam* é um aplicativo utilizado para simulações de sistemas nos quais ocorrem efeitos do empuxo, como a convecção natural. A metodologia de solução das equações de conservação baseia-se no acoplamento pressão-velocidade *PIMPLE*, que é uma composição dos algoritmos *PISO* e *SIMPLE* [16]. Mais detalhes desse *solver* encontram-se no Apêndice A.

Por sua vez, o *solidificationMeltingSource* é uma rotina que pode complementar alguns *solvers* do *OpenFOAM*, por meio da inserção de termos-fonte em equações específicas do programa principal. Sua finalidade é incluir o tratamento da mudança de fase entre os estados sólido e líquido de uma substância pura. Tal rotina apresenta como referências, em seus comentários iniciais, os artigos de VOLLER e PRAKASH [20] e SWAMINATHAN e VOLLER [38]. Pormenores desse código encontram-se também no Apêndice A.

Em notação matemática, o uso combinado do *buoyantPimpleFoam* e do *solidificationMeltingSource* resolve o conjunto de equações abaixo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.68)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = -\nabla p_{ld} + (\mathbf{g} \cdot \mathbf{z}) \nabla \rho - C \frac{(1 - r_l)^2}{r_l^3 + \varsigma} \mathbf{u} - \bar{\rho} \bar{\beta} \mathbf{g} (T - \bar{T}) \quad (3.69)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho h \mathbf{u}) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \nabla \cdot (\rho K \mathbf{u}) = \frac{\partial p_l}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \mathbf{g}) + \nabla \cdot \left(\frac{k}{c} \nabla h \right) - \frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho L) \quad (3.70)$$

no qual a primeira é a equação de balanço de massa, a segunda é a de balanço da quantidade de movimento e a terceira a de balanço de energia, sendo \mathbf{z} a altura do centro do volume em relação à base da geometria. Nota-se que há diferenças entre elas e as equações derivadas na Subseção 3.1.4 com o uso de equações para sistemas multifásicos.

No confronto entre as equações da continuidade, Equação 3.62, do modelo da Subseção 3.1.4, e Equação 3.68, implementada no *OpenFOAM*, há discrepância no termo convectivo. Na primeira delas, o termo é $\nabla \cdot (\rho_l \mathbf{u})$, enquanto, na segunda, é $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u})$.

Da aplicação da definição da massa específica da mistura, Equação 3.59, obtém-se:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= \nabla \cdot [(r_l \rho_l + r_s \rho_s) \mathbf{u}] \\ &= \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{u}) + \nabla \cdot [r_s (\rho_s - \rho_l) \mathbf{u}] \end{aligned} \quad (3.71)$$

Na fase líquida, $r_s = 0$, de forma que as duas equações tornam-se iguais. Na fase sólida, $\mathbf{u} = \mathbf{0}$, o que anula o termo discutido, levando as equações também à igualdade. Desmembrando o termo discrepante:

$$\nabla \cdot [r_s(\rho_s - \rho_l)\mathbf{u}] = (\rho_s - \rho_l)\nabla r_s \cdot \mathbf{u} + r_s\nabla(\rho_s - \rho_l) \cdot \mathbf{u} + r_s(\rho_s - \rho_l)\nabla \cdot \mathbf{u} \quad (3.72)$$

tem-se que o produto $\nabla r_s \cdot \mathbf{u}$ será pequeno na zona *mushy* e, portanto, será desprezado, anulando a primeira parcela do lado direito da Equação 3.72. Para a segunda parcela, se da Hipótese 2 já decorre que ρ_s é constante e uniforme, pode-se considerar que ρ_l também o é, de modo a se verificar a variação da massa específica apenas no processo de mudança de fase, que é a variação mais expressiva [19]. Assim, $\nabla(\rho_s - \rho_l) = \mathbf{0}$ e esta parcela é anulada. Na última parcela do lado direito da Equação 3.72, embasando-se na Hipótese 7, que enuncia que as velocidades na zona *mushy* são bem pequenas, termos que contabilizem a variação dessas velocidades, como $\nabla \cdot \mathbf{u}$, serão muito pequenos, podendo-se negligenciar também esta parcela [39].

Assim, para o processo de solidificação, as Equações 3.62 e 3.68 serão equivalentes.

Para o balanço da quantidade de movimento, a análise das Equações 3.63, deduzida neste trabalho, e 3.69, implementada no *OpenFOAM*, conduz à observância de algumas diferenças. Primeiramente, na Equação 3.69, destaca-se a presença de uma parcela ζ no denominador do termo de Darcy, que constitui uma constante pequena para evitar divisão por zero.

Assim, quando $r_l = 1$, $\nabla\rho = 0$ e as Equações 3.63 e 3.69 são iguais. Quando $r_l = 0$, $\nabla\rho = 0$ e, na Equação 3.69 resta apenas o equilíbrio de forças no sólido, que se mantém em repouso, não havendo variação na quantidade de movimento, enquanto todos os termos da Equação 3.63 são levados a zero. Na região *mushy*, procedeu-se a análise termo a termo.

Na primeira equação, o termo da derivada temporal é $\partial(\rho_l\mathbf{u})/\partial t$, enquanto na segunda é:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{u}) = \frac{\partial}{\partial t}(\rho_l\mathbf{u}) + (\rho_s - \rho_l)\mathbf{u}\frac{\partial r_s}{\partial t} + r_s\mathbf{u}\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s - \rho_l) + r_s(\rho_s - \rho_l)\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} \quad (3.73)$$

O termo $(\rho_s - \rho_l)\mathbf{u}(\partial r_s/\partial t)$ será tão mais importante quanto maior for a taxa de solidificação. Para ρ_s e ρ_l constantes, $\partial(\rho_s - \rho_l)/\partial t = 0$, anulando o penúltimo termo. Sob a Hipótese 7, $\partial\mathbf{u}/\partial t$ é bem pequeno, levando-se a negligenciar o último termo.

Na parcela convectiva da Equação 3.69:

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}\mathbf{u}) &= \nabla \cdot (r_l \rho \mathbf{u}_l \mathbf{u}) \\
&= \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}_l \mathbf{u}) - (1 - r_l) \nabla \cdot (r_l \rho \mathbf{u}_l \mathbf{u}) + \rho \mathbf{u}_l \mathbf{u} \cdot \nabla r_l \\
&= \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}_l \mathbf{u}) - r_s \nabla \cdot (r_l \rho \mathbf{u}_l \mathbf{u}) + \rho \mathbf{u}_l \mathbf{u} \cdot \nabla r_l
\end{aligned} \tag{3.74}$$

A presença dos termos $-r_s \nabla \cdot (r_l \rho \mathbf{u}_l \mathbf{u}) + \rho \mathbf{u}_l \mathbf{u} \cdot \nabla r_l$ não é significativa, posto que os termos quadráticos na velocidade serão muito pequenos, dada a Hipótese 7 [39].

Na parcela de transporte molecular da Equação 3.69, em se tratando de fluido Newtoniano, que é a única reologia empregada neste trabalho, uma vez mais, sob a Hipótese 7, $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$ será desprezível na zona *mushy*, assim como o termo correspondente da Equação 3.63, $\nabla \cdot r_l \boldsymbol{\tau}_l$ [39].

Para a parcela

$$\begin{aligned}
(\mathbf{g} \cdot \mathbf{z}) \nabla \rho &= (\mathbf{g} \cdot \mathbf{z}) [\nabla (r_l \rho_l) + \nabla (r_s \rho_s)] \\
&= (\mathbf{g} \cdot \mathbf{z}) (\rho_l \nabla r_l + \rho_s \nabla r_s)
\end{aligned} \tag{3.75}$$

considerando-se ρ_l e ρ_s uniformes. Conforme explicado anteriormente, a difícil modelagem de ∇r_l e ∇r_s tornará esses termos desprezíveis e, portanto, toda a parcela também o será.

Comparando os termos restantes, dado que $\bar{\rho}_l = \bar{\rho}_s$:

$$\begin{aligned}
-\nabla p_{ld} - \bar{\rho} \bar{\beta} \mathbf{g} (T - \bar{T}) &= -\nabla (r_l p_{ld}) - r_l \bar{\rho}_l \bar{\beta} \mathbf{g} (T - \bar{T}) - \nabla (r_s p_{ld}) - r_s \bar{\rho}_s \bar{\beta} \mathbf{g} (T - \bar{T}) \\
&= -\nabla (r_l p_{ld}) - r_l \bar{\rho}_l \bar{\beta} \mathbf{g} (T - \bar{T}) - \nabla (r_s p_{ld}) - r_s \bar{\rho}_l \bar{\beta} \mathbf{g} (T - \bar{T}) \\
&= -\nabla (r_l p_{ld}) - r_l \bar{\rho}_l \bar{\beta} \mathbf{g} (T - \bar{T}) - p_{ld} \nabla r_s - r_s \nabla p_{ld} - \\
&\quad - r_s \bar{\rho}_l \bar{\beta} \mathbf{g} (T - \bar{T})
\end{aligned} \tag{3.76}$$

Sendo ∇r_s negligenciável e $T = \bar{T} = T_m$ na zona *mushy*, sobra apenas o termo $-r_s \nabla p_{ld}$, que será negligenciável para pequenos gradientes de pressão.

No que se refere às equações de balanço de energia, Equações 3.64 e 3.70, quando $r_l = 0$, as parcelas de variação do calor latente serão nulas e as equações serão equivalentes. Quando $r_l = 1$, considerando o termo de dissipação viscosa pequeno [39] e as parcelas de variação do calor latente também nulas, as equações também serão equivalentes.

No exame na zona *mushy*, as parcelas relativas à energia cinética, o termo de dissipação viscosa e os termos quadráticos na velocidade são desprezíveis [39]. Sendo a velocidade do líquido nula na interface, o termo convectivo da variação de calor latente também será nulo. Assim, a diferença reside nas parcelas $\nabla \cdot (\rho h \mathbf{u})$ e $\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{g}$.

Na primeira delas:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\rho h \mathbf{u}) &= \nabla \cdot [(r_l \rho_l h_l + r_s \rho_s h_s) \mathbf{u}] \\ &= \nabla \cdot (\rho_l h_l \mathbf{u}) + \nabla \cdot [r_s (\rho_s h_s - \rho_l h_l) \mathbf{u}]\end{aligned}\tag{3.77}$$

Se $c_s = c_l$, $\nabla \cdot [r_s (\rho_s h_s - \rho_l h_l) \mathbf{u}] = \nabla \cdot [r_s c_s (\rho_s T_s - \rho_l T_l) \mathbf{u}]$. Considerando $\rho_s = \rho_l$ para o tratamento deste termo, $T_s = T_l$ na zona *mushy* e o termo é anulado. Da mesma forma, se $\rho_s = \rho_l$ para o tratamento do termo

$$\begin{aligned}\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{g} &= (r_l \rho_l + r_s \rho_s) \mathbf{u} \cdot \mathbf{g} \\ &= \rho_l \mathbf{u} \cdot \mathbf{g} + r_s (\rho_s - \rho_l) \mathbf{u} \cdot \mathbf{g}\end{aligned}\tag{3.78}$$

a última parcela é anulada e as equações de balanço de energia 3.64 e 3.70, então, se equivalem.

O cálculo da fração de fase líquida no *solidificationMeltingSource* é o mesmo adotado na Subseção 3.1.4.

Conclui-se nesta seção que o modelo implementado no *OpenFOAM* atende ao tratamento dos problemas de solidificação.

3.3 Estudo de casos

Na presente seção, estão caracterizados os experimentos numéricos realizados para este trabalho, dentre verificações e as simulações que constituem o objetivo principal.

3.3.1 Verificação com a solução de Neumann

Nesta primeira etapa prática, uma vez que o problema de mudança de fase entre os estados líquido e sólido (problema de Stefan) apresenta solução analítica para alguns casos, conforme já apresentado na Subseção 2.1.1, realizou-se a verificação do conjunto *buoyantPimpleFoam* e *solidificationMeltingSource* para um caso unidimensional.

Dessa forma, implementou-se a solução analítica no próprio *OpenFOAM*, em uma rotina que foi batizada de *StefanNeumannFoam.C*, exposta no Apêndice C.

Desta feita, o problema foi posto da seguinte forma: um material qualquer que será submetido ao processo de solidificação, denominado *PCM*, do termo em inglês *phase change material*, em um meio unidimensional com 0,005 m de comprimento. O domínio foi dividido 200 elementos e na Figura 3.4 constam os nomes atribuídos aos contornos, em que *leftWall* representa uma parede à esquerda e *patch* é um contorno genérico, que aqui será visto como um corte em um tubo. As propriedades termo-físicas do PCM encontram-se na Tabela 3.1 e as condições iniciais e de contorno



Figura 3.4: Domínio do problema unidimensional e suas condições de contorno.

Tabela 3.1: Propriedades termo-físicas do *phase change material*.

ρ (kg/m ³)	10	$\bar{\rho}$ (kg/m ³)	10	β (1/K)	0
\bar{T} (K)	350	T_m (K)	350	k (W/m K)	100
c (J/kg K)	1000	L (J/kg)	1000	MM (kg)	0, 1
μ (kg/m s)	1×10^{-3}	Pr	1×10^{-2}	-	-

utilizadas para os campos de temperatura (T), velocidade superficial (\mathbf{u}) e pressão modificada (\mathcal{P}) constam na Tabela 3.2. As constantes C e ζ assumiram os valores de $1,6 \times 10^6$ e 1×10^{-3} respectivamente, que são os mesmos valores utilizados por BRENT *et al.* [1], e, com base nos valores da Tabela 3.1 e na equação transcendental 2.13, calculou-se $\lambda = 0,9728$ com o auxílio da função `fzero` do *MATLAB*[40] para ser empregado na solução analítica.

Como se pode acompanhar na Tabela 3.2, inicialmente o domínio encontra-se a uma temperatura de 360 K, parado, isto é, a uma velocidade uniforme de magnitude zero, e com pressão modificada em todos os pontos igual a zero. Na parede à esquerda, é imposta uma temperatura de 300 K a partir do instante $t = 0$ s; pela condição de não escorregamento, a velocidade do material adjacente à parede é nula e, como não há fluxo de material através da mesma, a componente normal do gradiente da pressão modificada é nulo nesse ponto. No corte à direita, não há variações nas componentes normais da temperatura e da velocidade imediatamente à esquerda e à direita do corte e a pressão modificada foi estabelecida como 0 Pa.

Foram realizados estudos de convergência de malha, no qual simulou-se um caso com as mesmas entradas exceto pelo número de volumes, os quais, em uma malha considerada grossa, totalizam 100 e, em uma malha fina, somam 400, e de convergência temporal, no qual se comparou os resultados obtidos com o emprego do método de discretização *backward* [41], de segunda ordem, sob diferentes passos de

Tabela 3.2: Condições iniciais e de contorno do problema de verificação com a solução de Neumann.

Variáveis:	T (K)	\mathbf{u} (m/s)	\mathcal{P} (Pa)
Condições iniciais	360	(0 0 0)	0
<i>leftWall</i>	300	(0 0 0)	$(\nabla \mathcal{P})_N = \mathbf{0}$
<i>patch</i>	$(\nabla T)_N = \mathbf{0}$	$(\nabla \mathbf{u})_N = \mathbf{0}$	0

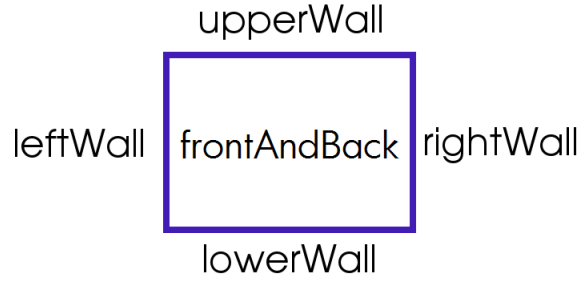


Figura 3.5: Representação do domínio do problema do gálio com os nomes dos contornos.

tempo.

3.3.2 Comparação com os artigos de BRENT *et al.* [1] e de GAU e VISKANTA [2]

Conforme mencionado nas Subseções 2.1.3 e 2.1.2, o artigo de GAU e VISKANTA [2] traz resultados experimentais do perfil da frente de fusão em diferentes instantes de uma placa de gálio vertical de espessura fina, cuja geometria é $0,0889 \times 0,0635 \times 0,0381 \text{ m}^3$, enquanto o artigo de BRENT *et al.* [1] apresenta resultados numéricos do perfil da frente de fusão e das linhas de corrente nos mesmos instantes para um domínio bidimensional de gálio de $0,0889 \times 0,0635 \text{ m}^2$. GAU e VISKANTA [2] apontam que o material é anisotrópico, mas apresenta as vantagens de as propriedades termo-físicas serem bem estabelecidas e de a temperatura de fusão ser próxima a do ambiente.

Assim sendo, procedeu-se simulações com ambas as geometrias com o objetivo de verificar os resultados com os dos dois artigos supracitados.

O experimento consiste em uma placa fina de gálio que se encontra inicialmente a $301,45 \text{ K}$ e que está representada na Figura 3.5, na qual estão denominados seus contornos. No instante $t = 0\text{s}$, a parede esquerda (*leftWall*) é submetida a uma temperatura de $311,15 \text{ K}$, enquanto a da direita (*rightWall*) é mantida a $301,45 \text{ K}$. As condições iniciais e de contorno foram reunidas na Tabela 3.3 e as propriedades termo-físicas do gálio constam na Tabela 3.4 [1]. As constantes da parcela de Darcy assumiram os valores de $C = 1,6 \times 10^6$ e $\zeta = 1 \times 10^{-3}$, como em [1].

Uma vez mais, a condição de contorno para a velocidade nas paredes é a de não escorregamento, ao passo que as de temperatura a mantém fixa nas paredes esquerda e direita enquanto impõem isolamento térmico nas paredes superior e inferior. A condição de contorno *fixedFluxPressure 0*, utilizada em todos os contornos para a pressão, impõe inicialmente $(\nabla \mathcal{P})_N = \mathbf{0}$ e, posteriormente, a condição de contorno para a velocidade determina o fluxo da pressão nos contornos onde essa condição é

Tabela 3.3: Condições iniciais e de contorno do problema do gálio (**frontAndBack* denomina os contornos das paredes da frente e de trás no caso 3D).

Variáveis:	T (K)	\mathbf{u} (m/s)	\mathcal{P} (Pa)
Condições iniciais	301, 45	(0 0 0)	0
<i>leftWall</i>	311, 15	(0 0 0)	<i>fixedFluxPressure</i> 0
<i>rightWall</i>	301, 45	(0 0 0)	<i>fixedFluxPressure</i> 0
<i>upperWall</i>	$(\nabla T)_N = \mathbf{0}$	(0 0 0)	<i>fixedFluxPressure</i> 0
<i>lowerWall</i>	$(\nabla T)_N = \mathbf{0}$	(0 0 0)	<i>fixedFluxPressure</i> 0
<i>frontAndBack</i> *	$(\nabla T)_N = \mathbf{0}$	(0 0 0)	<i>fixedFluxPressure</i> 0

Tabela 3.4: Propriedades termo-físicas do gálio [1].

ρ (kg/m ³)	6093	$\bar{\rho}$ (kg/m ³)	6095	β (1/K)	$1, 2 \times 10^{-4}$
T (K)	302, 93	T_m (K)	302, 93	k (W/m K)	32, 0
c (J/kg K)	381, 5	L (J/kg)	80160	MM (kg)	0, 69723
μ (kg/m s)	$1, 81 \times 10^{-3}$	Pr	$2, 16 \times 10^{-2}$	-	-

especificada.

Quanto às malhas, a placa bidimensional foi dividida em 42 x 32 elementos, totalizando 1344, enquanto a tridimensional tem 42 x 32 x 18 elementos, somando 24.192. Para o estudo de convergência de malha do caso bidimensional, foi simulado um caso, com as mesmas entradas exceto pelo número de volumes, para cada uma das três malhas utilizadas, caracterizando-se a malha de 1344 volumes como média, uma malha de 690 volumes como grossa e outra de 2655 volumes como fina. Não foi realizado o estudo de convergência para o caso tridimensional.

É válido ressaltar que, em GAU e VISKANTA [2], a temperatura inicial da placa não é definida, tendo sido reportado que ela é estabelecida entre 1 e 2K abaixo do ponto de fusão.

Para obter os dados gráficos de GAU e VISKANTA [2] e de BRENT *et al.* [1] utilizou-se programa *g3data*[42].

3.3.3 Verificação da condição de contorno de 3^o tipo

Na figura 3.3, foi possível observar uma foto de um experimento de resfriamento de granada em laboratório. Uma vez que, geralmente, as condições de contorno laterais externas, no carregamento de uma granada em processo industrial, serão aplicadas pelo transporte por convecção natural do ar induzida pela superfície quente da granada ou pelo transporte por convecção forçada, nos quais se impõe uma ventilação direcionada, empregou-se uma condição de contorno que representa tal fenômeno mas não é nativa do *OpenFOAM*. Dado que internamente, adjacente ao contorno, o calor é transferido basicamente por condução, utilizou-se, nas paredes laterais, uma condição de terceiro tipo.



Figura 3.6: Representação do domínio do problema da verificação da condição de contorno de 3º tipo.

Tabela 3.5: Condições iniciais e de contorno do problema da verificação da condição de contorno de 3º tipo.

Variáveis:	T (K)	\mathbf{u} (m/s)	\mathcal{P} (Pa)
Condições iniciais	301,45	(0 0 0)	0
<i>leftWall</i>	3º tipo	(0 0 0)	<i>fixedFluxPressure</i> 0
<i>rightWall</i>	3º tipo	(0 0 0)	<i>fixedFluxPressure</i> 0

Para tanto, antes de utilizá-la nas simulações com granadas, realizou-se uma verificação de seu funcionamento com um caso unidimensional, para o qual existe solução analítica [8], que consiste em um domínio como o da Figura 3.6, na qual estão especificados os contornos.

Inicialmente, o domínio de comprimento 0,1 m encontra-se a $T_i = 280,15$ K e, a partir do instante $t = 0$ s, ambas as extremidades são submetidas à convecção sob as mesmas condições, que estão reunidas na Tabela 3.5, ao passo que os dados termo-físicos encontram-se na Tabela 3.6. O calor será, então, transferido por condução ao longo do domínio e o perfil analítico de temperaturas pode ser obtido por meio da Equação 3.79 [8]:

$$\theta^* = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \exp(-\zeta_n^2 Fo) \cos(\zeta_n x^*) \quad (3.79)$$

em que θ^* é a temperatura adimensionalizada

$$\theta^* = \frac{T - T_{\infty}}{T_i - T_{\infty}} \quad (3.80)$$

x^* é a posição adimensionalizada

$$x^* = \frac{x}{\mathcal{L}} \quad (3.81)$$

\mathcal{L} é o comprimento característico, C_n e ζ_n são coeficientes da solução analítica da

Tabela 3.6: Propriedades termo-físicas para a verificação da condição de 3º tipo.

ρ (kg/m ³)	6093	k (W/m K)	40,61	MM (kg)	0,69723
c (J/kg K)	381,5	μ (kg/m s)	$1,809 \times 10^{-3}$	Pr	$1,7 \times 10^{-2}$

Tabela 3.7: Constantes ζ_1 a ζ_4 para o cálculo da solução analítica de Robin [8].

ζ_1	ζ_2	ζ_3	ζ_4
0,0774	3,1435	6,2841	9,4254

condição de contorno de 3º tipo, calculados mediante as equações abaixo [8]:

$$C_n = \frac{4\text{sen}(\zeta_n)}{2\zeta_n + \text{sen}(2\zeta_n)} \quad (3.82)$$

e

$$\zeta_n \tan(\zeta_n) = Bi \quad (3.83)$$

e Fo e Bi são, respectivamente, os números de Fourier, que representa a difusividade do meio, e de Biot, que é a razão entre a resistência térmica interna de um sólido e a resistência da camada limite térmica [8]:

$$Fo = \frac{\alpha t}{\mathcal{L}^2} \quad \text{e} \quad Bi = \frac{\varpi \mathcal{L}}{k} \quad (3.84)$$

O comprimento característico, que será a metade do comprimento do domínio considerado, é $\mathcal{L} = 0,05$ m e, para a condição de 3º tipo, a temperatura considerada para o ar quiescente foi $T_\infty = 301,15$ K, com coeficiente de convecção $\varpi = 5$ W/K.

Para determinados valores de Bi , é possível encontrar os coeficientes ζ_1 a ζ_4 tabelados, sendo suficientes para o cálculo da temperatura com boa precisão [8]. Para este problema, no qual $Bi \approx 0,006$, os valores dos coeficientes então colocados na Tabela 3.7.

Neste experimento numérico, comparou-se também o desempenho dos métodos de discretização Euler implícito, de primeira ordem, e *backward*, de segunda ordem [41].

3.3.4 Simulações de solidificação de explosivos em granadas

Realizadas as verificações, prosseguiu-se com as simulações que constituem o objetivo deste trabalho.

Os experimentos numéricos foram planejados sob o seguinte critério: comparar, na solidificação do explosivo previamente vazado na granada, o efeito da imposição de diferentes condições de contorno no perfil da frente de solidificação e no tempo de duração dessa etapa. Naturalmente, no primeiro experimento simulou-se a etapa supracitada em um ambiente composto apenas pela presença do ar atmosférico. Nos demais, impôs-se uma condição de ventilação forçada com ar aquecido a diferentes temperaturas, no intuito de suavizar o fenômeno. Estes últimos casos ainda foram desdobrados em duas situações: uma em que a ventilação forçada atua até a soli-

Tabela 3.8: Casos simulados para cada explosivo.

Casos	Descrição
I-1/II-1	Resfriamento natural ($T_\infty = 298, 15\text{K}$)
I-2/II-2	Ventilação a $T_\infty = 313, 15\text{K}$ até a solidificação completa
I-3/II-3	Ventilação a $T_\infty = 323, 15\text{K}$ até a solidificação completa
I-4/II-4	Ventilação a $T_\infty = 333, 15\text{K}$ até a solidificação completa
I-5/II-5	Ventilação a $T_\infty = 343, 15\text{K}$ até a solidificação completa
I-6/II-6	Ventilação a $T_\infty = 313, 15\text{K}$ seguida de resfriamento natural
I-7/II-7	Ventilação a $T_\infty = 323, 15\text{K}$ seguida de resfriamento natural
I-8/II-8	Ventilação a $T_\infty = 333, 15\text{K}$ seguida de resfriamento natural
I-9/II-9	Ventilação a $T_\infty = 343, 15\text{K}$ seguida de resfriamento natural

Tabela 3.9: Propriedades termo-físicas do TNT [9][10].

ρ (kg/m ³)	1467	$\bar{\rho}$ (kg/m ³)	1654	β (1/K)	$3, 1012 \times 10^{-4}$
T (K)	353, 35	T_m (K)	353, 35	k (W/m K)	0, 2
c (J/kg K)	1478, 41	L (J/kg)	96558	MM (kg)	0, 22713
μ (kg/m s)	$1, 46 \times 10^{-2}$	Pr	107, 92	-	-

dificação praticamente completa do explosivo em todo o domínio e outra em que a ventilação é desligada durante o processo, ficando, o restante do fenômeno, sob efeito da convecção natural apenas. Todos esses casos encontram-se resumidos na Tabela 3.8.

Cada uma das simulações foi conduzida utilizando-se as propriedades termo-físicas de dois explosivos: o 2,4,6-trinitro-tolueno, conhecido como α -TNT ou simplesmente TNT, e a Composição B-2, que será doravante referida como Composição B, constituída de 60% em massa de RDX ou hexogênio, nomes pelos quais é conhecido o explosivo 1,3,5-Trinitroperidro-1,3,5-triazina, e 40% de TNT. O TNT, cujas propriedades termo-físicas podem ser consultadas na Tabela 3.9, é o alto-explosivo mais empregado militarmente [9] e a ele foi atribuído o identificador romano I dos casos. A Composição B, de identificador II, é um dos explosivos com os quais a granada objeto do estudo é, de fato, carregada e suas propriedades termo-físicas constam na Tabela 3.10.

A simulação do TNT neste estudo deve-se a esse explosivo servir de base para diversos outros, constituindo a parte da Composição B que pode ser fundida nos processos de carregamento por vazamento. Além disso, o TNT apresenta a prerrogativa

Tabela 3.10: Propriedades termo-físicas da Composição B [9][11].

ρ (kg/m ³)	1690	$\bar{\rho}$ (kg/m ³)	1750	β (1/K)	$9, 681 \times 10^{-5}$
T (K)	352, 15	T_m (K)	352, 15	k (W/m K)	0, 2186
c (J/kg K)	1334, 256	L (J/kg)	58938	MM (kg)	0, 22413
μ (kg/m s)	0, 3133	Pr	1912, 27	-	-

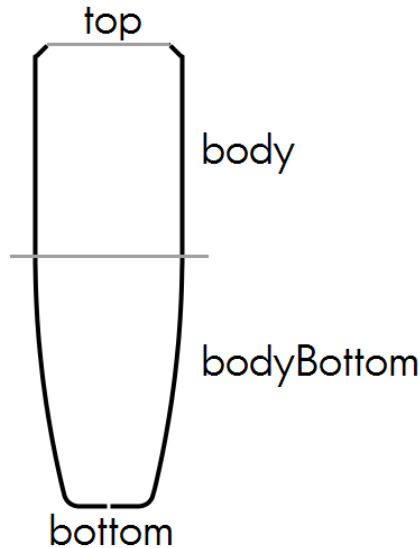


Figura 3.7: Corte no plano xy do domínio do espaço interno da granada e denominação das condições de contorno.

de, quando fundido, poder ser modelado como um fluido Newtoniano em uma faixa de temperaturas pouco acima da usual no processo de carregamento [43], tendo-se, portanto, assumido essa hipótese tanto para ele próprio como para a Composição B neste trabalho.

A geometria utilizada nas simulações foi a da cavidade interna de uma granada de morteiro 81 mm, fornecida pela Fábrica de Juiz de Fora da Indústria de Material Bélico do Brasil. Um corte no plano xy é representado na Figura 3.7 em proporções fidedignas. A altura real da cavidade é 0,1877m. Os contornos dessa geometria estão divididos da seguinte forma: o topo da granada, através do qual ela é continuamente suprida com explosivo fundido na temperatura de fusão, recebeu a denominação *top*; o contorno lateral foi subdividido em duas partes com um corte horizontal a uma altura de 0,1015m, nas quais à de cima, que ocasionalmente recebe ventilação forçada, atribuiu-se o nome *body*, e à de baixo, sob convecção natural em todas as simulações, o nome *bodyBottom*; a base da granada foi chamada de *bottom*.

A hipótese de repletamento contínuo de explosivo fundido através do topo da granada (*top*) garante a presença unicamente de explosivo líquido e/ou sólido no domínio em qualquer instante abrangido neste estudo. Em realidade, esta é uma condição de processo necessária para um carregamento de boa qualidade, geralmente garantida pela presença de um funil ou aumentador acoplado ao topo da granada, que deve ser mantido aquecido de modo a fornecer explosivo fundido para completar a diferença de volume causada principalmente pela contração da massa durante a solidificação.

Nos casos I-6 a I-9 e II-6 a II-9, expostos na Tabela 3.8, a ventilação forçada foi desligada após todo o domínio abaixo do plano de corte entre os contornos *bodyBot-*

Tabela 3.11: Condições iniciais e de contorno das simulações com TNT e Composição B.

Variáveis:	T (K)	\mathbf{u} (m/s)	\mathcal{P} (Pa)
Condições iniciais	358, 15	(0 0 0)	0
<i>top</i>	358, 15	<i>pressureInletOutletVelocity</i>	0
<i>body</i>	3º tipo	(0 0 0)	$(\nabla \mathcal{P})_N = \mathbf{0}$
<i>bodyBottom</i>	3º tipo	(0 0 0)	$(\nabla \mathcal{P})_N = \mathbf{0}$
<i>bottom</i>	$(\nabla T)_N = \mathbf{0}$	(0 0 0)	$(\nabla \mathcal{P})_N = \mathbf{0}$

tom e *body* encontrar-se completamente sólido.

As condições iniciais e de contorno encontram-se resumidas na Tabela 3.11, na qual *pressureInletOutletVelocity* é uma condição pré-definida no *OpenFOAM* para contornos onde a pressão é especificada, que assumirá $(\nabla \mathbf{u})_N = \mathbf{0}$ para o escoamento para fora do domínio e, para dentro, $(\nabla \mathbf{u})_N$ do contorno será igual ao da célula interna adjacente a esse contorno [16].

A convecção é representada pela lei de resfriamento de Newton e requer, além das temperaturas no contorno e no fluido quiescente, o coeficiente de convecção, aqui simbolizado por ϖ , calculado a partir da correlação abaixo

$$\bar{N}u = \frac{\varpi \mathcal{D}}{k_f} \quad (3.85)$$

em que $\bar{N}u$ é o número de Nusselt médio, que fornece uma medida da transferência de calor por convecção que ocorre na superfície, \mathcal{D} é o diâmetro do domínio sob convecção e k_f é a condutividade térmica do fluido na temperatura do filme [8].

Para os casos de convecção forçada, foi empregada a correlação abaixo para o cálculo de $\bar{N}u$, na qual Re_D é o número de Reynolds, que representa a razão entre as forças de inércia e as forças viscosas, e $Pr = \nu/\alpha$ é o número de Prandtl, que consiste na razão entre as difusividades de quantidade de movimento linear e térmica, [8]:

$$\bar{N}u = \bar{C} Re_D^{\bar{m}} Pr^{1/3} \quad (3.86)$$

Essa correlação é válida para $Pr > 0,7$ e \bar{C} e \bar{m} são constantes para o cálculo de $\bar{N}u$ baseadas em Re_D [8]. O número de Reynolds Re_D é calculado a partir de:

$$Re_D = \frac{\mathcal{D}|\mathbf{u}_{\text{ar}}|}{\nu} \quad (3.87)$$

em que \mathbf{u}_{ar} é a velocidade do ar na ventilação forçada, para a qual se supôs um fluxo de ar direcionado radialmente de $|\mathbf{u}_{\text{ar}}| = 10\text{m/s}$ [8].

Sendo Z a altura do domínio sob convecção, a caracterização da convecção natural, por sua vez, é feita a partir do número de Rayleigh, Ra_Z , que consiste na multiplicação dos números de Grashof, Gr_Z , que indica a razão da força de em-

puxo e da força viscosa às quais o fluido está submetido, e de Prandtl [8]. Esse produto, então, pode prever a transição do tipo de escoamento em convecção livre em diferentes casos [8]:

$$Ra_Z = Gr_Z Pr = \frac{|\mathbf{g}|\bar{\beta}(T_w - T_\infty)Z^3}{\nu\alpha} \quad (3.88)$$

em que $|\mathbf{g}|$ é o módulo da aceleração da gravidade, $\bar{\beta}$ é o fator de compressibilidade, T_w e T_∞ são, respectivamente, as temperaturas da parede e do fluido quiescente, Z é a altura característica, ν é a viscosidade cinemática e α é a difusividade térmica. Para placas verticais, a transição ocorre em $Ra_{Z,c} \approx 10^9$ (o subscrito c refere-se a *crítico*).

Para o cálculo de ϖ , diversas são as correlações encontradas na literatura, sendo determinante a geometria que está sob influência da convecção natural. Para fins de cálculo de ϖ neste estudo, a forma da granada foi aproximada para um cilindro de diâmetro $D = 0,0595$ m e altura $Z = 0,1877$ m, que constituem o maior diâmetro da geometria interna da granada, sendo o da seção reta entre os contornos *body* e *bodyBottom*, e sua altura total, e, quando se considera a convecção natural apenas no contorno *bodyBottom*, o mesmo diâmetro e a altura $Z = 0,1015$ m. Cilindros verticais que obedecem a relação

$$\mathcal{D} \geq \frac{35Z}{Gr_Z^{1/4}} \quad (3.89)$$

podem ser aproximados para uma placa vertical, não sendo esta a situação aqui simulada, pois, para a granada inteira, $0,1024 > \mathcal{D}$ e, para o contorno *bodyBottom*, $0,0878 > \mathcal{D}$. Dessa forma, utilizou-se a correlação encontrada em DAY *et al.* [44] para o cálculo de $\bar{N}u$ em cilindros verticais:

$$\bar{N}u = \frac{4}{3} \left[\frac{7Gr_L Pr^2}{5(20 + 21Pr)} \right]^{1/4} + \frac{4(272 + 315Pr)Z}{35(64 + 63Pr)\mathcal{D}} \quad (3.90)$$

Para cada um dos casos especificados na Tabela 3.8, os dados para o ar foram calculados por meio de interpolação linear nas temperaturas de filme T_f , com base nos dados de INCROPERA e DEWITT [8] a 300 e a 350K. Uma vez que a condição de 3º tipo implementada suporta apenas casos em que o coeficiente de convecção é constante, considerou-se a parede externa da granada a 358,15K e o ambiente sempre a 298,15K.

As propriedades do ar nas temperaturas de filme se encontram na Tabela 3.12, enquanto a Tabela 3.13 fornece os números adimensionais calculados e o coeficiente de convecção para cada caso. Destaca-se que, para $4 \times 10^3 < Re_D < 4 \times 10^4$, $\bar{C} = 0,193$

Tabela 3.12: Propriedades termo-físicas do ar.

T_∞ (K)	T_f (K)	ρ (kg/m ³)	$\nu \times 10^5$ (m ² /s)	$\alpha \times 10^5$ (m ² /s)	k (W/m K)
298,15	328,15	1,0677	1,8687	2,6666	0,0284
313,15	335,65	1,0428	1,9453	2,7776	0,0289
323,15	340,65	1,0261	1,9964	2,8516	0,0293
333,15	345,65	1,0095	2,0475	2,9256	0,0297
343,15	350,65	0,9928	2,0986	2,9996	0,0300

Tabela 3.13: Números adimensionais e coeficiente de convecção médio do ar.

T_∞ (K)	Pr	Gr	$Re_D \times 10^{-4}$	\bar{Nu}	ϖ (W/K)
298,15	0,7036	1,6915x10 ^{7*}	—	33,7712*	5,1067*
		2,6747x10 ^{6**}	—	21,1484**	5,9139**
313,15	0,7027	—	3,0585	101,4029	49,3178
323,15	0,7021	—	2,9803	99,7788	49,1484
333,15	0,7015	—	2,9059	98,2212	48,9919
343,15	0,7009	—	2,8352	96,7256	48,8474

* nos contornos *body* e *bodyBottom*, ambos sob convecção natural

** no contorno *bodyBottom*, quando *body* se encontra sob convecção forçada

e $\bar{m} = 0,618$ [8].

Os casos I-1 a I-9, com os dados do TNT, e II-1 a II-9, com os dados da Composição B, estão resumidos nas tabelas 3.14 e 3.15 respectivamente.

Três malhas estruturadas, em diferentes níveis de refinamento, foram feitas com a finalidade de proceder o estudo de convergência de malha: uma, considerada grossa, com 48.144 volumes; outra, tida como média e com a qual se executou os experimentos da Tabela 3.8, com 88.395 volumes; e a terceira, considerada fina, com 180.937 volumes. Esse estudo foi realizado por amostragem com o caso I-3 e tanto a comparação entre as malhas como os resultados obtidos para todos os casos foram apresentados em um corte no plano xy.

3.4 Procedimento numérico

Neste trabalho, todas as simulações foram realizadas na versão 3.0.1 do *OpenFOAM*. Para as simulações uni e bidimensionais, utilizou-se um processador Intel[®] Core[™] i7 CPU 960 de 3,20 GHz com 8 núcleos, enquanto, para as simulações tridimensionais, todas executadas em 24 núcleos, foram utilizados processadores Intel Xeon X5675, 3,07 GHz, com 12 núcleos, e AMD Opteron 6174, 2,2 GHz, com 24 núcleos.

Os esquemas de discretização espacial foram: *upwind* para os termos convectivos, linear para os termos difusivos da equação do movimento e harmônico para os termos

Tabela 3.14: Resumo dos casos com o TNT.

I-1	até solidificação completa	em <i>body</i> e <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15\text{K}$
I-2	até solidificação completa	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 313, 15\text{K}$
		em <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15\text{K}$
I-3	até solidificação completa	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 323, 15\text{K}$
		em <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15\text{K}$
I-4	até solidificação completa	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 333, 15\text{K}$
		em <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15\text{K}$
I-5	até solidificação completa	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 343, 15\text{K}$
		em <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15\text{K}$
I-6	até $t = 5.350\text{s}$	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 313, 15\text{K}$
	a partir de $t = 5.350\text{s}$	em <i>body</i> e <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15\text{K}$
I-7	até $t = 5.800\text{s}$	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 323, 15\text{K}$
	a partir de $t = 5.800\text{s}$	em <i>body</i> e <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15\text{K}$
I-8	até $t = 6.150\text{s}$	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 333, 15\text{K}$
	a partir de $t = 6.150\text{s}$	em <i>body</i> e <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15\text{K}$
I-9	até $t = 6.550\text{s}$	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 343, 15\text{K}$
	a partir de $t = 6.550\text{s}$	em <i>body</i> e <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15\text{K}$

Tabela 3.15: Resumo dos casos com a Composição B.

II-1	até solidificação completa	em <i>body</i> e <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15K$
II-2	até solidificação completa	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 313, 15K$
		em <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15K$
II-3	até solidificação completa	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 323, 15K$
		em <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15K$
II-4	até solidificação completa	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 333, 15K$
		em <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15K$
II-5	até solidificação completa	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 343, 15K$
		em <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15K$
II-6	até $t = 4.000s$	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 313, 15K$
	a partir de $t = 4.000s$	em <i>body</i> e <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15K$
II-7	até $t = 4.350s$	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 323, 15K$
	a partir de $t = 4.350s$	em <i>body</i> e <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15K$
II-8	até $t = 4.650s$	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 333, 15K$
	a partir de $t = 4.650s$	em <i>body</i> e <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15K$
II-9	até $t = 4.950s$	em <i>body</i> : convecção forçada com $T_\infty = 343, 15K$
	a partir de $t = 4.950s$	em <i>body</i> e <i>bodyBottom</i> : convecção natural com $T_\infty = 298, 15K$

difusivos da equação da energia.

Para a discretização temporal aplicou-se o esquema *backward*. Empregou-se passos de tempos variáveis, sob o critério de número de Courant máximo igual a 0,1.

A tolerância para a pressão foi estabelecida em 1×10^{-8} , enquanto fixou-se em 1×10^{-6} para as demais variáveis. Fixou-se que as equações fossem resolvidas ao menos uma vez a cada iteração.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

Neste capítulo estão expostos resultados e discussões a respeito das simulações por-menorizadas no capítulo anterior, na Seção 3.3.

4.1 Verificação com a solução de Neumann

Inicia-se a análise efetuando-se o estudo da convergência de malha e da convergência temporal realizado para cada um dos programas: dos resultados obtidos com o uso do conjunto *buoyantPimpleFoam* e *solidificationMeltingSource*, ao qual se referirá doravante como *bPF+sMS* ou simplesmente *OF*, de *OpenFOAM*, e daqueles da solução analítica, implementada no *StefanNeumannFoam* (*SNF*) (vide Subseção 3.3.1).

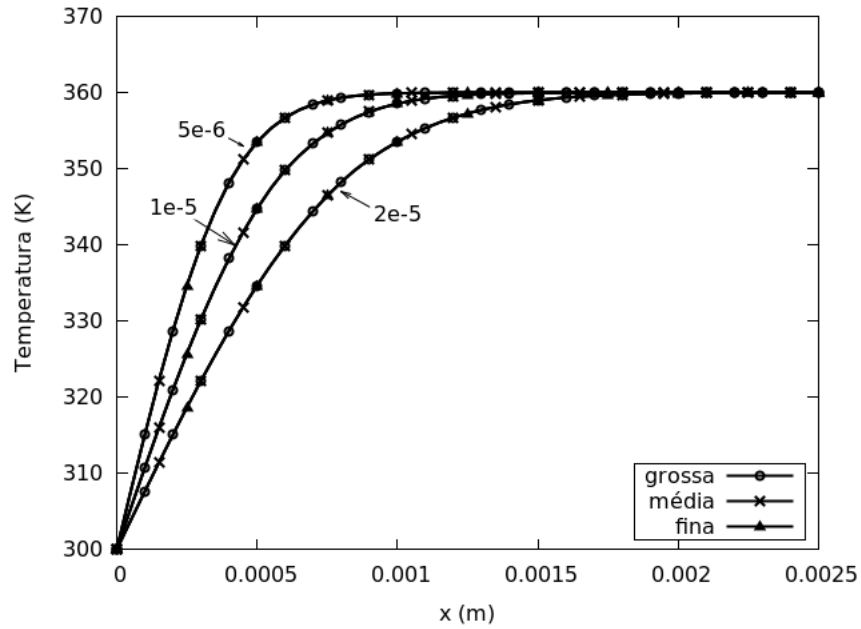
As Figuras 4.1a e 4.2a mostram, respectivamente, o comportamento dos perfis de temperatura obtidos por *bPF+sMS* e por *SNF* para o problema descrito na Subseção 3.3.1, nos instantes $t = 5 \times 10^{-6}$, 1×10^{-5} e 2×10^{-5} s, para as malhas grossa, de 100 volumes, média, de 200 volumes, e fina, de 400 volumes. Observa-se uma excelente concordância entre os resultados, tendo-se prosseguido com os experimentos na malha média.

Por sua vez, as Figuras 4.1b e 4.2b trazem os perfis de temperatura obtidos por meio do *bPF+sMS* e do *SNF* em $t = 5 \times 10^{-6}$, 1×10^{-5} e 2×10^{-5} s sob diferentes passos de tempo: $dt = 1 \times 10^{-7}$, 1×10^{-8} e 5×10^{-9} s, sendo também possível notar a superposição dos resultados.

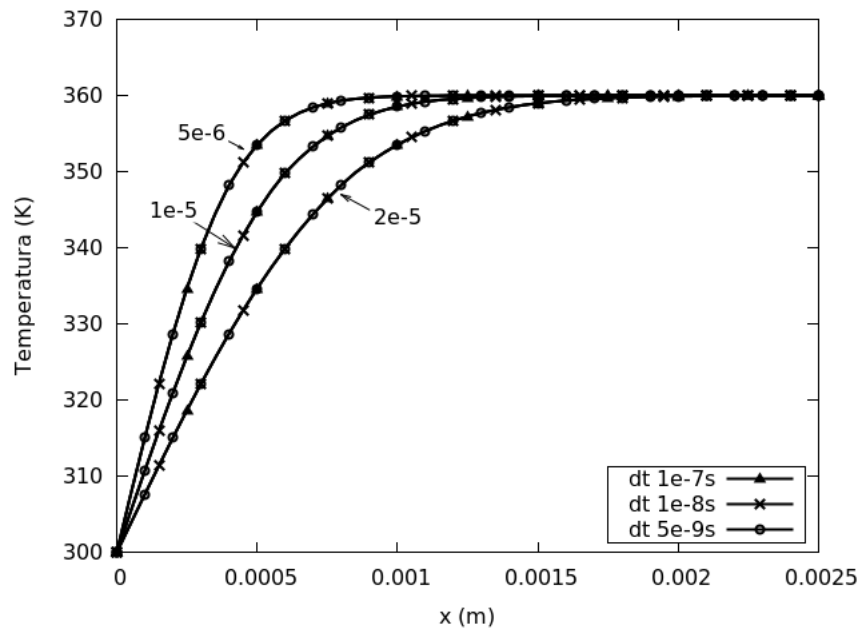
Nas Figuras 4.3a e 4.3b vê-se, respectivamente, as frentes de solidificação expeditas por cada um dos programas, em que *Sol An* são as curvas obtidas pelo *SNF* e *bPF* são aquelas saídas do *bPF+sMS*, e o erro relativo percentual entre as soluções, calculados da seguinte forma:

$$\text{erro relativo (\%)} = \frac{|T_{SNF}(x) - T_{OF}(x)|}{360 - 300} \times 100 \quad (4.1)$$

em que $360 - 300$ é a maior diferença de temperaturas experienciada neste problema.

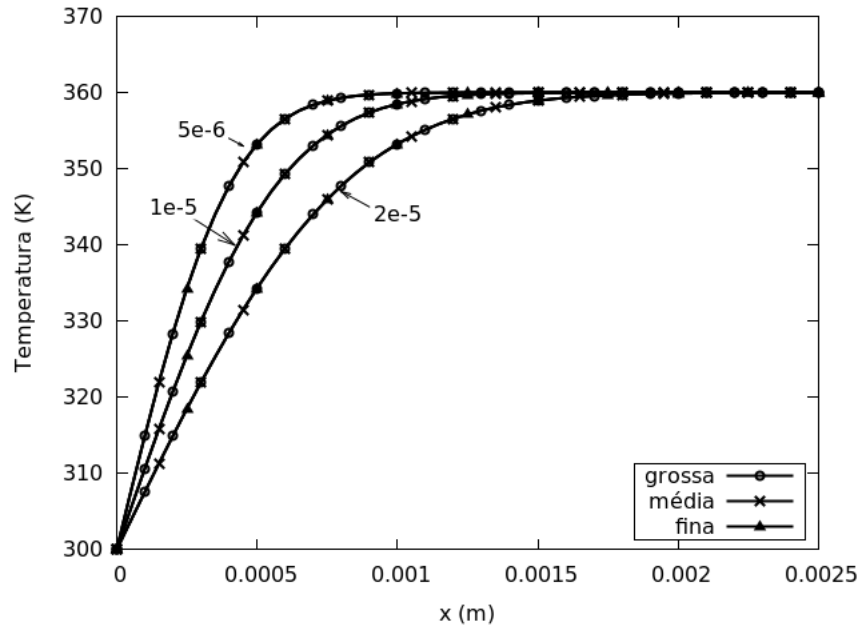


(a) malha

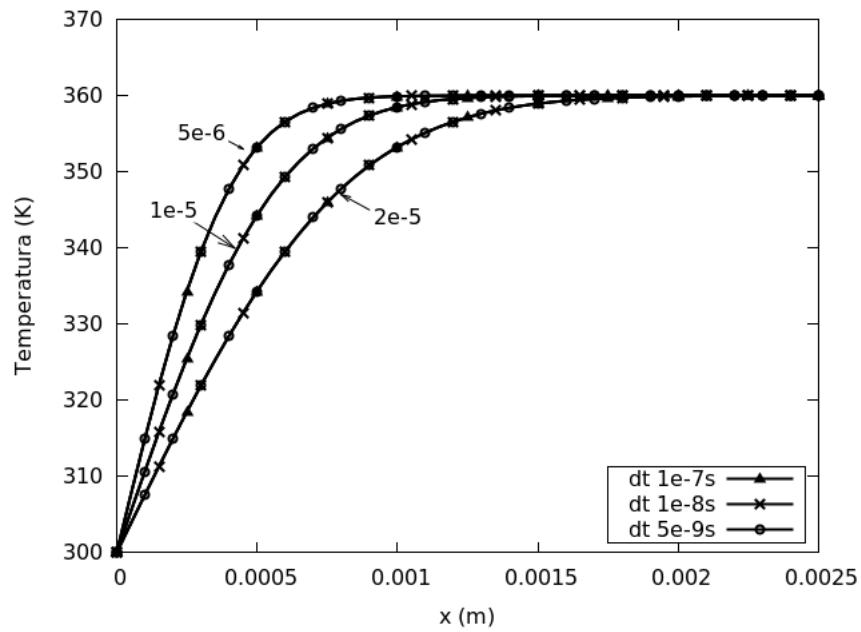


(b) temporal

Figura 4.1: Testes de convergência (a) de malha e (b) temporal do *bouyantPimpleFoam* nos instantes 5×10^{-6} , 1×10^{-5} e 2×10^{-5} s.



(a) malha



(b) temporal

Figura 4.2: Testes de convergência (a) de malha e (b) temporal do *StefanNeumannFoam* nos instantes 5×10^{-6} , 1×10^{-5} e 2×10^{-5} s.

Se o denominador para o cálculo do erro fosse o valor da temperatura calculado analiticamente em vez de ser uma diferença de temperaturas, ele seria sensível à escala de temperaturas utilizada.

Com base nas Figuras 4.3a e 4.3b, conclui-se que o conjunto $bPF+sMS$ resolve de maneira bastante satisfatória o balanço da energia nos processos de mudança de fase unidimensionais, ainda que a solução analítica e a implementada nos programas nativos do *OpenFOAM* sejam baseadas em modelos diferentes, sob considerações diversas, conforme foi desenvolvido na Seção 3.2.

4.2 Verificação com resultados de trabalhos anteriores

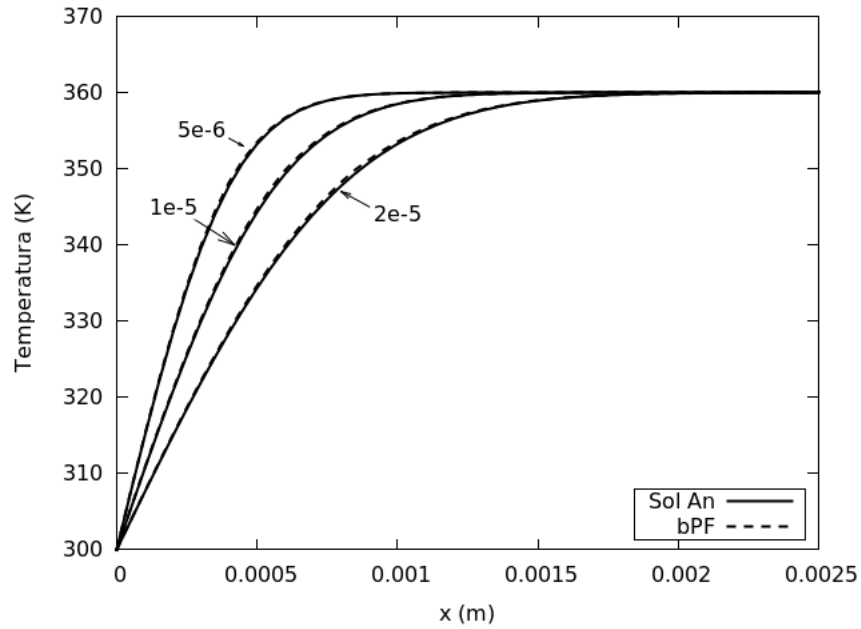
De maneira análoga à seção anterior, iniciou-se esta verificação com o estudo de convergência de malha para o problema de fusão de uma placa de gálio descrito na Subseção 3.3.2. Para tanto, realizou-se a comparação das isotermas a 29, 30, 33 e 36°C, no instante $t = 600\text{s}$ (10min), obtidas por meio da geometria bidimensional dividida em 690, 1344 e 2655 volumes, como consta na Figura 4.4.

Observa-se que as curvas apresentaram um bom comportamento entre si, principalmente as referentes às malhas média e fina, o que levou ao prosseguimento das simulações com a malha média.

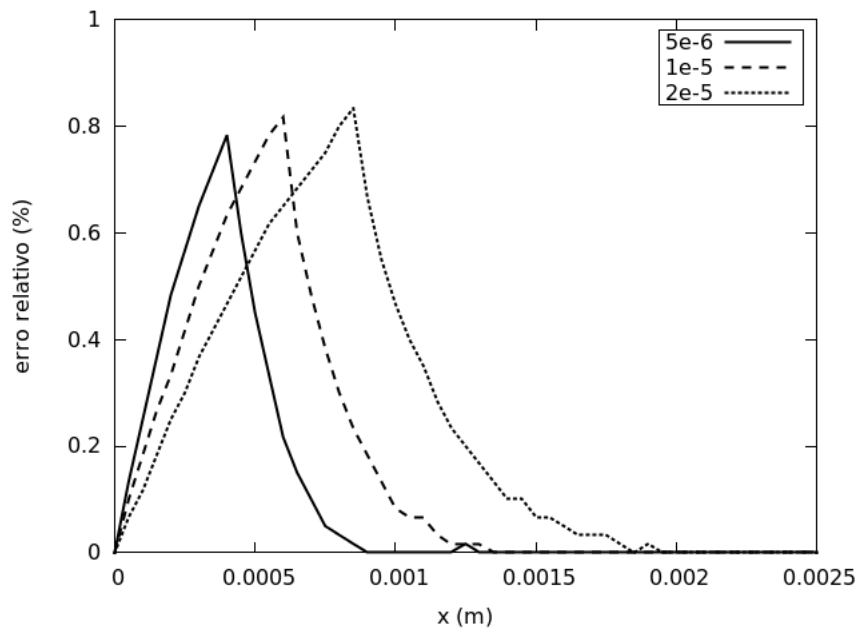
A partir da geometria bidimensional, confrontou-se, então, as isotermas obtidas com o uso do *OpenFOAM*, nos instantes $t = 180, 600$ e 1140s , com as apresentadas pelo artigo de BRENT *et al.* [1], referenciadas como *artigo*, geradas também por simulação computacional. É possível acompanhar esses resultados nas Figuras 4.5a, 4.5b e 4.5c, nas quais as temperaturas estão em graus Celsius e as legendas de tempo em minutos.

No exame das figuras supracitadas, observa-se o mesmo comportamento qualitativo das curvas, embora haja algumas discrepâncias quantitativas. Na Figura 4.5a, destaca-se o comportamento das curvas do artigo de referência na adjacência do contorno superior (*upperWall* na Figura 3.5), para o qual é esperado um perfil mais vertical, devido à condição de contorno de isolamento térmico, ou $(\nabla T)_N = \mathbf{0}$. Uma vez que o modelo implementado no *OpenFOAM* é o mesmo que consta no artigo, as demais discordâncias podem dever-se aos esquemas de discretização empregados em um e outro, que são diferentes, conforme consta nas Subseções 2.1.2 e 3.3.2.

As Figuras 4.6a, 4.6b e 4.6c trazem as linhas de corrente, geradas a partir do perfil de velocidades desenvolvido no meio por conta da convecção natural. Em termos qualitativos, as curvas do artigo e deste estudo são bastante similares, não sendo possível compará-los quantitativamente uma vez que o artigo não fornece valores



(a) perfis de temperatura



(b) erro relativo

Figura 4.3: Confronto dos resultados do *bouyantPimpleFoam* e da solução analítica: (a) frentes de solidificação e (b) erro relativo nos instantes 5×10^{-6} , 1×10^{-5} e 2×10^{-5} s.

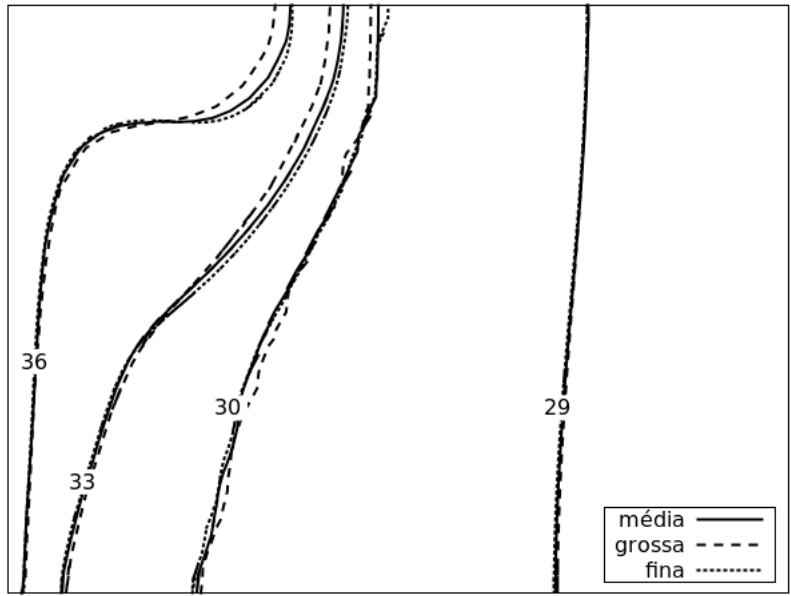


Figura 4.4: Estudo de convergência de malha para o caso 2D - isothermas no instante $t=10\text{min}$ (temperaturas em $^{\circ}\text{C}$).

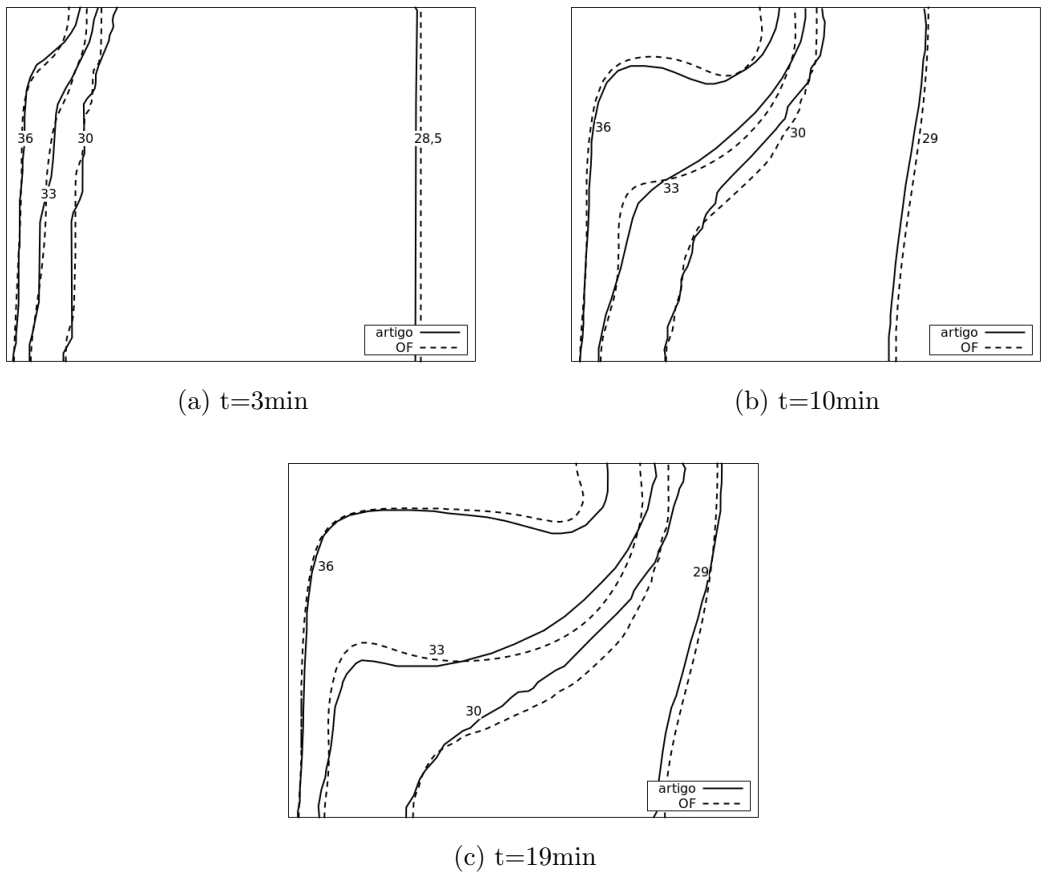


Figura 4.5: Comparação entre os resultados das isothermas obtidas por meio do *bouyantPimpleFoam* e do artigo de BRENT *et al.* [1] nos instantes (a) $t=3\text{min}$, (b) $t=10\text{min}$ e (c) $t=19\text{min}$ (temperaturas em $^{\circ}\text{C}$).

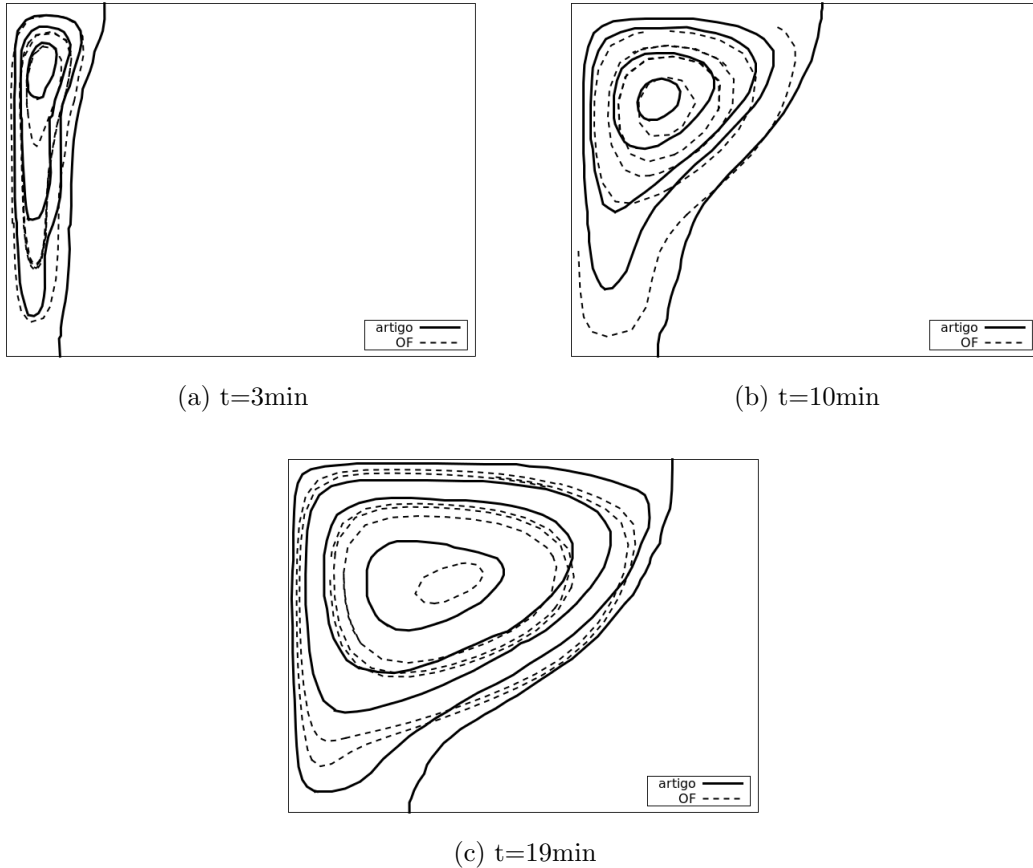


Figura 4.6: Comparação entre os resultados das linhas de corrente obtidas por meio do *bouyantPimpleFoam* e do artigo de BRENT *et al.* [1] nos instantes (a) $t=3\text{min}$, (b) $t=10\text{min}$ e (c) $t=19\text{min}$.

obtidos para a velocidade.

Finalizando esta verificação, confrontou-se, na Figura 4.7, as frentes de fusão obtidas neste trabalho empregando-se as geometrias bi (OF 2D) e tridimensionais (OF 3D) com aquelas obtidas numericamente por BRENT *et al.* [1] (BVR) e experimentalmente por GAU e VISKANTA [2] (GV). Utilizou-se $r_l = 0,5$ para caracterizar essas frentes e, para a geometria tridimensional, foi considerado o plano xy , que a corta na metade de sua espessura.

Uma vez mais, a análise qualitativa conduz à consideração de um bom comportamento das curvas obtidas numericamente em relação àquela obtida em laboratório, sendo possível notar que, em alguns trechos, como nas adjacências do contorno inferior (*lowerWall* na Figura 3.5), os resultados obtidos neste trabalho encontram-se mais próximos do experimental do que aqueles de BRENT *et al.* [1].

A discordância das curvas de GAU e VISKANTA [2] em comparação às outras, principalmente em $t = 1140\text{s}$, pode ser influenciada pelo comportamento real da massa específica em relação à variação de temperatura quando o material é totalmente líquido ou sólido ou por um isolamento térmico imperfeito, natural na rea-

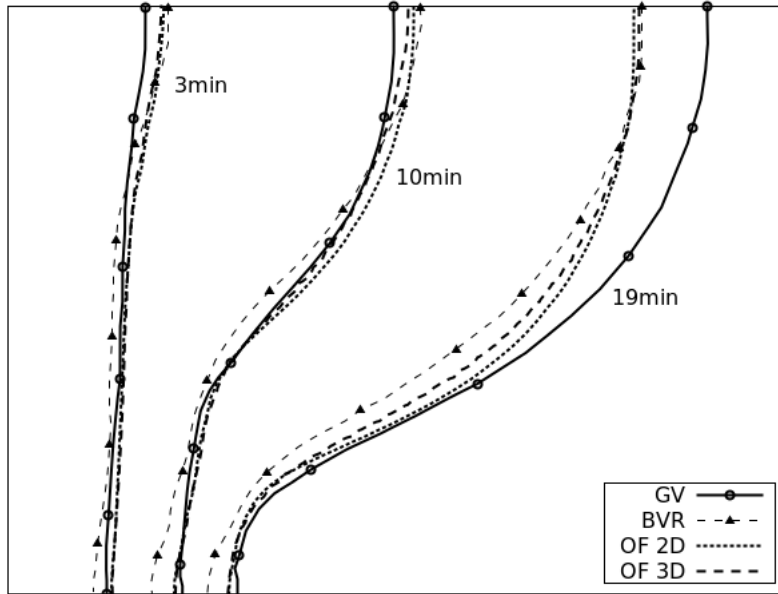


Figura 4.7: Frentes de fusão ($r_l = 0,5$), nos instantes $t=3$, $t=10$ e $t=19$ min, obtidas por GAU e VISKANTA [2](GV), BRENT *et al.* [1](BVR) e por meio do *buoyantPimpleFoam*(OF) com as geometrias de BVR (2D) e GV (3D).

lidade, dos contornos superior e inferior no experimento de laboratório, de modo a permitir alguma troca de calor com o ambiente. Se a placa estiver recebendo calor do ambiente por outro contorno além do *leftWall*, a convecção natural se encarregaria de contribuir com a circulação dessa energia, levando a um maior aquecimento das zonas que apresentam maiores magnitudes de velocidade e acelerando a fusão nessas regiões. Também não foi considerada, nas simulações, a característica anisotrópica do material, citada na Subseção 2.1.3, e, no artigo de GAU e VISKANTA [2], a temperatura inicial utilizada não é determinada, conforme mencionado na Subseção 3.3.2.

4.3 Verificação da condição de contorno de 3º tipo

Os resultados das verificações mostrados nas Seções 4.1 e 4.2 denotam a confiabilidade do conjunto *buoyantPimpleFoam* e *solidificationMeltingSource* para resolver problemas de mudança de fase líquido-sólido tanto no que concerne à transferência de calor quanto na previsão do perfil de velocidades decorrente da convecção natural. Concluindo, então, a fase de verificações, resta analisar o desempenho da implementação da condição de contorno de 3º tipo, que não é nativa do *OpenFOAM*. Na Subseção 3.3.3, foi explicado que essa condição apresenta solução analítica para alguns sistemas unidimensionais e propôs-se um problema cujo resultado foi confrontado com ela.

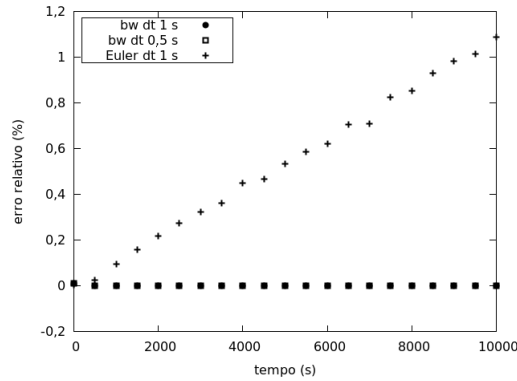


Figura 4.8: Comparação entre os erros relativos percentuais dos resultados da temperatura adimensionalizada, no ponto central do domínio, do método *backward* (bw), com os passos de tempo $dt = 1$ e $0,5$ s, e do Euler implícito (Euler), com passo $dt = 1$ s, de $t = 0$ a 10.000 s.

Inicia-se com a realização do estudo de convergência temporal, não apenas analisando o erro percentual relativo à solução analítica dos resultados obtidos para os passos de tempo $dt = 1$ e $dt = 0,5$ s com o método *backward* (bw), de segunda ordem, como também confrontando-os com o erro calculado com o uso do método Euler implícito (Euler), que é de primeira ordem, para $dt = 1$ s. O erro relativo foi calculado conforme abaixo:

$$\text{erro relativo (\%)} = \frac{|\theta_{an}^* - \theta_{num}^*|}{\theta_{an}^*} \times 100 \quad (4.2)$$

em que θ_{an}^* é a temperatura adimensionalizada advinda da solução analítica e θ_{num}^* corresponde à da solução numérica. O resultado pode ser acompanhado na Figura 4.8.

Na observância do gráfico, nota-se que o método *backward* apresenta erro praticamente nulo com ambos os passos de tempo, enquanto o método Euler implícito acumula erros apreciáveis, o que é passível de acontecer com os métodos de primeira ordem em soluções transientes.

A Figura 4.9 apenas corrobora com a análise da eficácia da condição de contorno de 3º tipo utilizando-se o esquema de interpolação *backward*, trazendo o perfil da temperatura adimensionalizada no ponto central do domínio ao longo do tempo.

4.4 Simulações aplicadas ao carregamento de granadas

Nesta seção constam os resultados das simulações computacionais da solidificação dos explosivos TNT e Composição B no interior de um corpo de granada. Os dados termo-físicos e a caracterização dos experimentos estão descritos na Subseção 3.3.4.

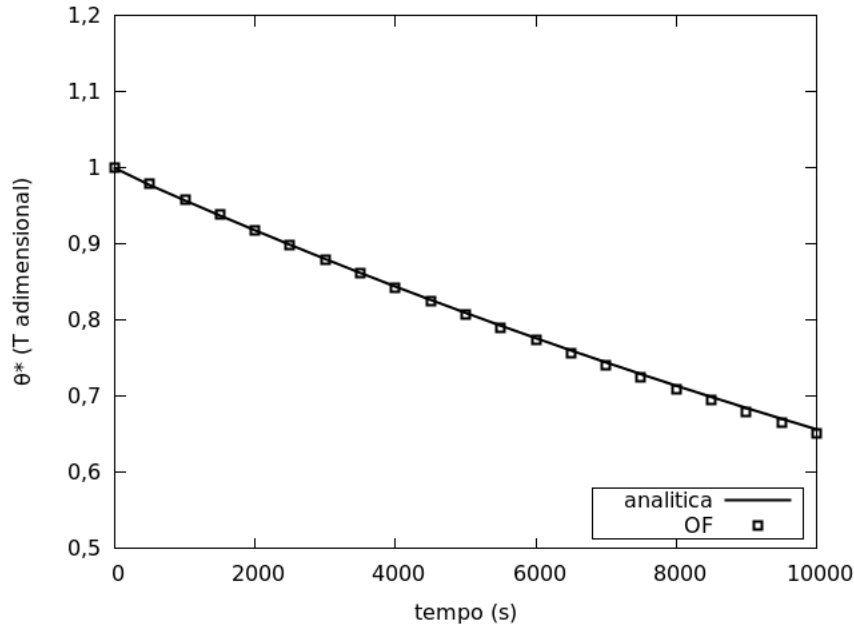


Figura 4.9: Confronto dos resultados para a temperatura adimensional no centro do domínio obtidos por meio do *buoyantPimpleFoam* com a condição de contorno de 3º tipo e da solução analítica de $t=0$ a $t=10.000s$.

Inicialmente, expõe-se aqui as Figuras 4.10a e 4.10b, que trazem o estudo da convergência de malha para a geometria interna da granada nos instantes $t = 3.600$ e $5.400s$, nas quais se vê o perfil da frente de solidificação, isto é, onde a fração de fase líquida é $r_l = 0,5$, para o caso I-3. Tendo em vista a boa superposição das curvas obtidas com as três malhas, procedeu-se as simulações deste trabalho com a malha média.

Por sua vez, nas Figuras 4.11a e 4.11b, em $t = 3.600s$, e nas Figuras 4.12a e 4.12b, em $t = 5.400s$, é possível verificar que a espessura da frente ocupa em torno de dois volumes na malha média.

As Figuras 4.13, 4.14, 4.15, 4.16, 4.17 e 4.18 trazem a evolução da frente de solidificação ($r_l = 0,5$) nos casos I-1 a I-9 nos instantes $t = 600, 3.600, 5.400, 5.800, 8.500, 10.000$ e $13.650s$. Ressalta-se que a diferença entre os pares I-2 e I-6, I-3 e I-7, I-4 e I-8 e I-5 e I-9 inicia-se quando a frente ultrapassa o plano limite entre os contornos *bodyBottom* e *body*, o que ainda não acontece até o instante $t = 5.350s$ (Tabela 3.14), de modo que, nas Figuras 4.13a e 4.13b, as curvas referentes a esses pares de casos são coincidentes.

Desde a figura do instante $t = 600s$, Figura 4.13a, já se nota um fenômeno interessante: a curva relativa ao resfriamento com ventilação forçada a $313,15K$ (I-2 e I-6) está mais avançada do que a da convecção natural (I-1), que em $t = 600s$ é praticamente coincidente com a curva que corresponde à ventilação a $333,15K$ (I-3 e I-7) e, posteriormente, segue entre as curvas de ventilação a $313,15K$ (I-4 e I-8) e $323,15K$ (I-5 e I-9). Isso significa que impor uma ventilação a $313,15K$ nesse

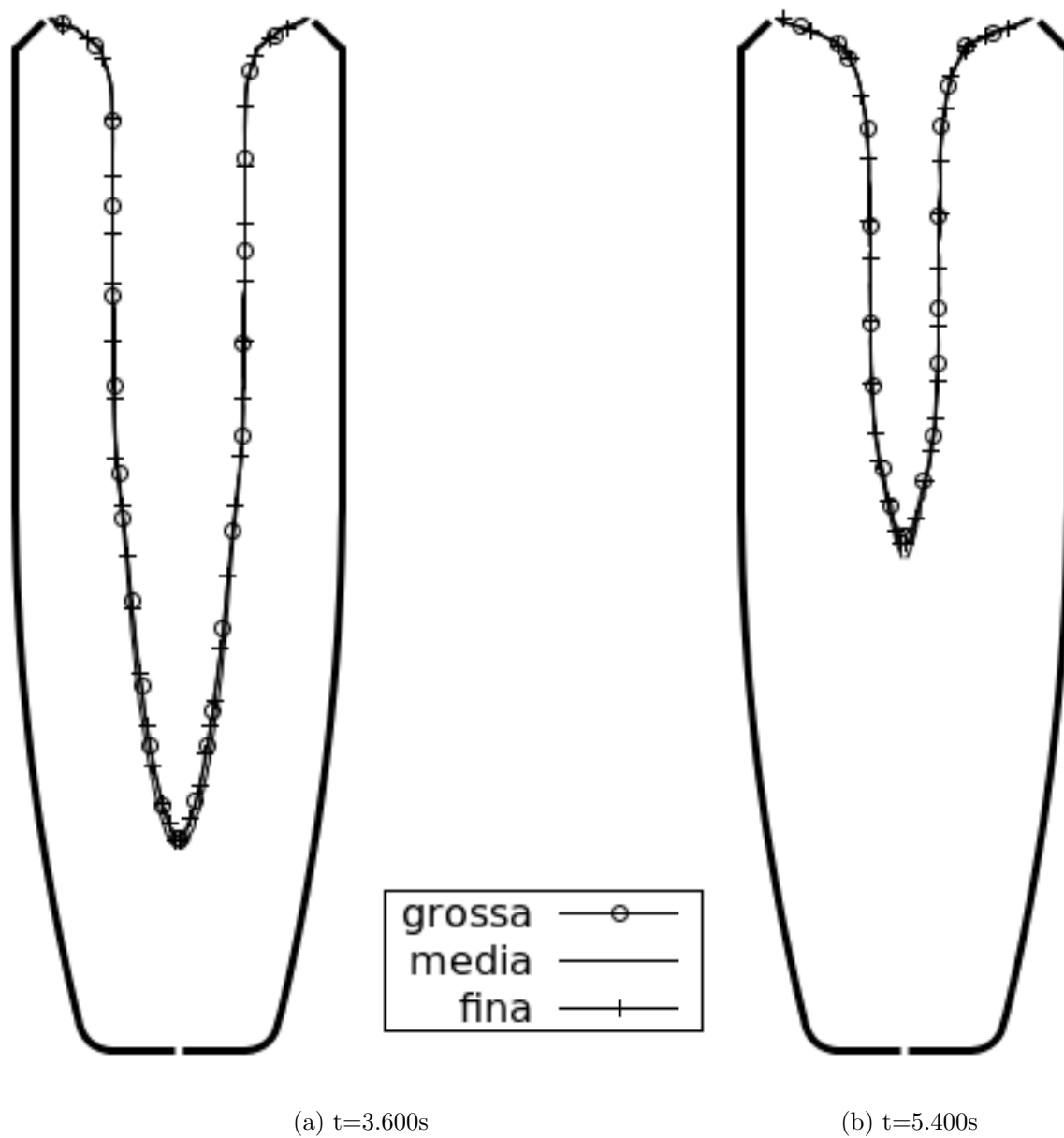
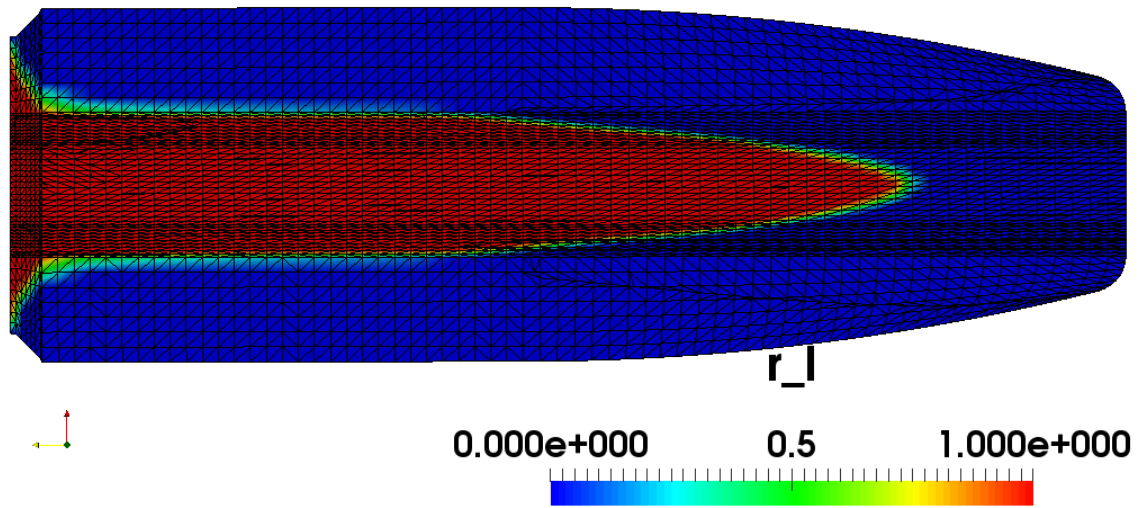
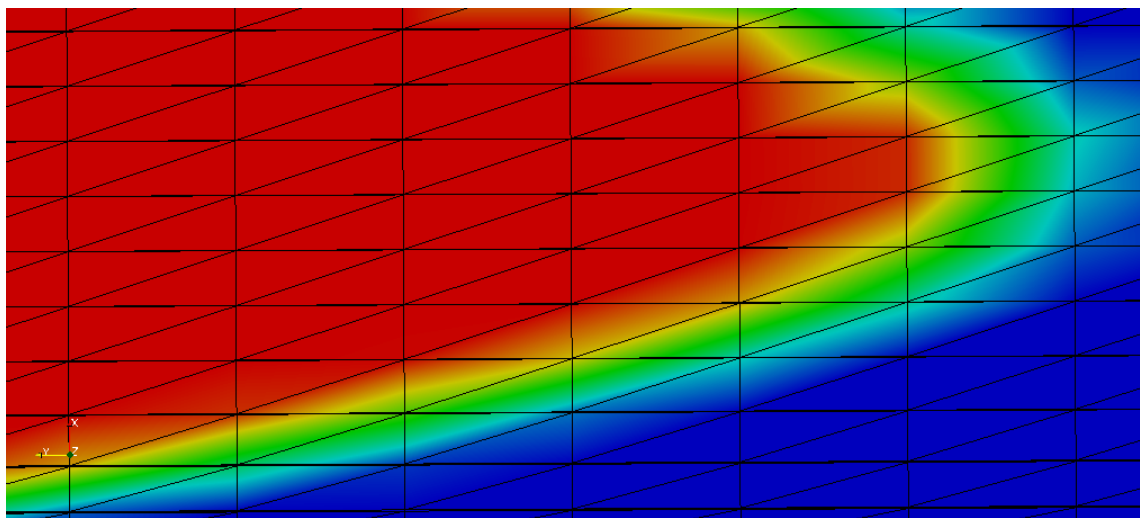


Figura 4.10: Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) com as malhas grossa, média e fina para o caso I-3 (a) $t = 3.600s$ e (b) $t = 5.400s$.

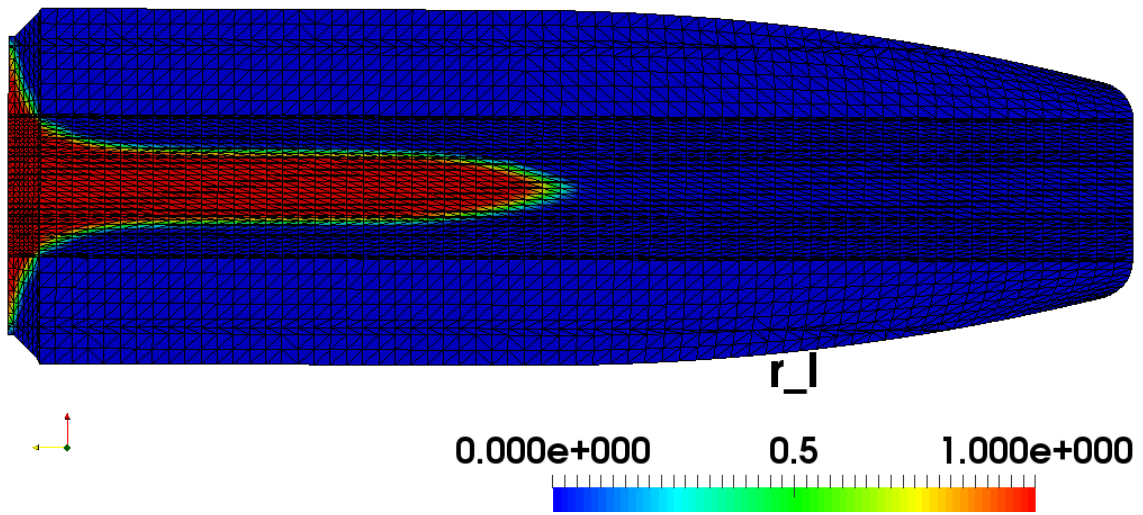


(a) Corte da malha

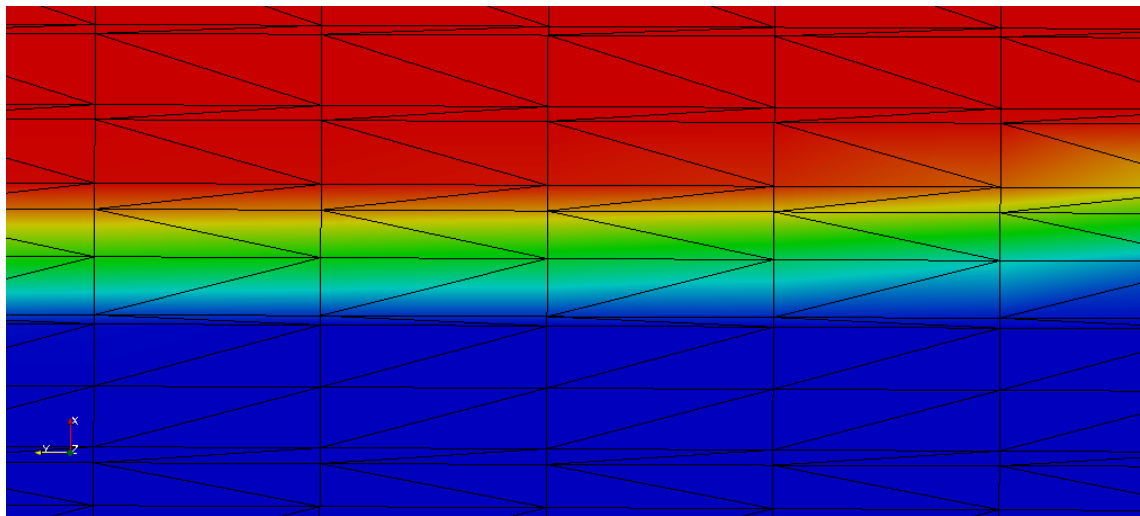


(b) Corte da malha com zoom

Figura 4.11: Corte da malha no plano xy em $t = 3.600s$.



(a) Corte da malha



(b) Corte da malha com zoom

Figura 4.12: Corte da malha no plano xy em $t = 5.400s$.

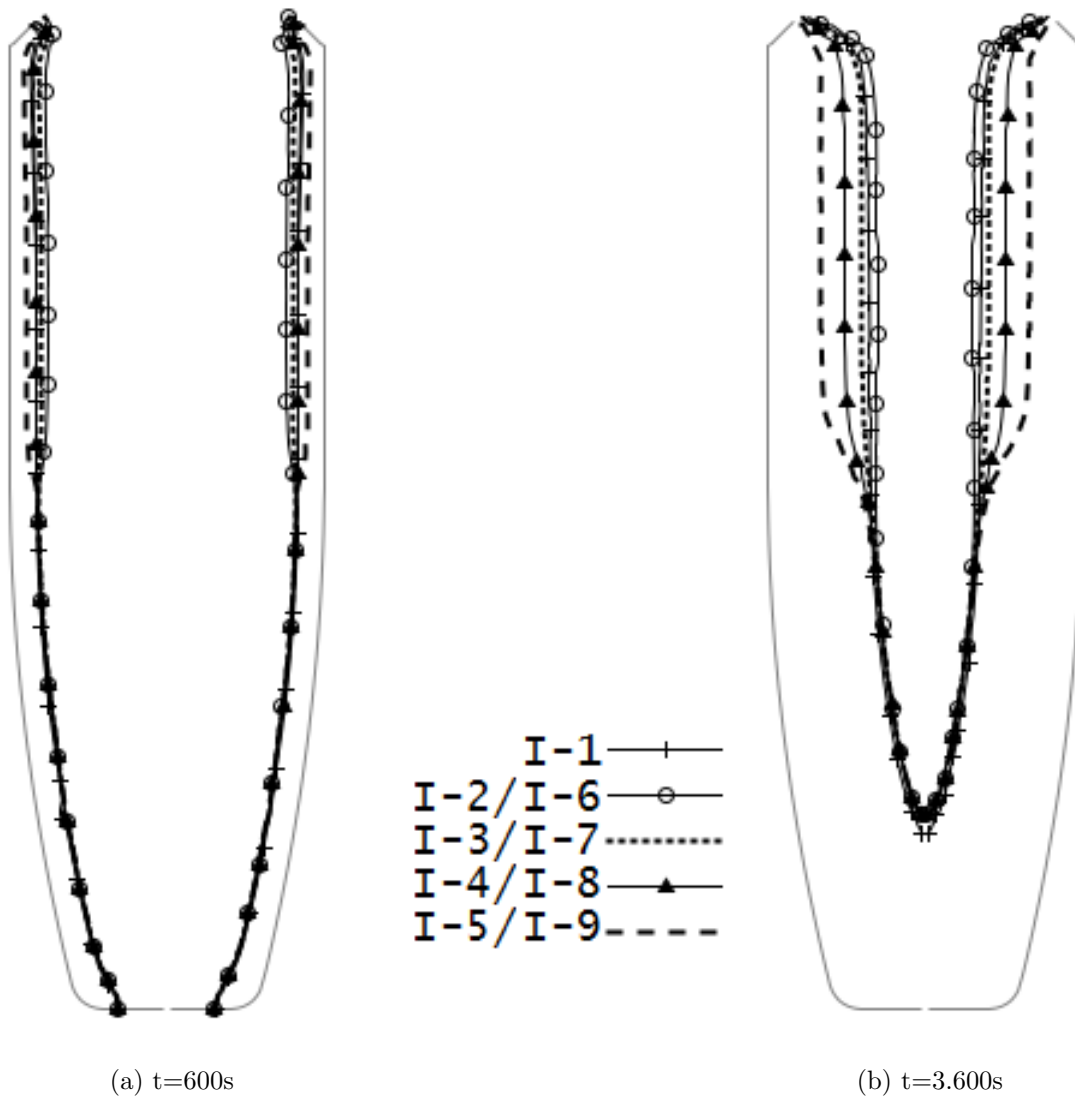


Figura 4.13: Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) nas condições I-1 a I-9 em (a) $t = 600s$ e (b) $t = 3.600s$.

processo pode levar a um resfriamento mais rápido do que se a granada resfriasse naturalmente.

Outro fenômeno sutil que pode ser observado principalmente na Figura 4.13a, mas que também ocorre na 4.13b, é um avanço da parte superior da curva do par de casos I-2 e I-6 em relação à parte inferior, que não recebe ventilação forçada. Desse fato é possível concluir que um aquecimento pouco intenso na parte superior leva à rápida solidificação da região, o que pode gerar falhas no núcleo da massa.

Não obstante, no perfil das curvas dos casos I-4 e I-8 na Figura 4.13a e I-5 e I-9 nas Figuras 4.13a e 4.13b, a transição entre a área sob ventilação forçada, superior, e a inferior, sob convecção natural apenas, também não seja tão suave quanto a da curva dos casos I-3 e I-7 ou a do caso I-1, o formato caliciforme das primeiras pode facilitar a flutuação de possíveis bolhas e o recompletamento do conteúdo com explosivo fundido, o que reduziria a formação de vazios e possibilitaria a solidificação do material de uma maneira mais paulatina.

Entre as figuras 4.14a e 4.14b não são observadas diferenças entre as curvas dos casos I-2 e I-6, embora os contornos laterais deste último já estejam sob convecção natural apenas (Tabela 3.14). Nota-se, contudo, que a razão entre o diâmetro da cavidade e o seu comprimento nas diferentes situações de resfriamento, \mathcal{D}_{sl}/Z_{sl} , é bem pequena. Sulcos em que se verifica tal comportamento, como nos casos I-1, I-2 e I-6, podem constituir mais uma causa para o aprisionamento de bolhas.

De maneira semelhante ao instante analisado anteriormente, também não são perceptíveis diferenças entre as curvas I-2 e I-6. Já na análise da transição dessas curvas e das curvas relativas ao caso I-1 entre as Figuras 4.14 e 4.15, percebe-se que, em um curto intervalo de tempo, ocorre uma mudança radical no comprimento da cavidade central, o que se crê que contribua para a retenção de bolhas e para o surgimento de trincas e tensões residuais.

A comparação entre os casos I-4 e I-8 nas Figuras 4.16a e 4.16b conduz à observação de sensível discrepância entre os perfis da frente. O primeiro caso apresenta uma solidificação mais paulatina, ao passo que o perfil do segundo traz uma razão \mathcal{D}_{sl}/Z_{sl} que colabora com o recompletamento de explosivo e a redução do percentual de vazios. É válido notar que o mesmo perfil encontrado para o caso I-8 no instante $t = 8.500s$ ocorre no caso I-4 em $t = 10.000s$, como se vê na Figura 4.17a, de modo que o que diferencia esses casos é o tempo que levaram para atingirem esses formatos, o que, conforme comentado anteriormente, pode influenciar no aparecimento de vazios ou tensões residuais.

A comparação dos casos I-5 e I-9 em $t = 10.000s$ mostra que o perfil neste último apresenta uma razão \mathcal{D}_{sl}/Z_{sl} pequena.

Por fim, em $t = 13.650s$ (Figura 4.18), o perfil do caso I-5 continua apresentando uma razão \mathcal{D}_{sl}/Z_{sl} propícia para a saída de bolhas, no entanto a solidificação com-

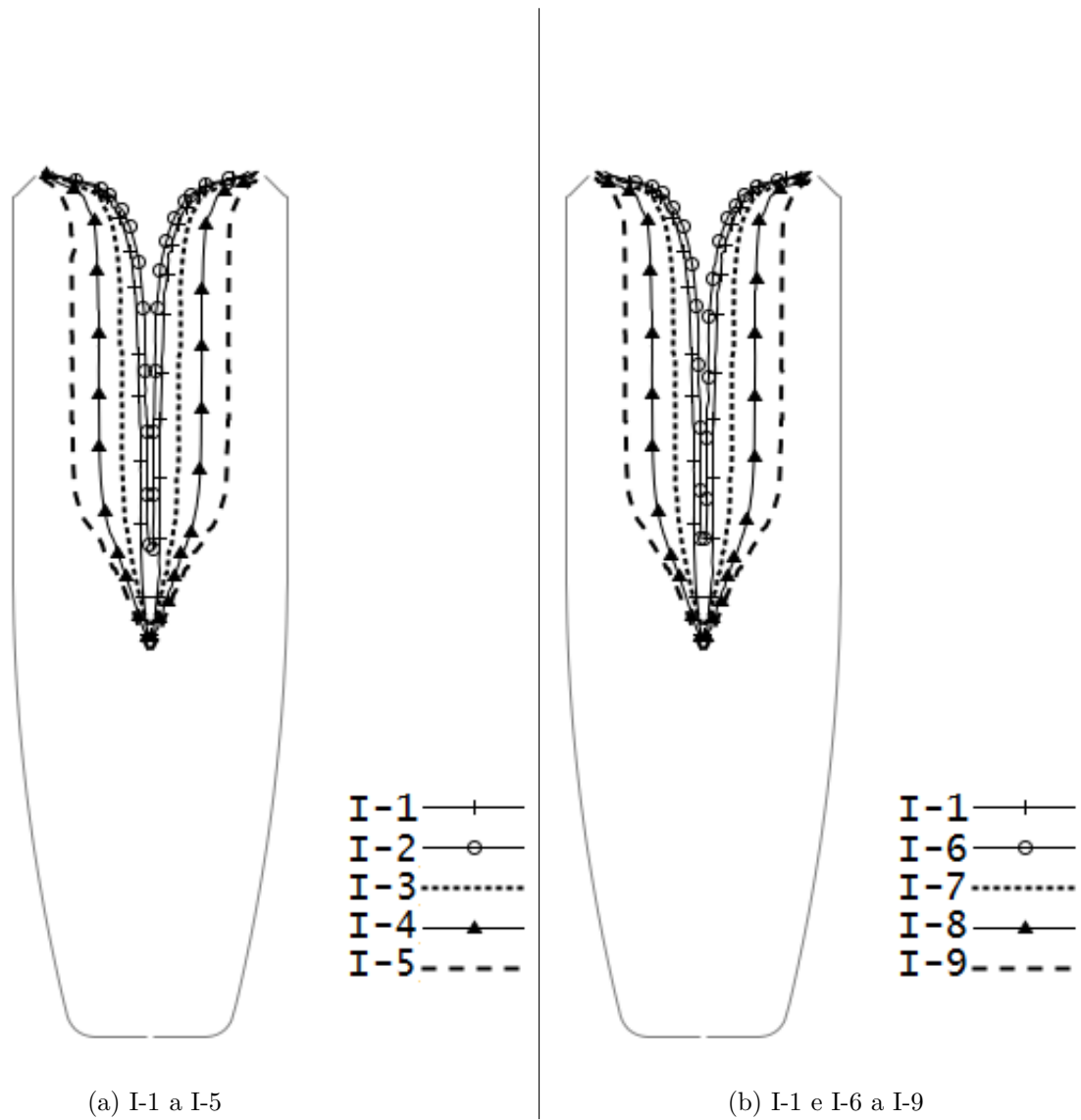


Figura 4.14: Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t=5.400s$ nos casos (a) I-1 a I-5 e (b) I-1 e I-6 a I-9.

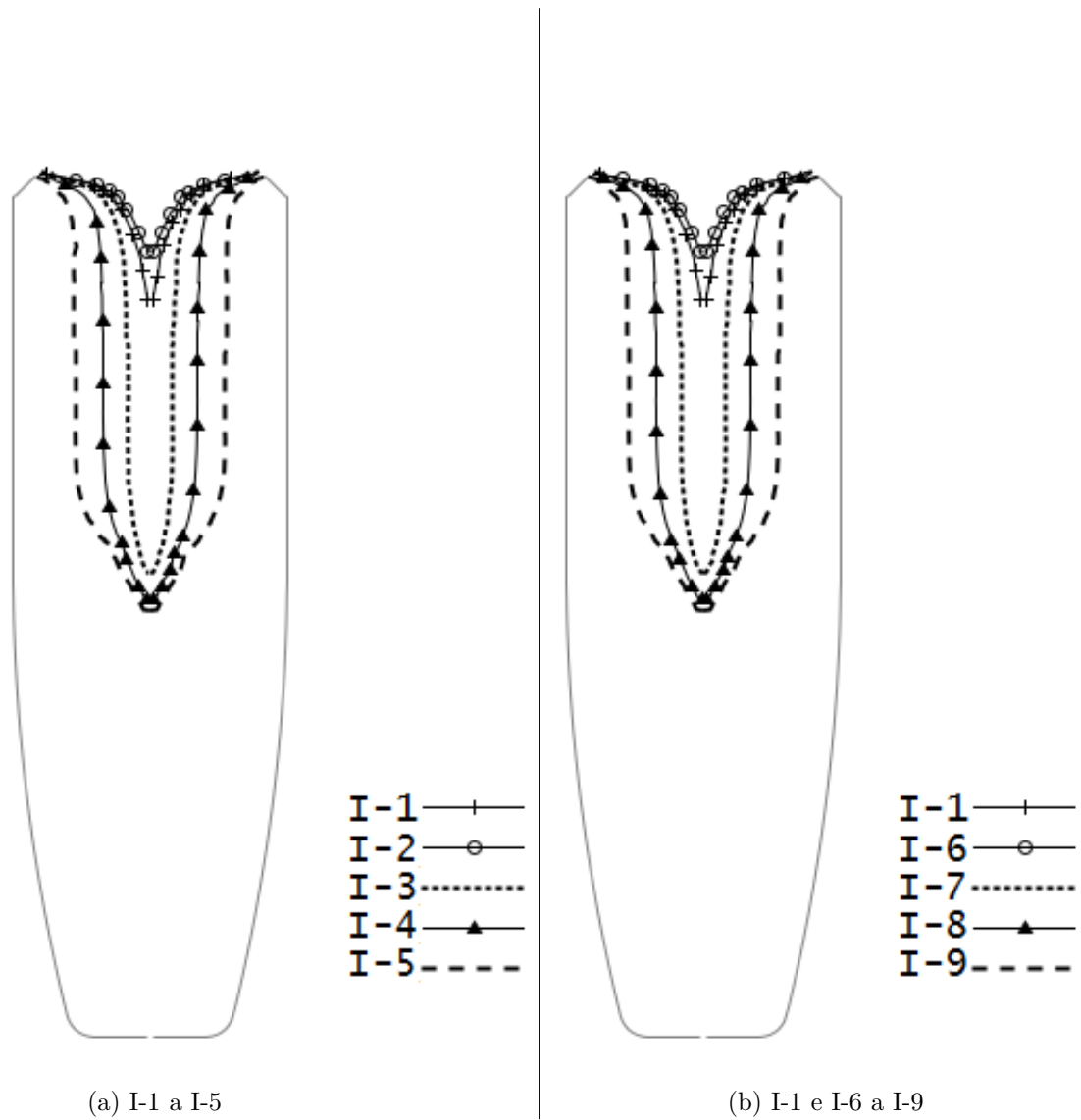


Figura 4.15: Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t=5.800s$ nos casos (a) I-1 a I-5 e (b) I-1 e I-6 a I-9.

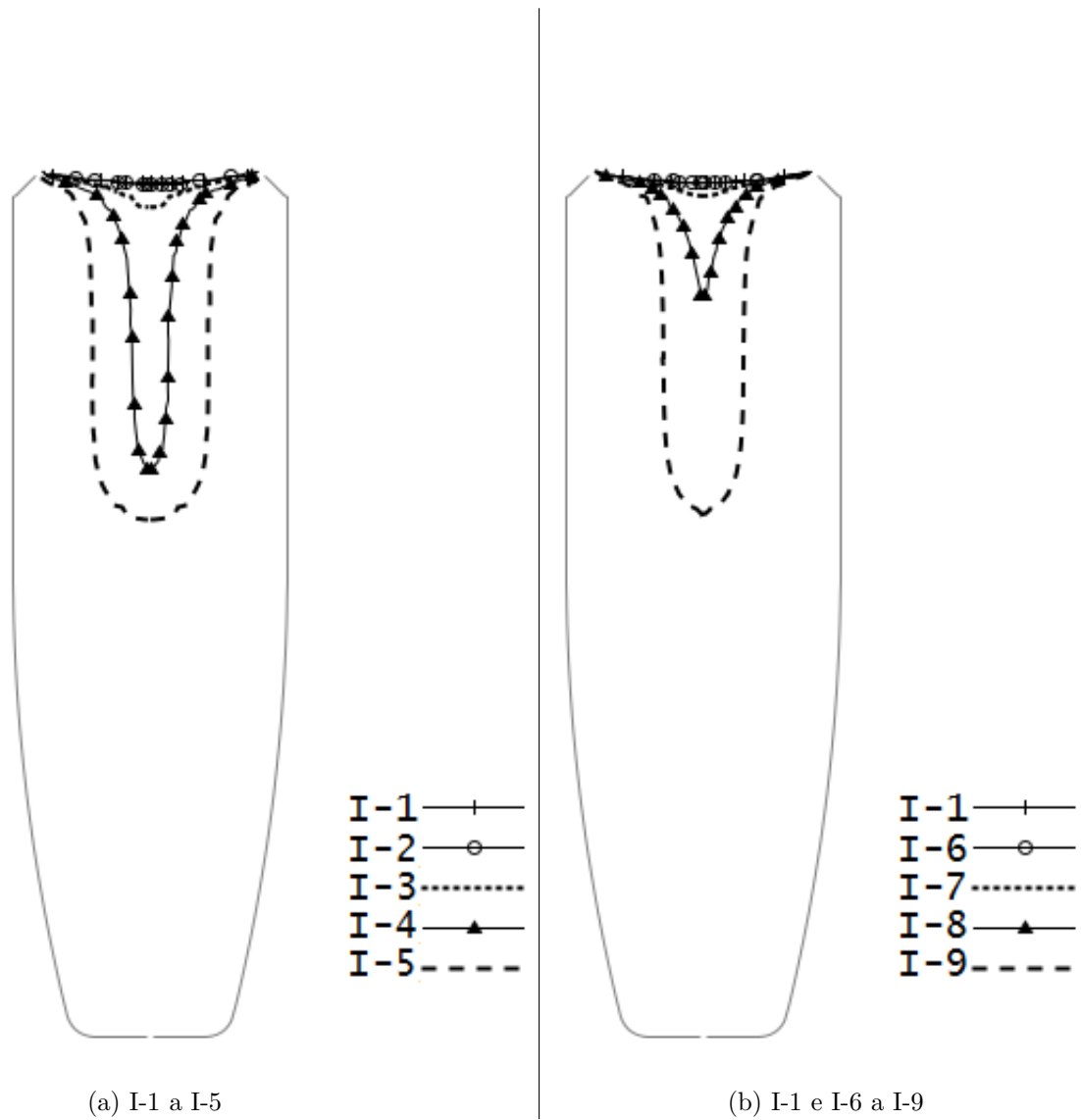


Figura 4.16: Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t=8.500s$ nos casos (a) I-1 a I-5 e (b) I-1 e I-6 a I-9.

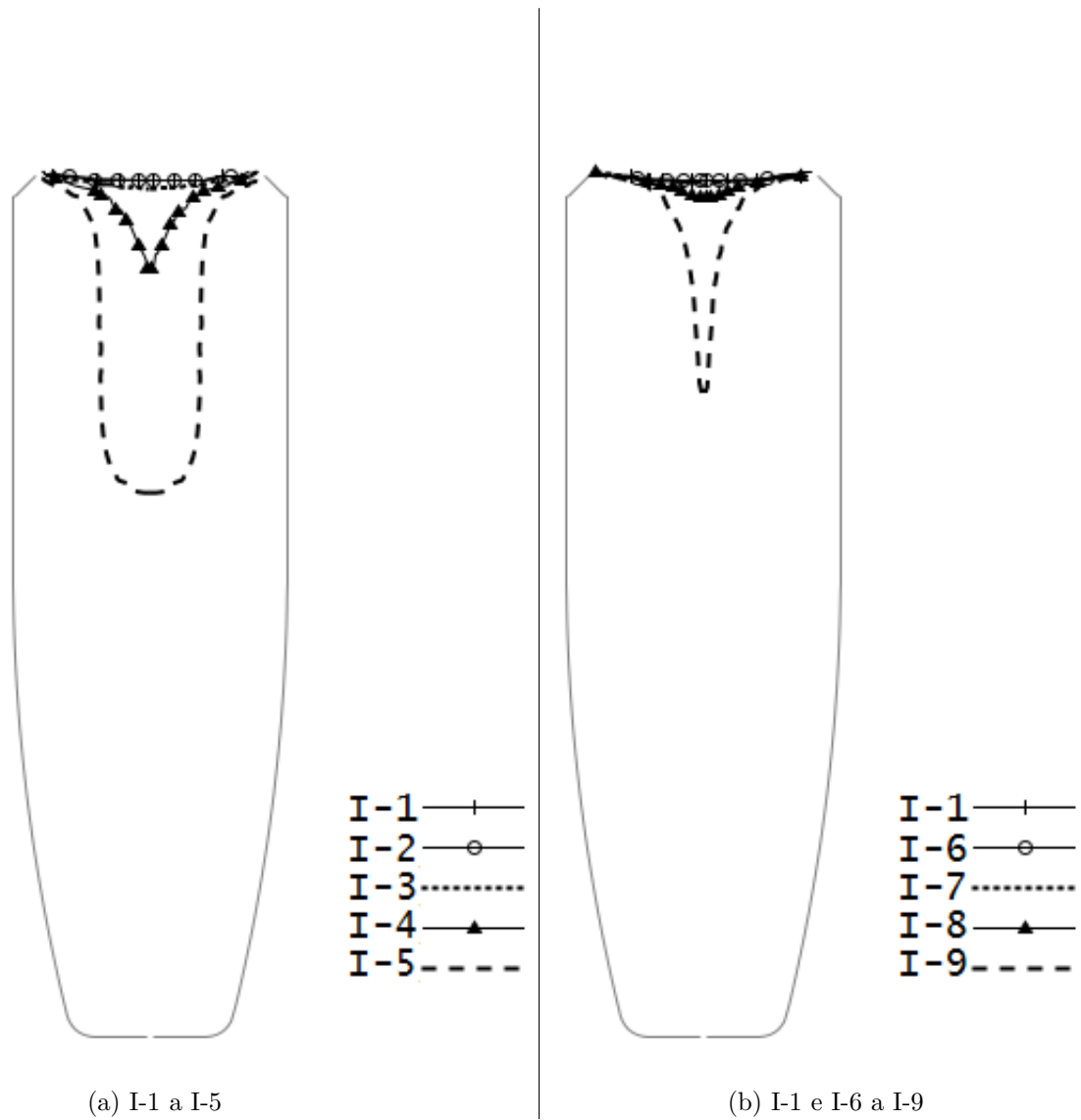


Figura 4.17: Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 10.000s$ nos casos (a) I-1 a I-5 e (b) I-1 e I-6 a 9.

pleta se dará em torno de 20.000s, isto é, em mais de 5,5 horas, o que pode ser um tempo demasiado para uma grande produção industrial.

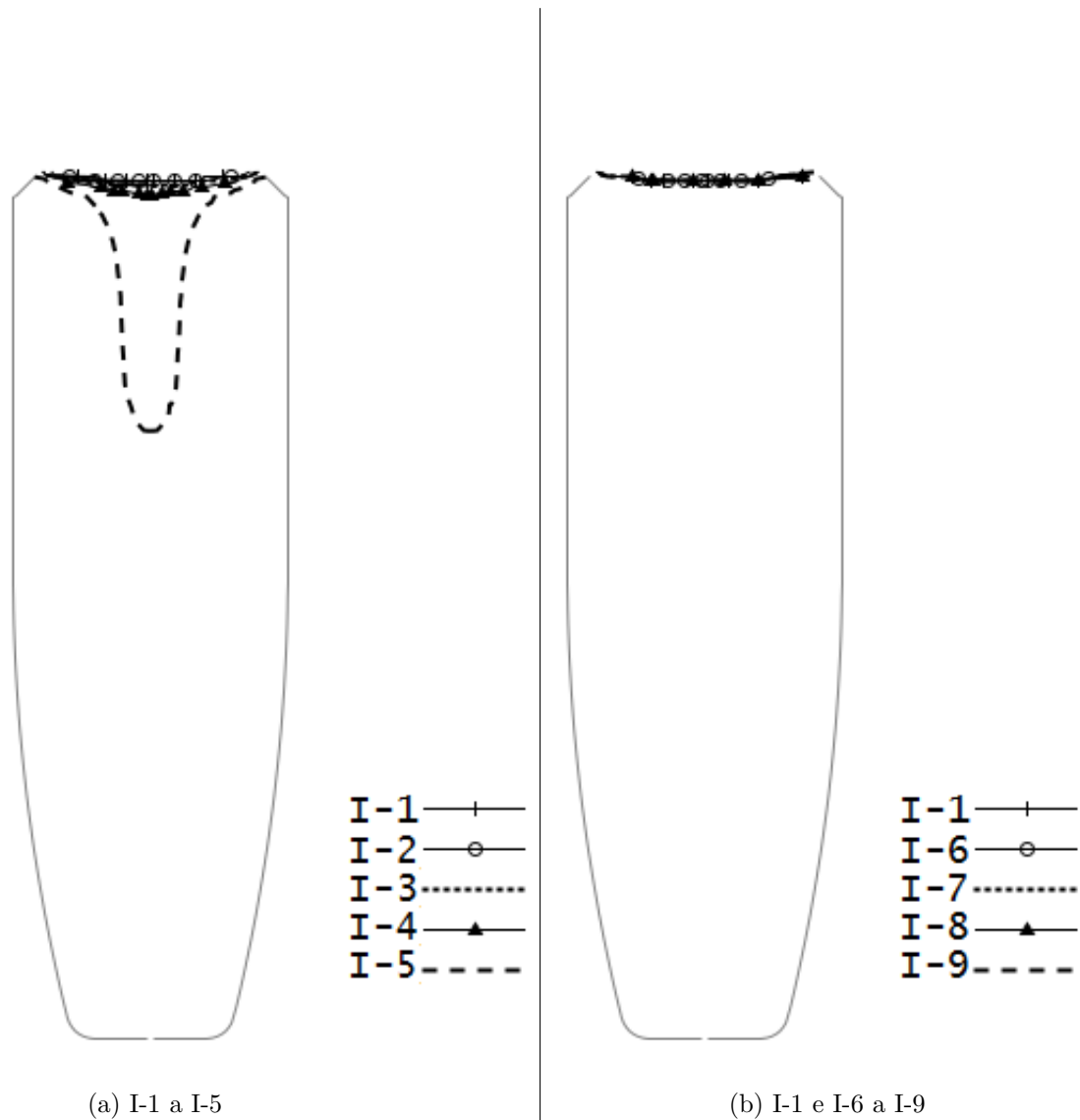


Figura 4.18: Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 13.650s$ nos casos (a) I-1 a I-5 e (b) I-1 e I-6 a I-9.

Assim, a análise das simulações computacionais para os casos I-1 a I-9 sugere que as melhores condições de resfriamento para se ter uma boa qualidade no explosivo solidificado sem etapa de retrabalho estariam entre as condições I-3 e I-8, de jato de ar a 333,15K até o final da solidificação ou ao menos até um momento em que boa parte do material já esteja sólido. Um confronto mais minucioso é requerido, no que diz respeito a experimentos reais, para se concluir a situação mais desejada entre ambas. Outras análises, contudo, no que diz respeito a custos de produção relativos aos diferentes procedimentos, como manter o aquecimento por mais tempo ou retrabalhar a parte superior da massa com barras de refusão, podem ser inseridas no contexto da seleção do melhor processo.

A evolução da frente de solidificação da Composição B nos casos II-1 a II-9, por sua vez, pode ser acompanhada nas Figuras 4.19, 4.20, 4.21, 4.22, 4.23 e 4.24, nos instantes $t = 600, 3.600, 5.400, 5.800, 8.500, 10.000$ e 13.650 s.

É facilmente perceptível a semelhança entre os panoramas do TNT e da Composição B no instante $t = 600$ s, como se pode comparar nas Figuras 4.13a e 4.19a, cabendo a ambos as mesmas observações.

Em $t = 3.600$ s, as diferenças qualitativas entre as frentes dos dois explosivos encontram-se nos perfis das curvas II-2/II-6, correspondentes ao jato a 313,15K. Nas curvas relativas à Composição B, não ocorre pronunciamento da parte superior da curva sobre a inferior; em contrapartida, observa-se nelas o perfil mais fino do fundo dos rechupes em todas as situações de resfriamento, o que propicia alguns dos defeitos supracitados: formação de vazios e trincas. Com isso, conclui-se, com base nas simulações, que os processos II-1, II-2 e II-6, e mesmo os processos II-3 e II-7, não são indicados, uma vez que todo o perfil, nesses casos, é delgado.

Os perfis dos pares de casos II-4 e II-8 e II-5 e II-9 em $t = 5.400$ s, mostrados nas Figuras 4.20a e 4.20b, são bastante parecidos, não obstante já se note sutis diferenças nos diâmetros das cavidades devido ao desligamento dos jatos de ar nas simulações da figura à direita (Tabela 3.15).

Diferenças pouco mais expressivas aparecem entre os pares II-4 e II-8 e II-5 e II-9 em $t = 5.800$ s, Figuras 4.21a e 4.21b, quando é possível observar variação na razão \mathcal{D}_{sl}/Z_{sl} . Entretanto, ainda não é aparente o comprometimento na qualidade do sólido.

No instante $t = 8.500$ s, Figura 4.22, nota-se a solidificação bem mais gradual nos casos em que a ventilação forçada é mantida, II-4 e II-5, em relação aos casos II-8 e II-9, o que provavelmente contribui para um índice menor de tensões residuais nos primeiros.

Na Figura 4.23b, vê-se que, em $t = 10.000$ s, a solidificação já se completou até para o caso II-9, enquanto pouca evolução houve nos casos II-4 e II-5 em relação ao instante $t = 8.500$ s. Assim como já discutido para o caso do TNT, análises com experimentos reais seriam necessários para constatar os efeitos de um resfriamento mais rápido, como nos casos II-8 e II-9, na qualidade do sólido final.

Finalmente, na Figura 4.24a, percebe-se que ainda há bastante material fundido no domínio nos casos II-4 e II-5, o que acaba levando a uma solidificação completa de mais de 5,5 horas, como no caso do TNT, sendo, analogamente, importantes estudos de custo das diferentes etapas para concluir a situação de resfriamento mais viável, dando-se preferência, com base nas simulações, às condições impostas nos casos II-4, II-5, II-8 e II-9, correspondentes aos resfriamentos com ventilação forçada a 333,15 ou 343,15K.

As simulações com os dados do TNT levaram, em média, 6 horas, ao passo que

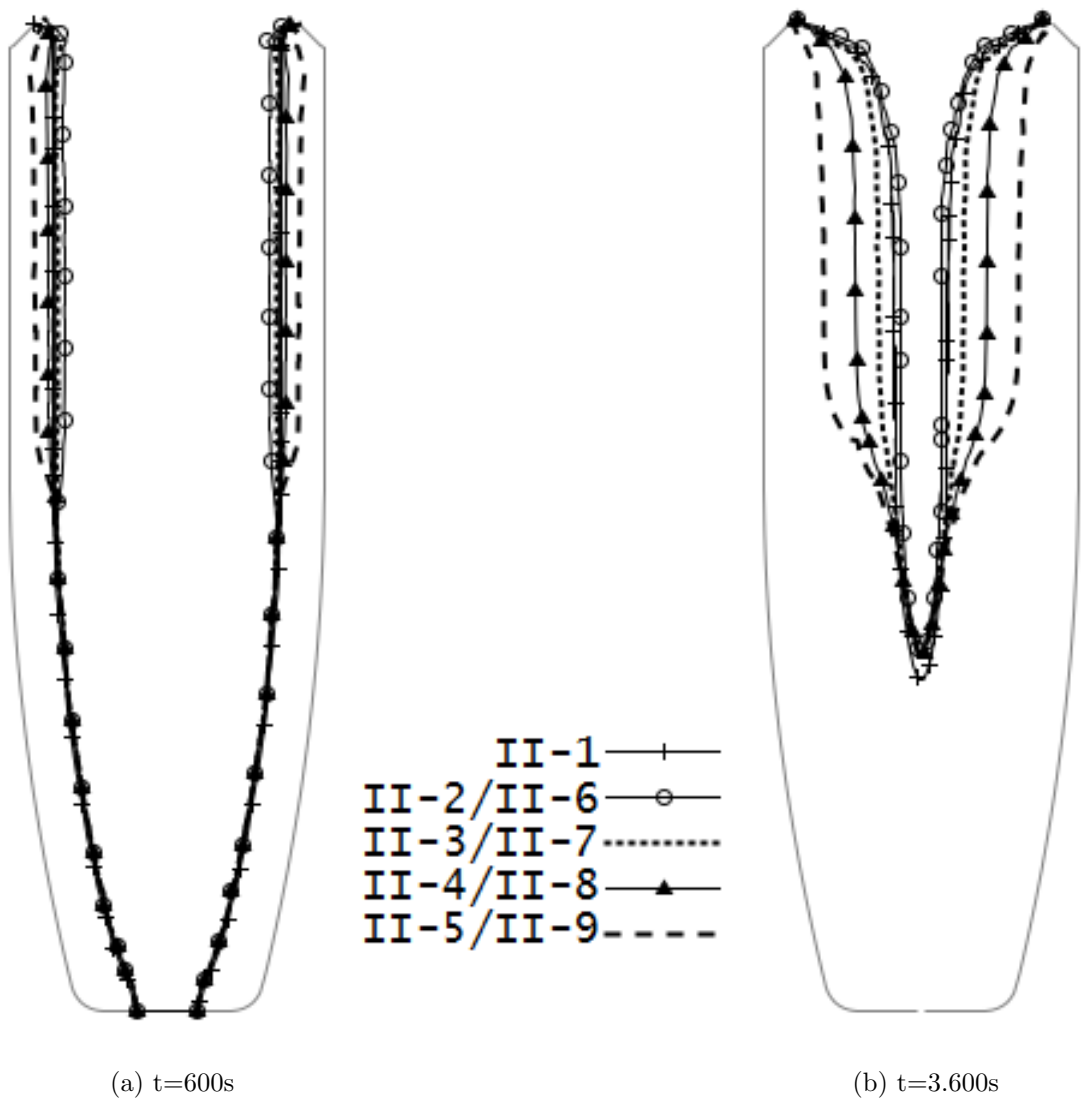


Figura 4.19: Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) nos casos II-1 a II-9 nos instantes (a) $t = 600s$ e (b) $t = 3.600s$.

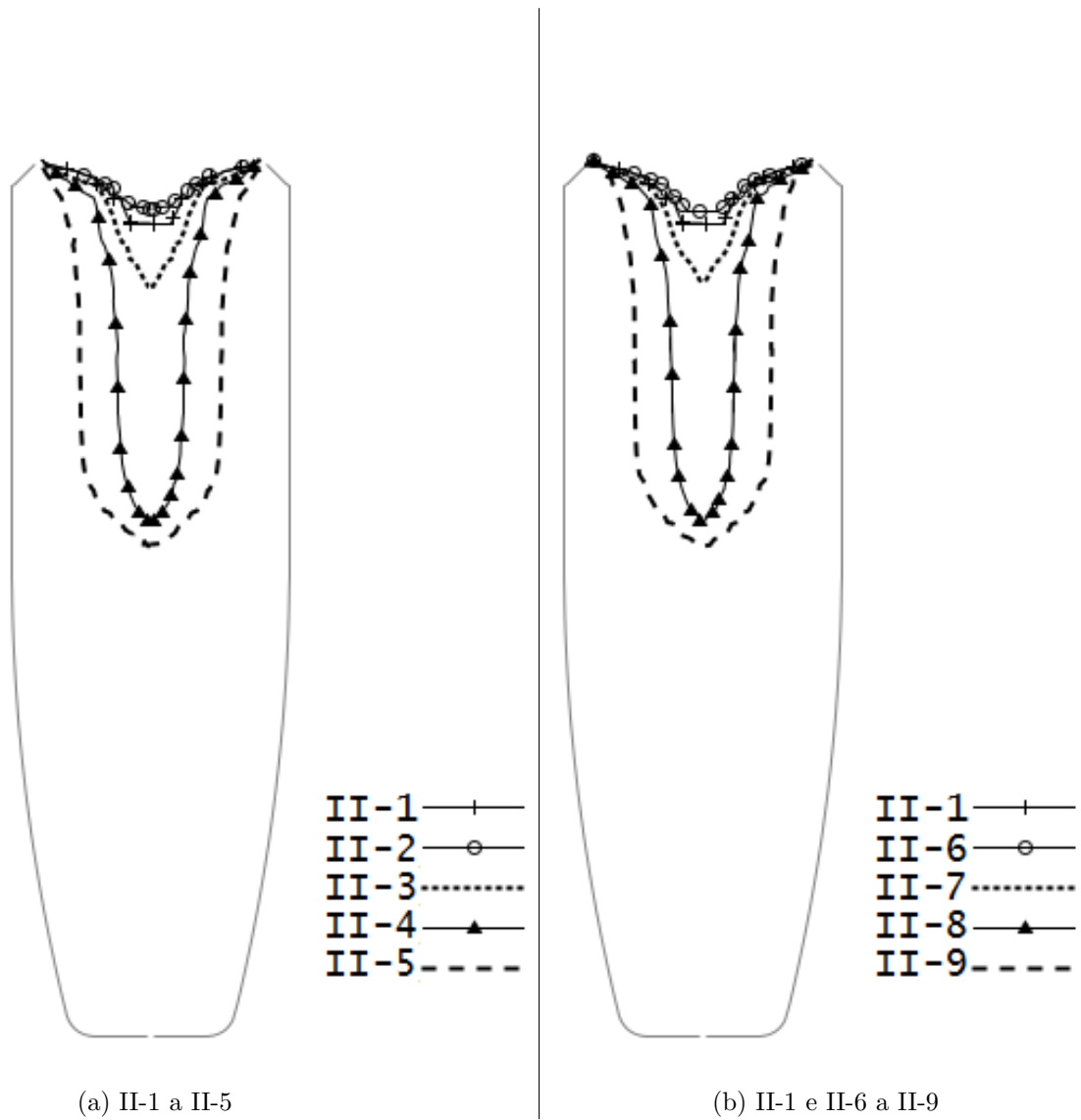


Figura 4.20: Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 5.400s$ nos casos (a) II-1 a II-5 e (b) II-1 e II-6 a 9.

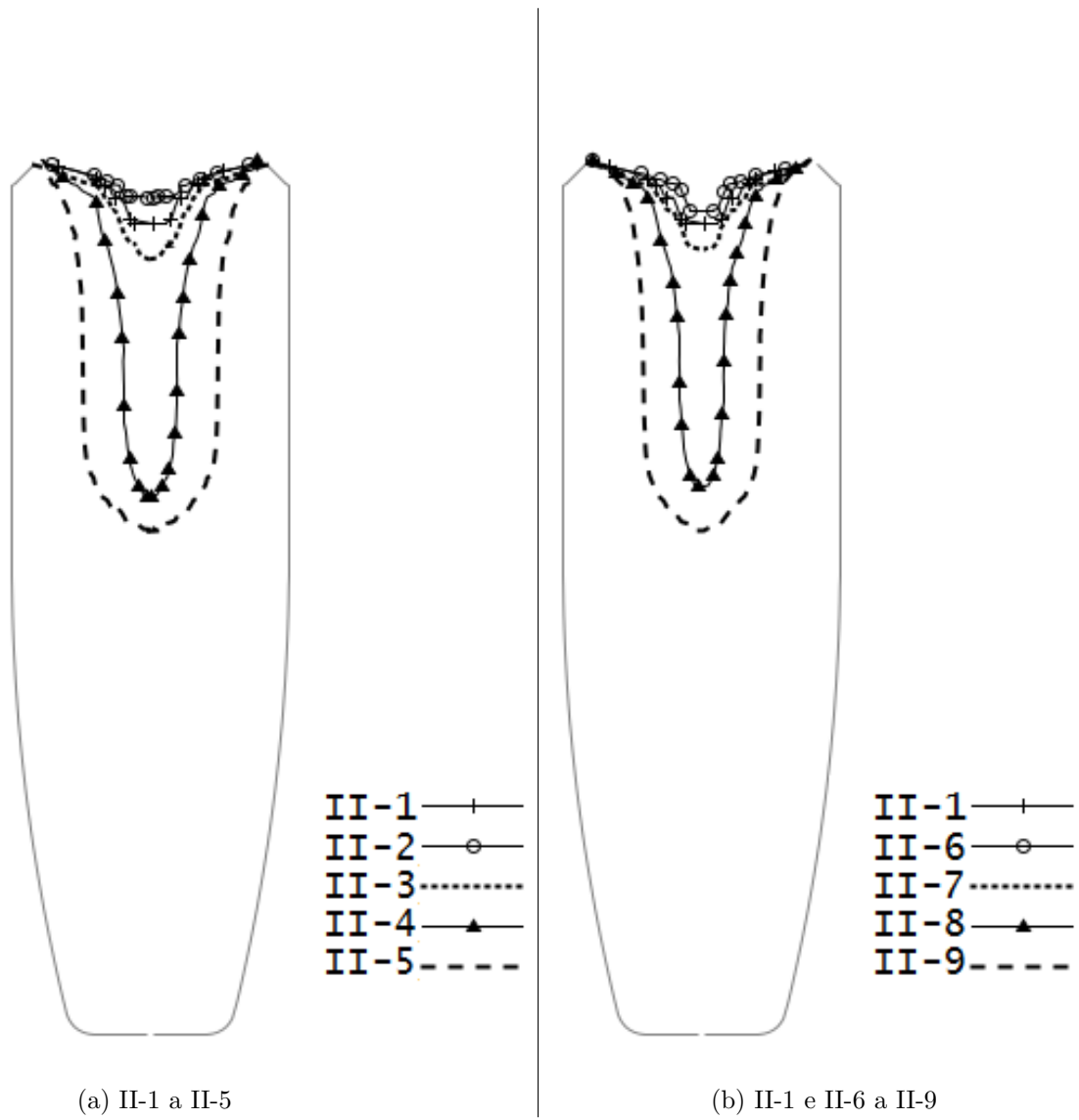


Figura 4.21: Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 5.800s$ nos casos (a) II-1 a II-5 e (b) II-1 e II-6 a II-9.

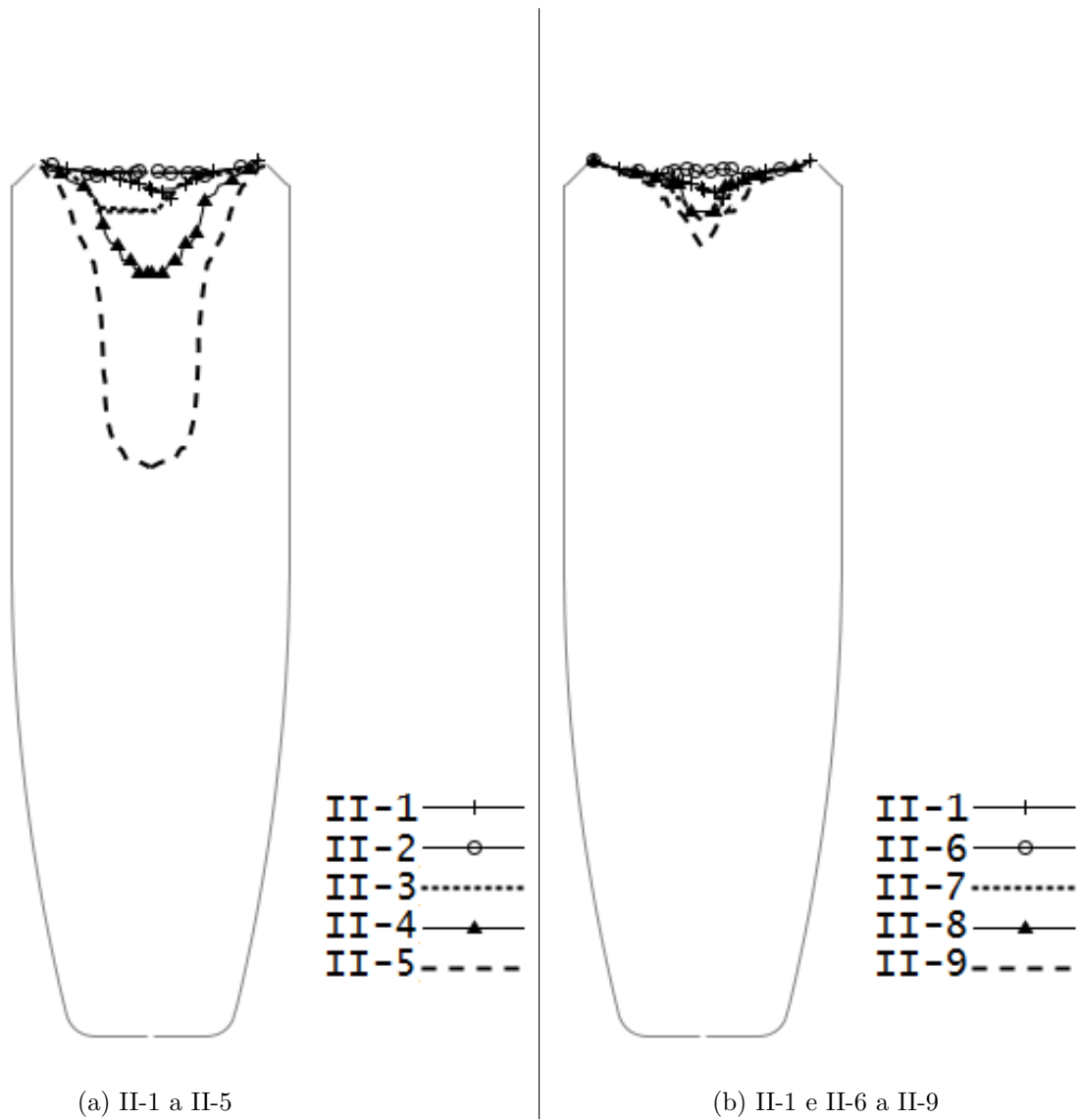


Figura 4.22: Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 8.500s$ nos casos (a) II-1 a II-5 e (b) II-1 e II-6 a II-9.

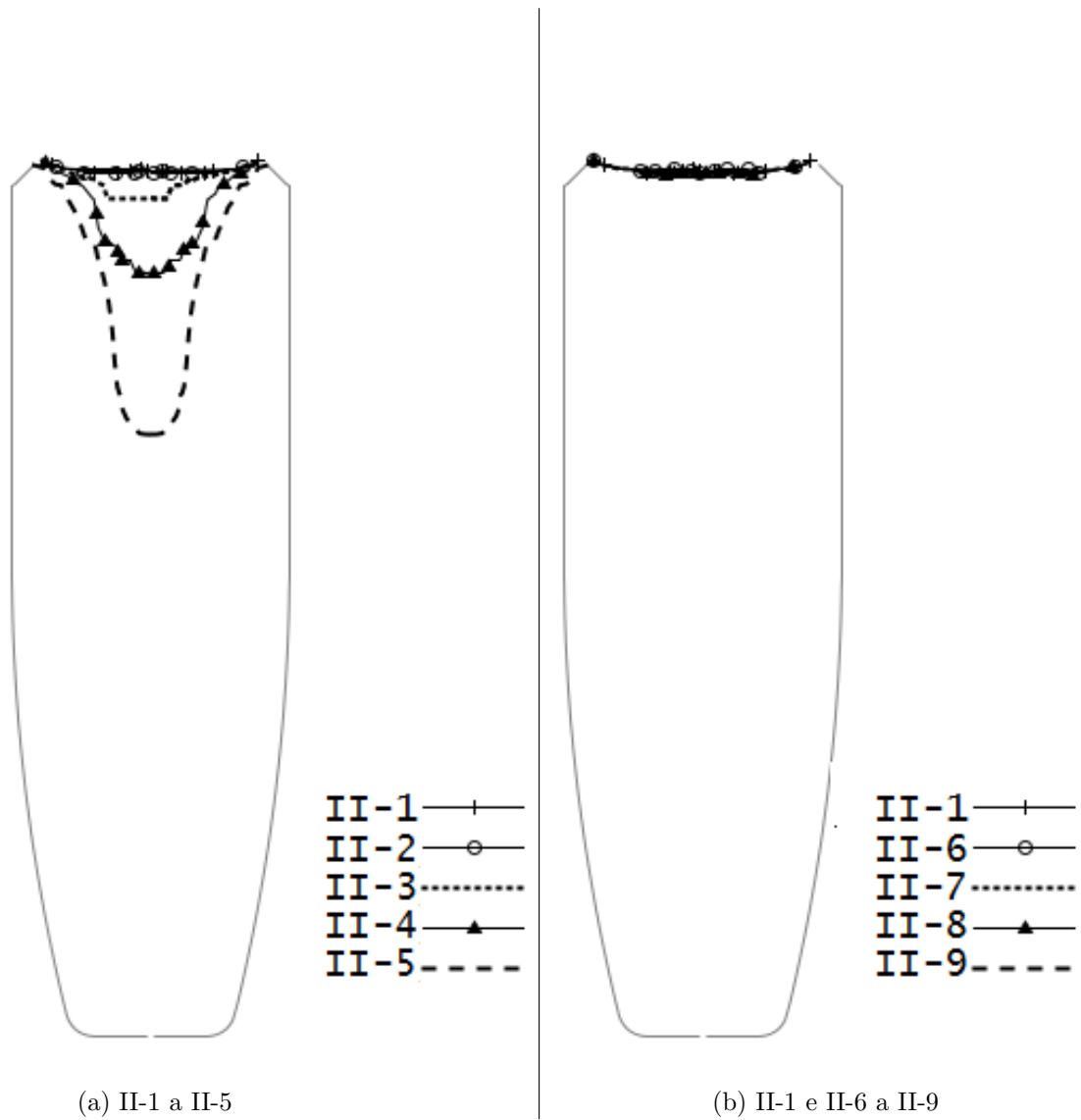


Figura 4.23: Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 10.000s$ nos casos (a) II-1 a II-5 e (b) II-1 e II-6 a II-9.

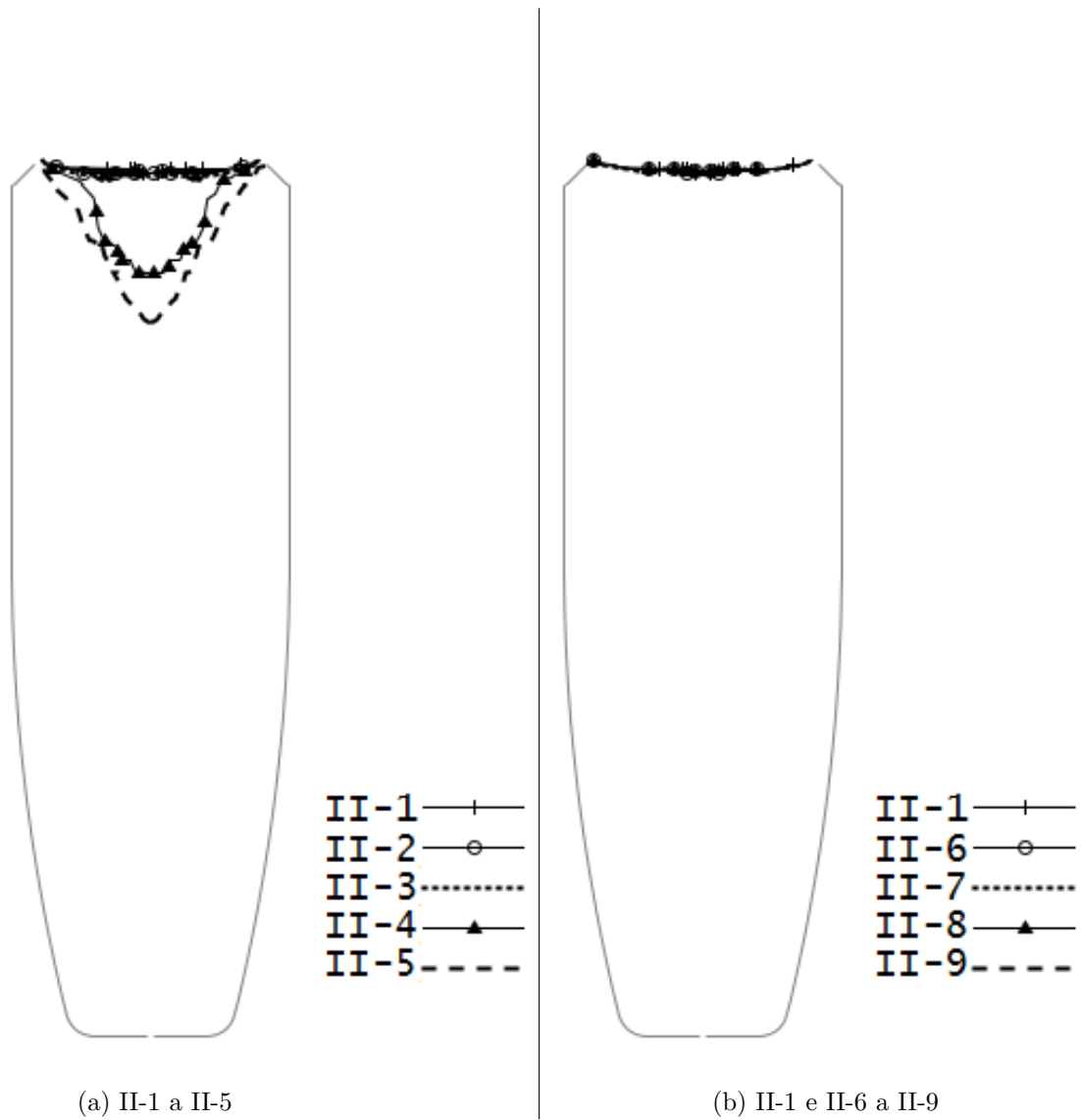


Figura 4.24: Frente de solidificação ($r_l = 0,5$) em $t = 13.650s$ nos casos (a) II-1 a II-5 e (b) II-1 e II-6 a II-9.

as com os dados da Composição B levaram, em média, 120 horas.

Capítulo 5

Conclusão e sugestões

As simulações procedidas neste trabalho mostraram um bom nível de confiabilidade dos *solvers* pré-existentes no *OpenFOAM* no que diz respeito ao tratamento de problemas de fusão/solidificação, embora tenha havido uma pequena perturbação na simulação da Composição B, que não comprometeu o comportamento qualitativamente esperado das frentes de solidificação nem a seleção preliminar de casos mais prováveis de obtenção de massas sólidas com minimização de defeitos.

Mediante a análise dos resultados das simulações, as melhores condições de resfriamento no processo de carregamento da granada de morteiro 81mm com α -TNT envolvem uma convecção forçada a 333, 15K na parte superior da granada, enquanto, com os dados da Composição B-2, destacaram-se os casos com convecção forçada a 333, 15 e a 343, 15K. Os perfis dessas frentes de solidificação se mostraram suaves, sem transformações abruptas em pequenos intervalos de tempo e com boa relação diâmetro-comprimento da cavidade formada pelo rechupe, fatores que contribuem para um menos expressivo aprisionamento de possíveis bolhas entranhadas na massa, para um recompletamento mais efetivo de explosivo fundido e para uma menor retenção de tensões residuais.

Ressalta-se que, em muitos casos, soluções abertas, disponíveis a todos, são não apenas mais economicamente viáveis como também possibilitam o questionamento dos códigos e seu aprimoramento, tendo-se como aliada ampla comunidade científica.

Sugestões de continuidade deste trabalho pairam em algumas ramificações imediatas:

- realização de experimentos reais para validação do método aqui empregado, de modo a aumentar a confiabilidade para o emprego do mesmo com outros explosivos e geometrias;
- simulação computacional de condições de resfriamento de natureza diversa à ventilação forçada, como a imposição de um banho ou a rotação do molde;

- consideração da parede do corpo da granada na transferência de calor entre a cavidade interna e o ambiente externo; e
- utilização da técnica de *Volume of Fluid*, conhecida como *VOF*, para resolver o problema conjugado de transferência de calor, seja para a consideração da presença de ar na massa explosiva na forma de bolhas ou para o acompanhamento da interface ar-fluido ao longo do processo. Neste último caso, assumiria-se uma quantidade finita de material, que continuaria sendo suficiente para recompletar o molde durante a solidificação mas formaria o perfil do rechupe desejavelmente no aumentador.

Referências Bibliográficas

- [1] BRENT, A. D., VOLLER, V. R., REID, K. J., et al. “Enthalpy-porosity technique for modeling convection-diffusion phase change: application to the melting of a pure metal”, *Numerical Heat Transfer: An International Journal of Computation and Methodology*, v. 13:3, pp. 297–318, 1988.
- [2] GAU, C., VISKANTA, R. “Melting and Solidification of a Pure Metal on a Vertical Wall”, *Journal of Heat Transfer*, v. 108, n. 1, pp. 174, 1986.
- [3] VERSTEEG, H. K., MALALASEKERA, W. “An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method”. 1995.
- [4] VOLLER, V. R., BRENT, A. D., PRAKASH, C. “The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 32, n. 9, pp. 1719–1731, 1989.
- [5] ALEXIADES, V., SOLOMON, A. D. *Mathematical modeling of melting and freezing processes*, v. 251. Taylor & Francis, 1993. ISBN: 1560321253.
- [6] SUN, D., GARIMELLA, S. V. “Numerical and Experimental Investigation of Solidification Shrinkage”, *Numer. Heat Transfer, Part A*, v. 52, n. 2, pp. 145–162, 2007. ISSN: 1040-7782. doi: 10.1080/10407780601115079.
- [7] MUDRYYY, R., JIA, S., NASTAC, L. “Recent advances on the solidification processing of cast energetic materials”. In: *TMS*, pp. 67–74, 2014.
- [8] INCROPERA, F. P., DEWITT, D. P. *Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa*. 5 ed. Rio de Janeiro, RJ, Brasil, LTC, 2002. ISBN: 85-216-1378-4.
- [9] USARMY. *Military Explosives TM 9-1300-214*. Department of the Army Technical Manual, 1984.
- [10] URBANSKI, T. *Chemistry and technology of explosives, Vol. 3*. Warszawa, Polish Scientific Publishers, 1967. ISBN: 0080262066.

- [11] Gibbs, T. R., Popolato, A. (Eds.). *Los Alamos Scientific Laboratory Series on Dynamic Material Properties, Vol 4*. 1980. ISBN: 9780520040120.
- [12] GREENSHIELDS, C. J. “OpenFOAM programmer’s guide”, *OpenFOAM Foundation Ltd.*, , n. December, pp. 100, 2015.
- [13] “Regulamento do Departamento de Ciência e Tecnologia (R-55)”. .
- [14] TUCKER, S. *Almanac of American Military History*. ABC-CLIO, 1937.
- [15] MADER, C. L. *Numerical Modeling of Explosives and Propellants*. Third ed. Boca Raton, FL, CRC Press, 2008. ISBN: 978-1-4200-5238-1.
- [16] GREENSHIELDS, C. J. *OpenFOAM User Guide*. N. December. 2015.
- [17] CARSLAW, H. S., JAEGER, J. C. *Conduction of heat in solids*. Second ed. London, Oxford University Press, 1959. ISBN: 978-0198533689.
- [18] GANESAN, S., POIRIER, D. R. “Conservation of mass and momentum for the flow of interdendritic liquid during solidification”, *Metallurgical Transactions B*, v. 21, n. 1, pp. 173–181, 1990.
- [19] TROVANT, M., ARGYROPOULOS, S. A. “Mathematical modeling and experimental measurements of shrinkage in the casting of metals”, *Science*, v. 35, n. 1, pp. 75–84, 1996.
- [20] VOLLER, V. R., PRAKASH, C. “A fixed grid numerical modelling methodology for convection diffusion mushy region phase change problems”, *International Journal of Heat Mass Transfer*, v. 30, n. 8, 1987.
- [21] PATANKAR, S. V. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1980. ISBN: 0891165223.
- [22] “PHOENICS”. Disponível em: <<http://www.cham.co.uk/phoenics.php>(acessadaem16/07/2017)>.
- [23] RAESSI, M., MOSTAGHIMI, J. “Three-dimensional modeling of density variation due to phase change in complex free surface flows”, *Numer. Heat Transfer, Part B*, v. 47, n. November 2015, pp. 507–531, 2005.
- [24] KOTHE, D. B., MJOLSNESS, R. C., TORREY, M. D. *RIPPLE: A Computer Program for Incompressible Flows with Free Surfaces*. Relatório Técnico 1991, Los Alamos National Laboratory, New Mexico.

- [25] KASCHNITZ, E., HEUGENHAUSER, S., SCHUMACHER, P. “A benchmark for the validation of solidification modelling algorithms”, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, v. 84, 2015.
- [26] BOURDILLON, A., VERDIN, P., THOMPSON, C. “Numerical simulations of water freezing processes in cavities and cylindrical enclosures”, *Applied Thermal Engineering*, v. 75, pp. 839–855, 2015.
- [27] “ANSYS FLUENT”. Disponível em: <<http://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/th/main{ }pre.htm>(acessadaem16/07/2017)>.
- [28] “ANSYS MECHANICAL”. Disponível em: <<http://www.ansys.com/products/structures/ansys-mechanical-enterprise>(acessadaem16/07/2017)>.
- [29] “NOVAFLOW&SOLID”. Disponível em: <<https://www.novacast.se/product/novafloflowsolid/>(acessadaem16/07/2017)>.
- [30] “ProCast”. Disponível em: <<https://www.esi-group.com/pt/solucoes-de-software/fabricacao-virtual/fundicao/procast-quickcast>(acessadoem16/07/2017)>.
- [31] PINTO, J. C. P., LAGE, P. L. D. C. *Métodos Numéricos em Problemas de Engenharia Química*. Rio de Janeiro, RJ, Brasil, e-papers, 2001. ISBN: 8587922114.
- [32] BRENNEN, C. “Fundamentals of Multiphase Flows”, *Cambridge University Press*, v. 128, pp. 368, 2005.
- [33] DREW, D. A., PASSMAN, S. L. *Theory of multicomponent fluids*, v. 135. Springer- Verlag New York, Inc., 1999. ISBN: 0387226370.
- [34] NIELD, D. A., BEJAN, A. *Convection in porous media*. 3 ed. New York, USA, Springer Science+Business Media, Inc., 2006. ISBN: 0387290966.
- [35] WHITAKER, S. “Flow in porous media I: A theoretical derivation of Darcy’s law”, *Transport in Porous Media*, v. 1, n. 1, pp. 3–25, 1986.
- [36] VOLLER, V. R., CROSS, M., MARKATOS, N. C. “An Enthalpy Method for Convection/Diffusion Phase Change”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 24, pp. 271–284, 1987.

- [37] SMITH, J. M., VAN NESS, H. C., ABBOTT, M. M. *Introdução à termodinâmica da engenharia química*. 7a ed. Rio de Janeiro, RJ, Brasil, LTC, 2007. ISBN: 978-85-216-1553-8.
- [38] SWAMINATHAN, C. R., VOLLER, V. R. “A General Enthalpy Method for Modeling Solidification Processes”, *Metallurgical Transactions B*, v. 23, pp. 651–664, 1992.
- [39] YEOH, G. H., TU, J. *Computational Techniques for Multiphase Flows*. 2009. ISBN: 0080914896.
- [40] “MATLAB”. Disponível em: <https://www.mathworks.com/product/matlab.html?s_tid=hp_ff_p_matlab(acessadaem16/07/2017)>.
- [41] JASAK, H. “Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows”, *Direct*, v. M, n. June, pp. 394, 1996.
- [42] FRANTZ, J. “g3data”. Disponível em: <<http://www.frantz.fi/software/g3data.php>(acessadaem16/07/2017)>.
- [43] PARRY, M. A., BILLON, H. H. “A note on the coefficient of viscosity of pure molten 2,4,6-trinitrotoluene (TNT)”, *Rheologica Acta*, v. 27, pp. 661–663, 1988.
- [44] DAY, J. C., ZEMLER, M. K., TRAUM, M. J., et al. “Laminar Natural Convection From Isothermal Vertical Cylinders: Revisiting a Classical Subject”, *Journal of Heat Transfer*, v. 135, n. 2, pp. 022505, 2013.

Apêndice A

Códigos *buoyantPimpleFoam* e *solidificationMeltingSource*

Neste apêndice constam os códigos *buoyantPimpleFoam* e *solidificationMeltingSource*, da versão 3.0.1 do *OpenFOAM*, que, conjugados, foram utilizados para realizar as simulações deste trabalho. Esses códigos são abertos e podem ser obtidos facilmente nos diretórios do pacote.

Foram ressaltadas, ao longo do texto, as linhas que compreendem as equações que são resolvidas e os termos-fonte que são adicionados. São desejáveis conhecimentos da linguagem de programação C++ e da nomenclatura empregada pelo *OpenFOAM* [16], para o que podem ser consultados o guia do usuário [16], o guia de programador [12] e a tese de JASAK [41].

A.1 O *buoyantPimpleFoam*

O algoritmo de solução das equações de conservação do *buoyantPimpleFoam* encontra-se no arquivo *buoyantPimpleFoam.C*, enquanto as equações propriamente ditas são resolvidas nesses quatro arquivos: o *rhoEqn.H*, o *UEqn.H*, o *EEqn.H* e o *pEqn.H*, chamados pelo *buoyantPimpleFoam.C*. O conteúdo de cada um desses arquivos encontra-se transcrito nas Figuras A.1 a A.7. e as tabelas A.1 e A.2 contêm, respectivamente, variáveis e funções e operações das equações que constam no código em notação matemática ou sua descrição.

Figura A.1: buoyantPimpleFoam.C (página 1 de 2).

```

1  /*-----*\
2  =====
3  \ \ / / F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4  \ \ / / O peration    |
5  \ \ / / A nd          | Copyright (C) 2011-2015 OpenFOAM Foundation
6  \ \ / / M anipulation |
7  -----*\
8  License
9  This file is part of OpenFOAM.
10
11  OpenFOAM is free software: you can redistribute it and/or modify it
12  under the terms of the GNU General Public License as published by
13  the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or
14  (at your option) any later version.
15
16  OpenFOAM is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOUT
17  ANY WARRANTY; without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or
18  FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU General Public License
19  for more details.
20
21  You should have received a copy of the GNU General Public License
22  along with OpenFOAM. If not, see <http://www.gnu.org/licenses/>.
23
24  Application
25  buoyantPimpleFoam
26
27  Description
28  Transient solver for buoyant, turbulent flow of compressible fluids for
29  ventilation and heat-transfer.
30
31  Turbulence is modelled using a run-time selectable compressible RAS or
32  LES model.
33
34  \*-----*/
35
36  #include "fvCFD.H"
37  #include "rhoThermo.H"
38  #include "turbulentFluidThermoModel.H"
39  #include "radiationModel.H"
40  #include "fvIOoptionList.H"
41  #include "pimpleControl.H"
42  #include "fixedFluxPressureFvPatchScalarField.H"
43
44  // * * * * *
45
46  int main(int argc, char *argv[])
47  {
48      #include "setRootCase.H"
49      #include "createTime.H"
50      #include "createMesh.H"
51
52      pimpleControl pimple(mesh);
53
54      #include "createFields.H"
55      #include "createMRF.H"
56      #include "createFvOptions.H"
57      #include "createRadiationModel.H"
58      #include "initContinuityErrs.H"
59      #include "createTimeControls.H"
60      #include "compressibleCourantNo.H"
61      #include "setInitialDeltaT.H"
62
63      // * * * * *
64

```

Figura A.2: buoyantPimpleFoam.C (página 2 de 2).

```

65     Info<< "\nStarting time loop\n" << endl;
66
67     while (runTime.run())
68     {
69         #include "createTimeControls.H"
70         #include "compressibleCourantNo.H"
71         #include "setDeltaT.H"
72
73         runTime++;
74
75         Info<< "Time = " << runTime.timeName() << nl << endl;
76
77         #include "rhoEqn.H"
78
79         // --- Pressure-velocity PIMPLE corrector loop
80         while (pimple.loop())
81         {
82             #include "UEqn.H"
83             #include "EEqn.H"
84
85             // --- Pressure corrector loop
86             while (pimple.correct())
87             {
88                 #include "pEqn.H"
89             }
90
91             if (pimple.turbCorr())
92             {
93                 turbulence->correct();
94             }
95         }
96
97         rho = thermo.rho();
98
99         runTime.write();
100
101         Info<< "ExecutionTime = " << runTime.elapsedCpuTime() << " s"
102             << " ClockTime = " << runTime.elapsedClockTime() << " s"
103             << nl << endl;
104     }
105
106     Info<< "End\n" << endl;
107
108     return 0;
109 }
110
111 // *****
112 // *****
113

```

Figura A.3: rhoEqn.H (página 1 de 1).

```

1  /*-----*\
2  =====
3  \ \ / / F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4  \ \ / / O peration |
5  \ \ / / A nd       | Copyright (C) 2011-2014 OpenFOAM Foundation
6  \ \ / / M anipulation |
7  -----*\
8  License
9  This file is part of OpenFOAM.
10 OpenFOAM is free software: you can redistribute it and/or modify it
11 under the terms of the GNU General Public License as published by
12 the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or
13 (at your option) any later version.
14 OpenFOAM is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOUT
15 ANY WARRANTY; without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or
16 FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU General Public License
17 for more details.
18 You should have received a copy of the GNU General Public License
19 along with OpenFOAM. If not, see <http://www.gnu.org/licenses/>.
20 Global
21 rhoEqn
22 Description
23 Solve the continuity for density.
24 /*-----*\
25
26 {
27     fvScalarMatrix rhoEqn
28     (
29         fvm::ddt(rho)
30         + fvc::div(phi)
31         ==
32         fvOptions(rho)
33     );
34     fvOptions.constrain(rhoEqn);
35     rhoEqn.solve();
36     fvOptions.correct(rho);
37 }
38
39 // *****
40
41
42 // *****

```

Figura A.4: UEqn.H (página 1 de 1).

```
1 // Solve the Momentum equation
2
3 MRF.correctBoundaryVelocity(U);
4
5 fvVectorMatrix UEqn
6 (
7     fvm::ddt(rho, U) + fvm::div(phi, U)
8     + MRF.DDt(rho, U)
9     + turbulence->divDevRhoReff(U)
10    ==
11    fvOptions(rho, U)
12 );
13
14 UEqn.relax();
15
16 fvOptions.constrain(UEqn);
17
18 if (pimple.momentumPredictor())
19 {
20     solve
21     (
22         UEqn
23         ==
24         fvc::reconstruct
25         (
26             (
27                 - ghf*fvc::snGrad(rho)
28                 - fvc::snGrad(p_rgh)
29             ) * mesh.magSf()
30         )
31     );
32
33     fvOptions.correct(U);
34     K = 0.5 * magSqr(U);
35 }
36
```

Figura A.5: EEqn.H (página 1 de 1).

```
1  {
2    volScalarField& he = thermo.he();
3
4    fvScalarMatrix EEqn
5    (
6      fvm::ddt(rho, he) + fvm::div(phi, he)
7      + fvc::ddt(rho, K) + fvc::div(phi, K)
8      + (
9        he.name() == "e"
10       ? fvc::div
11         (
12           fvc::absolute(phi/fvc::interpolate(rho), U),
13           p,
14           "div(phi,v,p)"
15         )
16       : -dpdt
17     )
18     - fvm::laplacian(turbulence->alphaEff(), he)
19     ==
20     rho*(U&g)
21     + radiation->Sh(thermo)
22     + fvOptions(rho, he)
23   );
24
25   EEqn.relax();
26
27   fvOptions.constrain(EEqn);
28
29   EEqn.solve();
30
31   fvOptions.correct(he);
32
33   thermo.correct();
34   radiation->correct();
35 }
36
```

Figura A.6: pEqn.H (página 1 de 2).

```

1  {
2      rho = thermo.rho();
3
4      // Thermodynamic density needs to be updated by psi*d(p) after the
5      // pressure solution - done in 2 parts. Part 1:
6      thermo.rho() -= psi*p_rgh;
7
8      volScalarField rAU(1.0/UEqn.A());
9      surfaceScalarField rAUf("rAUf", fvc::interpolate(rho*rAU));
10
11     volVectorField HbyA("HbyA", U);
12     HbyA = rAU*UEqn.H();
13
14     surfaceScalarField phig(-rAUf*ghf*fvc::snGrad(rho)*mesh.magSf());
15
16     surfaceScalarField phiHbyA
17     (
18         "phiHbyA",
19         (
20             (fvc::interpolate(rho*HbyA) & mesh.Sf())
21             + rAUf*fvc::ddtCorr(rho, U, phi)
22         )
23         + phig
24     );
25
26     MRF.makeRelative(fvc::interpolate(rho), phiHbyA);
27
28     // Update the fixedFluxPressure BCs to ensure flux consistency
29     setSnGrad<fixedFluxPressureFvPatchScalarField>
30     (
31         p_rgh.boundaryField(),
32         (
33             phiHbyA.boundaryField()
34             - MRF.relative(mesh.Sf().boundaryField() & U.boundaryField())
35             *rho.boundaryField()
36         ))/(mesh.magSf().boundaryField()*rAUf.boundaryField());
37     );
38
39     fvScalarMatrix p_rghDDtEqn
40     (
41         fvc::ddt(rho) + psi*correction(fvm::ddt(p_rgh))
42         + fvc::div(phiHbyA)
43         ==
44         fvOptions(psi, p_rgh, rho.name())
45     );
46
47     while (pimple.correctNonOrthogonal())
48     {
49         fvScalarMatrix p_rghEqn
50         (
51             p_rghDDtEqn
52             - fvm::laplacian(rAUf, p_rgh)
53         );
54
55         p_rghEqn.solve(mesh.solver(p_rgh.select(pimple.finalInnerIter())));
56
57         if (pimple.finalNonOrthogonalIter())
58         {
59             // Calculate the conservative fluxes
60             phi = phiHbyA + p_rghEqn.flux();
61
62             // Explicitly relax pressure for momentum corrector
63             p_rgh.relax();
64

```


Figura A.7: pEqn.H (página 2 de 2).

```
65         // Correct the momentum source with the pressure gradient flux
66         // calculated from the relaxed pressure
67         U = HbyA + rAU*fvc::reconstruct((phig + p_rghEqn.flux())/rAUf);
68         U.correctBoundaryConditions();
69         fvOptions.correct(U);
70         K = 0.5*magSqr(U);
71     }
72 }
73
74 p = p_rgh + rho*gh;
75
76 // Second part of thermodynamic density update
77 thermo.rho() += psi*p_rgh;
78
79 if (thermo.dpdt())
80 {
81     dpdt = fvc::ddt(p);
82 }
83
84 #include "rhoEqn.H"
85 #include "compressibleContinuityErrs.H"
86 }
87
```

Tabela A.1: Variáveis das equações do conjunto $bPF+sMS$ [12].

Notação no código	Notação matemática/descrição
[cellI], [i]	valor na célula de um dado campo
alpha1_	campo da fração líquida r_l
alpha1c	o mesmo que alpha1_[cellI]
alpha1New	variável auxiliar para o cálculo de r_l
beta, beta_	β
cellI	identificador de cada volume
Cp, Cpc	campo de c , c em cada volume
Cu, Cu_	C
deltaT_	campo de ΔT , ΔT em cada volume
dpdt	$\frac{\partial p}{\partial t}$
e	u (energia interna sensível)
EEqn	Sistema linear gerado da discretização da Equação A.3 ou da Equação A.4
g	\mathbf{g}
ghf	$(\mathbf{g} \cdot \mathbf{z})_f$, em que f é o valor interpolado na face da célula de um dado campo
h	h
HbyA	$\frac{1}{a_p^{n+1}} \{ \sum_{nb} a_{nb} \mathbf{u}_{nb} + a_p^n \mathbf{u}_p^n + \text{termos}(\mathbf{S}_{\rho u}) \}$
he	h ou u , depende da escolha do usuário em tempo de execução
K	$K = \frac{1}{2} \mathbf{u} ^2$
L, L_	L
p	p_l
p_rgh	$p_{ld} = p - \rho(\mathbf{g} \cdot \mathbf{z})$
p_rghEqn	Sistema linear gerado da discretização da Equação A.7
phi	$\rho_f \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f$, em que f representa valores interpolados na face
phig	$-\frac{\rho}{a_p^{n+1}} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{h}) [\nabla \rho]_N \mathbf{S}_f $
phiHByA	$\frac{\rho}{a_p^{n+1}} \{ \sum_{nb} a_{nb} \mathbf{u}_{nb} + a_p^n \mathbf{u}_p^n + \text{termos}(\mathbf{S}_{\rho u}) - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{h}) [\nabla \rho]_N \mathbf{S}_f \}$

Tabela A.1: Variáveis das equações do conjunto *bPF+sMS* [12]. (Continuação)

Notação no código	Notação matemática/descrição
psi	$\frac{\partial \rho}{\partial p}$
q, q-	ς
rAU	$\frac{1}{a_p^{n+1}}$
rAUf	$\left(\frac{\rho}{a_p^{n+1}}\right)_f$, em que f é o valor interpolado na face da célula de um dado campo
relax, relax_	λ
rho	ρ
rhoEqn	Sistema linear gerado da discretização da Equação A.1
rhoRef, rhoRef_	$\bar{\rho}$
S	acréscimo do termo de Darcy célula a célula
Sb	acréscimo do termo de Boussinesq célula a célula
Sp	campo que aponta para $[a_p^{n+1}]$
Su	campo que aponta para $[\sum_{nb} a_{nb} \mathbf{u}_{nb} + a_p^n \mathbf{u}_p^n + \text{termos}(\mathbf{S}_{\rho u})]$
Tc	T em cada volume
Tmelt, Tmelt_	T_m
U	\mathbf{u}
UEqn	Sistema linear gerado da discretização da Equação A.2
V, Vc	campo de V , V em cada volume

Como é possível observar nas figuras do arquivo *buoyantPimpleFoam.C*, Figuras A.1 e A.2, o programa chama, a cada passo de tempo, o arquivo *rhoEqn.H* (linha 77), onde é resolvida a equação da continuidade. Utiliza-se, então, do esquema iterativo *PIMPLE* (linha 80), chamando o arquivo *UEqn.H* (linha 82) para resolver a equação de movimento e o arquivo *EEqn.H* (linha 83) para a de energia, terminando a iteração com a solução da equação da pressão, por meio do arquivo *pEqn.H* (linha 88), em um laço corretor interno ao laço do esquema.

No arquivo *rhoEqn.H*, Figura A.3, vê-se a equação da continuidade para a mis-

Tabela A.2: Operações e funções das equações do conjunto *bPF+sMS* [12].

Notação no código	Notação matemática / descrição
<code>==</code>	$=$
<code>Ψ+=a</code> ou <code>Ψ-=a</code>	Ψ recebe o valor de $\Psi + a$ ou $\Psi - a$
<code>.A()</code>	é a matriz diagonal de um sistema linear $[M][x] = [b]$
<code>.flux()</code>	fluxo na face de uma variável
<code>.H()</code>	é $([M]-[A])[x] + [b]$ no sistema linear cuja matriz diagonal é $[A]$
<code>.solve()</code>	comando para que a equação seja resolvida
<code>&</code>	produto interno entre vetores/tensores
<code>eqn.diag()</code>	aponta para a diagonal do sistema linear da equação
<code>eqn.source()</code>	aponta para o termo fonte do sistema linear da equação
<code>fvc::div(a,Ψ)</code>	$\nabla \cdot (a\Psi)$
<code>fvc::snGrad(Ψ)</code>	$\nabla\Psi \cdot \hat{n}$, em que \hat{n} é o vetor normal à face
<code>fvm::ddt(Ψ)</code>	$\frac{\partial\Psi}{\partial t}$
<code>fvm::laplacian(a,Ψ)</code>	$\nabla \cdot (a\nabla\Psi)$
<code>fvOptions(Ψ)</code>	insere termos-fonte em função de Ψ conforme decisão do usuário em tempo de execução
<code>magSqr(Ψ)</code>	campo que tem o quadrado da magnitude de Ψ em cada ponto
<code>MRF.</code>	usado apenas em sistemas de referências móveis (<i>multi reference frame</i>)
<code>pow3(Ψ)</code>	Ψ^3
<code>sqr(Ψ)</code>	Ψ^2 para Ψ escalar ou $\Psi \otimes \Psi$ (produto diádico) para Ψ vetor
<code>thermo.he()</code>	h ou e , conforme decisão do usuário em tempo de execução

tura nas linhas 29 a 32, cuja notação matemática segue abaixo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = S_\rho \quad (\text{A.1})$$

`textttfvOptions` remete a alguma rotina de um possível código incluído pelo usuário em tempo de execução. `fvOptions(rho)` indica a adição de um termo-fonte relacionado ao balanço da variável `rho`, representado na Equação A.1 por S_ρ .

Do código *UEqn.H*, Figura A.4, obtém-se a equação do movimento para a mistura que é resolvida no aplicativo *buoyantPimpleFoam*:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \mathbf{S}_{\rho \mathbf{u}} - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{z}) \nabla \rho - \nabla p_{ld} \quad (\text{A.2})$$

na qual $\mathbf{S}_{\rho \mathbf{u}}$ é a soma dos termos-fonte adicionados em tempo de execução, no código representado por `fvOptions(rho, U)` (linha 11).

Destaca-se que `MRF.DDt(rho, U)` (linha 8), é utilizado em sistemas de referências móveis (*Multiple Reference Frame*), o que não é o caso deste trabalho e, por isso, não foi incluído na Equação A.2. `turbulence->divDevRhoReff(U)` (na linha 9) engloba, além do termo difusivo, o termo de turbulência, que não foi acionado uma vez que todos os escoamentos tratados neste trabalho eram laminares.

Por sua vez, a equação para o balanço de energia da mistura consta no arquivo *EEqn.H*, Figura A.5. Em tempo de execução, o usuário pode escolher se a equação será resolvida em função da entalpia sensível, `h`, ou da energia interna sensível, `e`. As equações em termos de cada uma das variáveis são, respectivamente:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho h \mathbf{u}) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \nabla \cdot (\rho K \mathbf{u}) - \frac{\partial p_l}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\frac{k}{c} \nabla h \right) = \rho(\mathbf{u} \cdot \mathbf{g}) + S_{\rho h} \quad (\text{A.3})$$

e, sendo u a energia interna sensível da mistura:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \mathbf{u}) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \nabla \cdot (\rho K \mathbf{u}) - \nabla \cdot (p \mathbf{u}) - \nabla \cdot \left(\frac{k}{c} \nabla u \right) = \rho(\mathbf{u} \cdot \mathbf{g}) + S_{\rho u} \quad (\text{A.4})$$

nas quais $S_{\rho h}$ e $S_{\rho u}$ representam os termos-fonte adicionados por `fvOptions(rho, h)`. No Apêndice B está a obtenção da Equação A.4 a partir da Equação A.3. Negligenciou-se o termo de radiação, em concordância com a Hipótese 6.

A etapa corretora do método *PIMPLE* consiste basicamente em corrigir o campo de velocidade obtido previamente com o emprego do campo de pressão do instante anterior, recalculando a velocidade após calcular a pressão no instante atual. Para tanto, a pressão é calculada por meio da substituição, na equação da continuidade, da expressão obtida para a velocidade a partir da discretização da equação do mo-

vimento, de modo a se obter uma equação em função da pressão.

Assim sendo, da discretização da Equação A.2, gera-se:

$$\mathbf{u}_P^{n+1} = \frac{1}{a_p^{n+1}} \left\{ \sum_{nb} a_{nb} \mathbf{u}_{nb} + a_P^n \mathbf{u}_P^n - \{ \nabla [p - \rho(\mathbf{g} \cdot \mathbf{h})] \}_N |\mathbf{S}_f| - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{h}) [\nabla \rho]_N |\mathbf{S}_f| \right\} \quad (\text{A.5})$$

na qual o subscrito P representa o centro do volume em questão, nb os centros dos volumes vizinhos e N significa que o gradiente é normal à face, os sobrescritos $n+1$ e n denotam os instantes atual e anterior, os coeficientes a_i representam aqueles dos termos de velocidade após a discretização e $|\mathbf{S}_f|$ é a magnitude do vetor área da face f . Os gradientes foram mantidos na forma matemática para facilitar a visualização mas, para uma variável escalar Ψ , seria [12]:

$$[\nabla \Psi]_N = \mathbf{n}_f \cdot (\nabla \Psi)_f = \mathbf{n}_f \cdot \left(\frac{\Psi_{nb} - \Psi_P}{|\mathbf{d}|} \right) + Corr \quad (\text{A.6})$$

em que \mathbf{n}_f é o vetor normal à face f , $|\mathbf{d}|$ é a distância entre os pontos nb e P e $Corr$ é um termo de correção de não ortogonalidade.

Substituindo a Equação A.5 na equação da continuidade, Equação A.1, tem-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \frac{\rho}{a_p^{n+1}} \left\{ \sum_{nb} a_{nb} \mathbf{u}_{nb} + a_P^n \mathbf{u}_P^n - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{h}) [\nabla \rho]_N |\mathbf{S}_f| \right\} - \nabla \cdot \left\{ \frac{\rho}{a_p^{n+1}} |\mathbf{S}_f| \{ \nabla [p - \rho(\mathbf{g} \cdot \mathbf{h})] \}_N \right\} = 0 \quad (\text{A.7})$$

A Equação A.7 está implementada no código *pEqn.H*, Figuras A.6 e A.7.

Nota-se, que, após a solução do sistema linear para a pressão (linha 55), os fluxos nas faces são recalculados (linha 60) e, a partir dele, também o são o campo de velocidades e a energia cinética (linhas 67 a 70). A pressão e a massa específica termodinâmicas são atualizadas (linhas 74 e 77) e, então, é resolvido novamente o balanço de massa por meio da equação para a massa específica (linha 84), sendo, por fim, corrigidos os erros de continuidade (linha 85).

A.2 O *solidificationMeltingSource*

Conforme mencionado na Seção 3.2 e no início deste apêndice, por meio do *solidificationMeltingSource* são adicionados termos-fonte às equações de balanço de massa, quantidade de movimento e energia da mistura para tratar da mudança de fase. São quatro os arquivos que o compõem: *solidificationMeltingSource.H*, *solidificationMeltingSourceIO.C*, *solidificationMeltingSource.C* e *solidificationMeltingSourceTemplates.C*.

No *solidificationMeltingSource.H*, Figuras A.8 a A.12, estão declarados os métodos e os objetos implementados nos outros três arquivos. Por meio do *solidificationMeltingSourceIO.C*, Figura A.13, são coletadas as variáveis e as constantes inerentes ao modelo de solidificação implementado, como o ponto de solidificação T_m (linha 34), o calor latente (linha 35) e a massa específica de referência (linha 41), que será o valor de $\rho_s(T_m)$. No *solidificationMeltingSource.C*, Figuras A.14 a A.19, estão implementados os métodos para o cálculo da fração de fase e para a inserção do termo de Darcy e da aproximação de Boussinesq na equação do movimento. O método para a inserção do termo relativo à variação de calor latente está implementado no *solidificationMeltingSourceTemplates.C*, Figura A.20.

Figura A.8: solidificationMeltingSource.H (página 1 de 5).

```

1  /*-----*\
2  =====
3  \\      / F ield      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4  \\      / O peration  |
5  \\      / A nd        | Copyright (C) 2014-2015 OpenFOAM Foundation
6  \\      / M anipulation |
7  -----*\
8  License
9      This file is part of OpenFOAM.
10
11     OpenFOAM is free software: you can redistribute it and/or modify it
12     under the terms of the GNU General Public License as published by
13     the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or
14     (at your option) any later version.
15
16     OpenFOAM is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOUT
17     ANY WARRANTY; without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or
18     FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU General Public License
19     for more details.
20
21     You should have received a copy of the GNU General Public License
22     along with OpenFOAM. If not, see <http://www.gnu.org/licenses/>.
23
24  Class
25      Foam::fv::solidificationMeltingSource
26
27  Description
28      This source is designed to model the effect of solidification and melting
29      processes, e.g. windshield defrosting. The phase change occurs at the
30      melting temperature, \c Tmelt.
31
32      The presence of the solid phase in the flow field is incorporated into the
33      model as a momentum porosity contribution; the energy associated with the
34      phase change is added as an enthalpy contribution.
35
36      Based on the references:
37
38      1. V.R. Voller and C. Prakash, A fixed grid numerical modelling
39      methodology for convection-diffusion mushy phase-change problems,
40      Int. J. Heat Mass Transfer 30(8):17091719, 1987.
41      2. C.R. Swaminathan. and V.R. Voller, A general enthalpy model for
42      modeling solidification processes, Metallurgical Transactions
43      23B:651664, 1992.
44
45      The model generates a field \c \<name>:alpha1 which can be visualised to
46      to show the melt distribution as a fraction [0-1]
47
48  \heading Source usage
49  Example usage:
50  \verbatim
51  solidificationMeltingSource1
52  {
53      type          solidificationMeltingSource;
54      active        yes;
55
56      solidificationMeltingSourceCoeffs
57      {
58          selectionMode  cellZone;
59          cellZone       iceZone;
60
61          Tmelt          273;
62          L               334000;
63          thermoMode     thermo;
64          beta            50e-6;

```


Figura A.9: solidificationMeltingSource.H (página 2 de 5).

```

65         rhoRef          800;
66     }
67 }
68 \endverbatim
69
70 Where:
71 \table
72     Property      | Description          | Required  | Default value
73     Tmelt         | Melting temperature [K] | yes      |
74     L             | Latent heat of fusion [J/kg] | yes     |
75     relax         | Relaxation coefficient [0-1] | no      | 0.9
76     thermoMode    | Thermo mode [thermo|lookup] | yes     |
77     rhoRef        | Reference (solid) density | yes     |
78     rhoName       | Name of density field | no      | rho
79     TName         | Name of temperature field | no     | T
80     CpName        | Name of specific heat capacity field | no | Cp
81     UName         | Name of velocity field | no     | U
82     phiName       | Name of flux field | no    | phi
83     Cu            | Model coefficient | no    | 100000
84     q             | Model coefficient | no    | 0.001
85     beta          | Thermal expansion coefficient [1/K] | yes |
86     g             | Accelerartion due to gravity | no    |
87 \endtable
88
89 SourceFiles
90     solidificationMeltingSource.C
91     solidificationMeltingSourceIO.C
92
93 \*-----*/
94
95 #ifndef solidificationMeltingSource_H
96 #define solidificationMeltingSource_H
97
98 #include "fvMesh.H"
99 #include "volFields.H"
100 #include "cellSetOption.H"
101 #include "NamedEnum.H"
102
103 // * * * * * //
104
105 namespace Foam
106 {
107     namespace fv
108     {
109
110         /-----*\
111         Class solidificationMeltingSource Declaration
112         /-----*/
113
114         class solidificationMeltingSource
115         :
116         public cellSetOption
117         {
118         public:
119
120             enum thermoMode
121             {
122                 mdThermo,
123                 mdLookup
124             };
125
126             static const NamedEnum<thermoMode, 2> thermoModeTypeNames_;
127
128

```

Figura A.10: solidificationMeltingSource.H (página 3 de 5).

```

129 private:
130
131     // Private data
132
133     //- Temperature at which melting occurs [K]
134     scalar Tmelt_;
135
136     //- Latent heat of fusion [J/kg]
137     scalar L_;
138
139     //- Phase fraction under-relaxation coefficient
140     scalar relax_;
141
142     //- Thermodynamics mode
143     thermoMode mode_;
144
145     //- Reference density - typically the solid density
146     scalar rhoRef_;
147
148     //- Name of temperature field - default = "T" (optional)
149     word TName_;
150
151     //- Name of specific heat capacity field - default = "Cp" (optional)
152     word CpName_;
153
154     //- Name of velocity field - default = "U" (optional)
155     word UName_;
156
157     //- Name of flux field - default = "phi" (optional)
158     word phiName_;
159
160     //- Mushy region momentum sink coefficient [1/s]; default = 10^5
161     scalar Cu_;
162
163     //- Coefficient used in porosity calc - default = 0.001
164     scalar q_;
165
166     //- Thermal expansion coefficient [1/K]
167     scalar beta_;
168
169     //- Phase fraction indicator field
170     volScalarField alpha1_;
171
172     //- Current time index (used for updating)
173     label curTimeIndex_;
174
175     //- Temperature change cached for source calculation when alpha1 updated
176     scalarField deltaT_;
177
178
179     // Private Member Functions
180
181     //- Return the specific heat capacity field
182     tmp<volScalarField> Cp() const;
183
184     //- Return the gravity vector
185     vector g() const;
186
187     //- Update the model
188     void update(const volScalarField& Cp);
189
190     //- Helper function to apply to the energy equation
191     template<class RhoFieldType>
192     void apply(const RhoFieldType& rho, fvMatrix<scalar>& eqn);

```

Figura A.11: solidificationMeltingSource.H (página 4 de 5).

```

193
194     //- Disallow default bitwise copy construct
195     solidificationMeltingSource(const solidificationMeltingSource&);
196
197     //- Disallow default bitwise assignment
198     void operator=(const solidificationMeltingSource&);
199
200
201 public:
202
203     //- Runtime type information
204     TypeName("solidificationMeltingSource");
205
206
207     // Constructors
208
209     //- Construct from explicit source name and mesh
210     solidificationMeltingSource
211     (
212         const word& sourceName,
213         const word& modelType,
214         const dictionary& dict,
215         const fvMesh& mesh
216     );
217
218
219     // Member Functions
220
221     // Add explicit and implicit contributions
222
223     //- Add explicit contribution to enthalpy equation
224     virtual void addSup(fvMatrix<scalar>& eqn, const label fieldI);
225
226     //- Add implicit contribution to momentum equation
227     virtual void addSup(fvMatrix<vector>& eqn, const label fieldI);
228
229
230     // Add explicit and implicit contributions to compressible equation
231
232     //- Add explicit contribution to compressible enthalpy equation
233     virtual void addSup
234     (
235         const volScalarField& rho,
236         fvMatrix<scalar>& eqn,
237         const label fieldI
238     );
239
240     //- Add implicit contribution to compressible momentum equation
241     virtual void addSup
242     (
243         const volScalarField& rho,
244         fvMatrix<vector>& eqn,
245         const label fieldI
246     );
247
248
249     // IO
250
251     //- Read source dictionary
252     virtual bool read(const dictionary& dict);
253 };
254
255
256 // * * * * *

```

Figura A.12: solidificationMeltingSource.H (página 5 de 5).

```
257
258 } // End namespace fv
259 } // End namespace Foam
260
261 // * * * * *
262
263 #ifndef NoRepository
264     #include "solidificationMeltingSourceTemplates.C"
265 #endif
266
267 // * * * * *
268
269 #endif
270
271 // *****
272
```

Figura A.13: solidificationMeltingSourceIO.C (página 1 de 1).

```

1  /*-----*\
2  =====
3  \ \ / / F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4  \ \ / / O peration   |
5  \ \ / / A nd         | Copyright (C) 2014-2015 OpenFOAM Foundation
6  \ \ / / M anipulation |
7  -----*\
8  License
9  This file is part of OpenFOAM.
10
11  OpenFOAM is free software: you can redistribute it and/or modify it
12  under the terms of the GNU General Public License as published by
13  the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or
14  (at your option) any later version.
15
16  OpenFOAM is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOUT
17  ANY WARRANTY; without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or
18  FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU General Public License
19  for more details.
20
21  You should have received a copy of the GNU General Public License
22  along with OpenFOAM. If not, see <http://www.gnu.org/licenses/>.
23
24  /*-----*\
25
26  #include "solidificationMeltingSource.H"
27
28  // * * * * * Private Member Functions * * * * * //
29
30  bool Foam::fv::solidificationMeltingSource::read(const dictionary& dict)
31  {
32      if (cellSetOption::read(dict))
33      {
34          coeffs_.lookup("Tmelt") >> Tmelt_;
35          coeffs_.lookup("L") >> L_;
36
37          coeffs_.readIfPresent("relax", relax_);
38
39          mode_ = thermoModeTypeNames_.read(coeffs_.lookup("thermoMode"));
40
41          coeffs_.lookup("rhoRef") >> rhoRef_;
42          coeffs_.readIfPresent("TName", TName_);
43          coeffs_.readIfPresent("UName", UName_);
44
45          coeffs_.readIfPresent("Cu", Cu_);
46          coeffs_.readIfPresent("q", q_);
47
48          coeffs_.readIfPresent("beta", beta_);
49
50          return true;
51      }
52      else
53      {
54          return false;
55      }
56
57      return false;
58  }
59
60
61  // * * * * *
62

```

Figura A.14: solidificationMeltingSource.C (página 1 de 6).

```

1  /*-----*\
2  =====
3  \ \ / / F i e l d       | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4  \ \ / / O peration    |
5  \ \ / / A nd          | Copyright (C) 2014-2015 OpenFOAM Foundation
6  \ \ / / M anipulation  |
7  -----*\
8  License
9  This file is part of OpenFOAM.
10
11  OpenFOAM is free software: you can redistribute it and/or modify it
12  under the terms of the GNU General Public License as published by
13  the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or
14  (at your option) any later version.
15
16  OpenFOAM is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOUT
17  ANY WARRANTY; without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or
18  FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU General Public License
19  for more details.
20
21  You should have received a copy of the GNU General Public License
22  along with OpenFOAM. If not, see <http://www.gnu.org/licenses/>.
23
24  \*-----*\
25
26  #include "solidificationMeltingSource.H"
27  #include "fvMatrices.H"
28  #include "basicThermo.H"
29  #include "uniformDimensionedFields.H"
30  #include "zeroGradientFvPatchFields.H"
31  #include "addToRunTimeSelectionTable.H"
32  #include "geometricOneField.H"
33
34  // * * * * * Static Member Functions * * * * * //
35
36  namespace Foam
37  {
38      template<>
39      const char* NamedEnum
40      <
41          fv::solidificationMeltingSource::thermoMode,
42          2
43      >::names[] =
44      {
45          "thermo",
46          "lookup"
47      };
48
49      namespace fv
50      {
51          defineTypeNameAndDebug(solidificationMeltingSource, 0);
52
53          addToRunTimeSelectionTable
54          (
55              option,
56              solidificationMeltingSource,
57              dictionary
58          );
59      }
60  }
61
62  const Foam::NamedEnum<Foam::fv::solidificationMeltingSource::thermoMode, 2>
63  Foam::fv::solidificationMeltingSource::thermoModeTypeNames_;
64

```

Figura A.15: solidificationMeltingSource.C (página 2 de 6).

```

65
66 // * * * * * Private Member Functions * * * * * //
67
68 Foam::tmp<Foam::volScalarField>
69 Foam::fv::solidificationMeltingSource::Cp() const
70 {
71     switch (mode_)
72     {
73         case mdThermo:
74         {
75             const basicThermo& thermo =
76                 mesh_.lookupObject<basicThermo>(basicThermo::dictName);
77
78             return thermo.Cp();
79             break;
80         }
81         case mdLookup:
82         {
83             if (CpName_ == "CpRef")
84             {
85                 scalar CpRef = readScalar(coeffs_.lookup("CpRef"));
86
87                 return tmp<volScalarField>
88                     (
89                         new volScalarField
90                         (
91                             IOobject
92                             (
93                                 name_ + ":Cp",
94                                 mesh_.time().timeName(),
95                                 mesh_,
96                                 IOobject::NO_READ,
97                                 IOobject::NO_WRITE
98                             ),
99                             mesh_,
100                             dimensionedScalar
101                             (
102                                 "Cp",
103                                 dimEnergy/dimMass/dimTemperature,
104                                 CpRef
105                             ),
106                             zeroGradientFvPatchScalarField::typeName
107                         )
108                     );
109             }
110             else
111             {
112                 return mesh_.lookupObject<volScalarField>(CpName_);
113             }
114             break;
115         }
116         default:
117         {
118             FatalErrorIn
119             (
120                 (
121                     "Foam::tmp<Foam::volScalarField> "
122                     "Foam::fv::solidificationMeltingSource::Cp() const"
123                 )
124                 << "Unhandled thermo mode: " << thermoModeTypeNames_[mode_]
125                 << abort(FatalError);
126         }
127     }
128

```

Figura A.16: solidificationMeltingSource.C (página 3 de 6).

```

129     return tmp<volScalarField>(NULL);
130 }
131
132
133 Foam::vector Foam::fv::solidificationMeltingSource::g() const
134 {
135     if (mesh_.foundObject<uniformDimensionedVectorField>("g"))
136     {
137         const uniformDimensionedVectorField& value =
138             mesh_.lookupObject<uniformDimensionedVectorField>("g");
139         return value.value();
140     }
141     else
142     {
143         return coeffs_.lookup("g");
144     }
145 }
146
147
148 void Foam::fv::solidificationMeltingSource::update(const volScalarField& Cp)
149 {
150     if (curTimeIndex_ == mesh_.time().timeIndex())
151     {
152         return;
153     }
154
155     if (debug)
156     {
157         Info<< type() << ": " << name_ << " - updating phase indicator" << endl;
158     }
159
160     // update old time alpha field
161     alpha_.oldTime();
162
163     const volScalarField& T = mesh_.lookupObject<volScalarField>(TName_);
164
165     forAll(cells_, i)
166     {
167         label cellI = cells_[i];
168
169         scalar Tc = T[cellI];
170         scalar Cpc = Cp[cellI];
171         scalar alphaNew = alpha_[cellI] + relax_*Cpc*(Tc - Tmelt_)/L_;
172
173         alpha_[cellI] = max(0, min(alphaNew, 1));
174         deltaT_[i] = Tc - Tmelt_;
175     }
176
177     alpha_.correctBoundaryConditions();
178
179     curTimeIndex_ = mesh_.time().timeIndex();
180 }
181
182
183 // * * * * * Constructors * * * * * //
184
185 Foam::fv::solidificationMeltingSource::solidificationMeltingSource
186 (
187     const word& sourceName,
188     const word& modelType,
189     const dictionary& dict,
190     const fvMesh& mesh
191 )
192 :
```


Figura A.17: solidificationMeltingSource.C (página 4 de 6).

```

193 cellSetOption(sourceName, modelType, dict, mesh),
194 Tmelt_(readScalar(coeffs_.lookup("Tmelt"))),
195 L_(readScalar(coeffs_.lookup("L"))),
196 relax_(coeffs_.lookupOrDefault("relax", 0.9)),
197 mode_(thermoModeTypeNames_.read(coeffs_.lookup("thermoMode"))),
198 rhoRef_(readScalar(coeffs_.lookup("rhoRef"))),
199 TName_(coeffs_.lookupOrDefault<word>("TName", "T")),
200 CpName_(coeffs_.lookupOrDefault<word>("CpName", "Cp")),
201 UName_(coeffs_.lookupOrDefault<word>("UName", "U")),
202 phiName_(coeffs_.lookupOrDefault<word>("phiName", "phi")),
203 Cu_(coeffs_.lookupOrDefault<scalar>("Cu", 100000)),
204 q_(coeffs_.lookupOrDefault("q", 0.001)),
205 beta_(readScalar(coeffs_.lookup("beta"))),
206 alpha1_
207 (
208     IObject
209     (
210         name_ + ":alpha1",
211         mesh.time().timeName(),
212         mesh,
213         IObject::READ_IF_PRESENT,
214         IObject::AUTO_WRITE
215     ),
216     mesh,
217     dimensionedScalar("alpha1", dimless, 0.0),
218     zeroGradientFvPatchScalarField::typeName
219 ),
220 curTimeIndex_(-1),
221 deltaT_(cells_.size(), 0)
222 {
223     fieldNames_.setSize(2);
224     fieldNames_[0] = UName_;
225
226     switch (mode_)
227     {
228     case mdThermo:
229     {
230         const basicThermo& thermo =
231             mesh_.lookupObject<basicThermo>(basicThermo::dictName);
232
233         fieldNames_[1] = thermo.he().name();
234         break;
235     }
236     case mdLookup:
237     {
238         fieldNames_[1] = TName_;
239         break;
240     }
241     default:
242     {
243         FatalErrorIn
244         (
245             "fv::solidificationMeltingSource::solidificationMeltingSource"
246         ) << "Unhandled thermo mode: " << thermoModeTypeNames_[mode_]
247         << abort(FatalError);
248     }
249     }
250
251     applied_.setSize(2, false);
252 }
253
254
255 // * * * * * Member Functions * * * * *
256

```

Figura A.18: solidificationMeltingSource.C (página 5 de 6).

```

257 void Foam::fv::solidificationMeltingSource::addSup
258 (
259     fvMatrix<scalar>& eqn,
260     const label fieldI
261 )
262 {
263     apply(geometricOneField(), eqn);
264 }
265
266
267 void Foam::fv::solidificationMeltingSource::addSup
268 (
269     const volScalarField& rho,
270     fvMatrix<scalar>& eqn,
271     const label fieldI
272 )
273 {
274     apply(rho, eqn);
275 }
276
277
278 void Foam::fv::solidificationMeltingSource::addSup
279 (
280     fvMatrix<vector>& eqn,
281     const label fieldI
282 )
283 {
284     if (debug)
285     {
286         Info<< type() << ": applying source to " << eqn.psi().name() << endl;
287     }
288
289     const volScalarField Cp(this->Cp());
290
291     update(Cp);
292
293     vector g = this->g();
294
295     scalarField& Sp = eqn.diag();
296     vectorField& Su = eqn.source();
297     const scalarField& V = mesh_.V();
298
299     forAll(cells_, i)
300     {
301         label cellI = cells_[i];
302
303         scalar Vc = V[cellI];
304         scalar alpha1c = alpha1_[cellI];
305
306         scalar S = -Cu_*sqr(1.0 - alpha1c)/(pow3(alpha1c) + q_);
307         vector Sb = rhoRef_*g*beta_*deltaT_[i];
308
309         Sp[cellI] += Vc*S;
310         Su[cellI] += Vc*Sb;
311     }
312 }
313
314
315 void Foam::fv::solidificationMeltingSource::addSup
316 (
317     const volScalarField& rho,
318     fvMatrix<vector>& eqn,
319     const label fieldI
320 )

```

Figura A.19: solidificationMeltingSource.C (página 6 de 6).

```
321 {
322     // Momentum source uses a Boussinesq approximation - redirect
323     addSup(eqn, fieldI);
324 }
325
326
327 // ***** //
328
```

Figura A.20: solidificationMeltingSourceTemplates.C (página 1 de 1).

```

1  /*-----*\
2  =====
3  \ \ / / F i e l d      | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4  \ \ / / O peration   |
5  \ \ / / A nd         | Copyright (C) 2014-2015 OpenFOAM Foundation
6  \ \ / / M anipulation |
7  -----*\
8  License
9  This file is part of OpenFOAM.
10
11  OpenFOAM is free software: you can redistribute it and/or modify it
12  under the terms of the GNU General Public License as published by
13  the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or
14  (at your option) any later version.
15
16  OpenFOAM is distributed in the hope that it will be useful, but WITHOUT
17  ANY WARRANTY; without even the implied warranty of MERCHANTABILITY or
18  FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the GNU General Public License
19  for more details.
20
21  You should have received a copy of the GNU General Public License
22  along with OpenFOAM. If not, see <http://www.gnu.org/licenses/>.
23
24  /*-----*\
25
26  #include "fvMatrices.H"
27  #include "fvcDdt.H"
28
29  // * * * * * Private Member Functions * * * * * //
30
31  template<class RhoFieldType>
32  void Foam::fv::solidificationMeltingSource::apply
33  (
34      const RhoFieldType& rho,
35      fvMatrix<scalar>& eqn
36  )
37  {
38      if (debug)
39      {
40          Info<< type() << ": applying source to " << eqn.psi().name() << endl;
41      }
42
43      const volScalarField Cp(this->Cp());
44
45      update(Cp);
46
47      dimensionedScalar L("L", dimEnergy/dimMass, L_);
48
49      // contributions added to rhs of solver equation
50      if (eqn.psi().dimensions() == dimTemperature)
51      {
52          // isothermal phase change - only include time derivative
53          // eqn -= L/Cp*(fvc::ddt(rho, alpha1_) + fvc::div(phi, alpha1_));
54          eqn -= L/Cp*(fvc::ddt(rho, alpha1_));
55      }
56      else
57      {
58          // isothermal phase change - only include time derivative
59          // eqn -= L*(fvc::ddt(rho, alpha1_) + fvc::div(phi, alpha1_));
60          eqn -= L*(fvc::ddt(rho, alpha1_));
61      }
62  }
63
64

```

No que se refere à equação da continuidade da mistura, A.1, o *solidificationMeltingSource* não adiciona nenhum termo, de modo que $S_\rho = 0$, obtendo-se a equação 3.68.

Em relação ao balanço da quantidade de movimento, Equação A.2, o `fvOptions(rho, U)` na linha 11 da Figura A.1 invoca o método implementado no *solidificationMeltingSource.C* entre as linhas 267 e 275 da Figura A.18 que, por sua vez, redireciona para o método implementado entre as linhas 278 e 312 da mesma figura. Por meio deste método, são acrescentados, no termo $\mathbf{S}_{\rho\mathbf{u}}$ da Equação A.2, o termo de Darcy, que tem a fração que multiplica \mathbf{u} na Equação 3.30 calculada na linha 306, cuja notação matemática é:

$$- C \frac{(1 - r_l)^2}{r_l^3 + \varsigma} \quad (\text{A.8})$$

e o termo de Boussinesq, calculado na linha 307, cuja notação matemática é:

$$\bar{\rho}\mathbf{g}\bar{\beta}(T - \bar{T}) \quad (\text{A.9})$$

O termo de Darcy é adicionado à diagonal da matriz do sistema linear (variável \mathbf{Sp} , linhas 295 e 309), enquanto o termo de Boussinesq é acrescentado ao termo independente (variável \mathbf{Su} , linhas 296 e 310). Essas operações são realizadas célula a célula e \mathbf{Su} atribui um sinal negativo ao termo de Boussinesq nesse procedimento. A inserção desses termos na Equação A.2 a transforma na equação 3.69.

Ainda no código *solidificationMeltingSource.C*, o comando `update(Cp)`, que aparece na linha 291, chama o método que está implementado entre as linhas 148 e 180 da Figura A.16. Nesse método, são calculados a diferença $(T - \bar{T})$, como se pode ver na linha 174 para $\bar{T} = T_m$ e a fração de fase líquida r_l , nas linhas 171 e 173. Em notação matemática, na linha 171 tem-se:

$$[r_l]_{aux} = [r_l]^n + \lambda \frac{C}{L} \{ [T]^n - T_m \} \quad (\text{A.10})$$

em que $[r_l]_{aux}$ é uma variável auxiliar para armazenar o valor calculado para a fração de fase nessa etapa, e, na linha 173, tem-se a correção da fração de fase para valores no intervalo $[0, 1]$:

$$[r_l]^{n+1} = \max(0, \min([r_l]_{aux}, 1)) \quad (\text{A.11})$$

Nota-se que o método `update(Cp)` é executado apenas uma vez em cada passo de tempo, como se pode ver nas linhas 150 a 153.

Por fim, o código *solidificationMeltingSourceTemplate.C*, chamado pelo termo `fvOptions(rho, he)` na linha 22 do código *EEqn.H* do *buoyantPimpleFoam* (Figura A.5), adiciona o termo de variação da quantidade de calor latente por meio do

método que consta nas linhas 32 a 62 da Figura A.20. Na linha 69 é calculado o termo propriamente dito, que, em notação matemática, é:

$$-L \frac{\partial}{\partial t}(\rho r_i) \quad (\text{A.12})$$

Este termo, adicionado por $S_{\rho u}$ na Equação A.3, completa a Equação 3.70.

Apêndice B

Balanco de energia em função da energia interna sensível

Para obter o balanço de energia em função da energia interna sensível, parte-se da definição da entalpia para uma fase k , Equação 3.37, de forma que:

$$U_k = H_k - \frac{p_k}{\rho_k} \quad (\text{B.1})$$

Se as energias internas sensíveis das fases são:

$$u_l = h_l - \frac{p_l}{\rho} \quad \text{e} \quad u_s = h_s - \frac{p_l}{\rho} \quad (\text{B.2})$$

então suas energias internas serão

$$\begin{aligned} U_l &= H_l - \frac{p_l}{\rho} \\ &= h_l + L - \frac{p_l}{\rho} \\ &= u_l + L \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

e

$$\begin{aligned} U_s &= H_s - \frac{p_s}{\rho} \\ &= h_s - \frac{p_l}{\rho} \\ &= u_s \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

e pode-se definir a energia interna sensível u da mistura:

$$\begin{aligned}
u &\doteq r_l u_l + r_s u_s \\
&= r_l \left(h_l - \frac{p_l}{\rho} \right) + r_s \left(h_s - \frac{p_l}{\rho} \right) \\
&= (r_l h_l + r_s h_s) - (r_l + r_s) \frac{p_l}{\rho} \\
&= h - \frac{p_l}{\rho}
\end{aligned} \tag{B.5}$$

ou

$$h = u + \frac{p_l}{\rho} \tag{B.6}$$

na qual, como visto anteriormente, h é a entalpia sensível da mistura.

Assim, substituindo a definição de u , Equação B.5 na Equação 3.70, obtém-se a Equação B.7:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \mathbf{u}) + \frac{\partial}{\partial t}(\rho K) + \nabla \cdot (\rho K \mathbf{u}) = \nabla \cdot (p \mathbf{u}) + \nabla \cdot \left(\frac{k}{c} \nabla u \right) \rho (\mathbf{u} \cdot \mathbf{g}) - \frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho L) \tag{B.7}$$

que constitui a Equação A.4 com a substituição do termo-fonte (Equação A.12) em $S_{\rho u}$.

Apêndice C

Código *StefanNeumannFoam*

O *StefanNeumannFoam* foi o programa implementado no *OpenFOAM* que calcula a solução analítica de Neumann para o problema de Stefan, exposta na Seção 2.1.1. A finalidade deste programa foi gerar os resultados analíticos para a verificação do conjunto *buoyantPimpleFoam* e *solidificationMeltingSource* relatada na Subseção 3.3.1.

Para a compreensão deste apêndice são desejáveis conhecimentos da linguagem de programação C++ e da nomenclatura empregada pelo *OpenFOAM* [16], para o que podem ser consultados o guia do usuário [16], o guia de programador [12] e a tese de JASAK [41].

O programa foi quebrado em três códigos: o programa principal, *StefanNeumannFoam.C*, em que há o laço temporal, *interfaceEqn.H*, no qual é calculada a frente de solidificação, e *TempEqn.H*, onde são calculados os perfis de temperatura das fases sólida e líquida. A Tabela C.1 reúne a nomenclatura das variáveis.

Nas linhas 43 e 44 do *StefanNeumannFoam.C*, Figura C.1, vê-se que são chamados, respectivamente, os códigos *interfaceEqn.H* e *TempEqn.H* em cada passo de tempo.

Na Figura C.2, vê-se que a interface é calculada na linha 11 conforme a Equação

Tabela C.1: Variáveis do código *StefanNeumannFoam*.

nomenclatura no código	variável
difus_l	α_l
difus_s	α_s
lambda	λ
rho_l	ρ_l
rho_s	ρ_s
Ti	T_i
Tm	T_m
Tw	T_w
X	X_{sl}

2.10, aqui reproduzida:

$$X_{sl}(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha_s t}$$

Por fim, na Figura C.3, tem-se, na linha 15, a equação para o cálculo da temperatura na região do domínio que já se encontra na fase sólida, conforme a Equação 2.11, reproduzida abaixo:

$$T(x, t) = T_w + \frac{T_m - T_w}{\operatorname{erf} \lambda} \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_s t}} \right), \quad 0 \leq x \leq X_{sl}(t)$$

enquanto, na linha 19, consta implementada a equação para o cálculo da temperatura na parte do domínio que ainda permanece líquida, Equação 2.12, também reproduzida neste apêndice:

$$T(x, t) = T_i - (T_i - T_m) \left[\operatorname{erfc} \left(\lambda \frac{\rho_s \sqrt{\alpha_s}}{\rho_l \sqrt{\alpha_l}} \right) \right]^{-1} \operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2\sqrt{\alpha_l t}} + \frac{\lambda(\rho_s - \rho_l)\sqrt{\alpha_s}}{\rho_l \sqrt{\alpha_l}} \right],$$

$x \geq X_{sl}(t)$

Figura C.1: StefanNeumannFoam.C (página 1 de 1).

```

1  /*-----*/
2  =====
3  \\      /  F ield      |  OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4  \\      /  O peration  |
5  \\      /  A nd        |  Copyright (C) 2011-2015 OpenFOAM Foundation
6  \\      /  M anipulation |
7  -----
8
9  Aline: Solução analítica do problema de Stefan - solução de Neumann
10
11  (09 JAN 2017)
12
13  /*-----*/
14
15  #include "fvCFD.H"
16  #include "fvIOoptionList.H"
17  #include "fixedFluxPressureFvPatchScalarField.H"
18
19  // ***** //
20
21  int main(int argc, char *argv[])
22  {
23      #include "setRootCase.H"
24      #include "createTime.H"
25      #include "createMesh.H"
26
27      #include "createFields.H"
28
29      // ***** //
30
31      Info<< "\nStarting time loop\n" << endl;
32
33      int indicadortl = 1;
34
35      while (runTime.run())
36      {
37          Info << "indicador time.loop Nr " << indicadortl << "\n"<< endl;
38
39          runTime++;
40
41          runTimeInSec.value() = runTime.time().value();
42
43          #include "interfaceEqn.H"
44          #include "TempEqn.H"
45
46
47          runTime.write();
48          indicadortl ++;
49
50          Info<< "ExecutionTime = " << runTime.elapsedCpuTime() << " s"
51              << " ClockTime = " << runTime.elapsedClockTime() << " s"
52              << n1 << endl;
53      }
54
55
56      Info<< "End\n" << endl;
57
58      return 0;
59  }
60
61  // ***** //
62

```

Figura C.2: interfaceEqn.H (página 1 de 1).

```
1 // Interface equation
2
3 /*
4
5     Aline:
6
7     Data: 09 JAN 2017
8
9 */
10
11 X = 2*lambda*sqrt(difus_s*runTimeInSec);
12
13
```

Figura C.3: TempEqn.H (página 1 de 1).

```
1 // Temperature equation
2
3 /*
4
5     Aline:
6
7     Data: 09 JAN 2017
8
9 */
10
11 forAll(mesh.cells(),celli)
12 {
13     if (mesh.C()[celli].x()<=X.value())
14     {
15         Temp[celli] = Tw.value() + (Tm.value()-Tw.value())*Foam::erf(mesh.C()[celli].
16             x()/(2*Foam::sqrt(difus_s.value()*runTimeInSec.value())))/Foam::erf(lambda.
17             value());
18     }
19     else
20     {
21         Temp[celli] = Ti.value() - (Ti.value()-Tm.value())* Foam::erfc((mesh.C()[
22             celli].x()/(2*Foam::sqrt(difus_l.value()*runTimeInSec.value())))+lambda.value
23             ())*rho_s.value()-rho_l.value()*Foam::sqrt(difus_s.value()/difus_l.value())/
24             rho_l.value()/Foam::erfc(lambda.value()*rho_s.value()*Foam::sqrt(difus_s.value
25             ()/difus_l.value())/rho_l.value());
26     }
27 }
```