

Maicon William Niebus Odone

Estudos numéricos na solução de problemas de mudança de fase

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional.

Orientador: Prof. D.Sc. Elson Magalhães Toledo

Coorientador: Prof. D.Sc. Luis Paulo da Silva Barra

Juiz de Fora

2014

Ficha catalográfica elaborada através do Programa de geração automática da Biblioteca Universitária da UFJF, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Odone, Maicon William Niebus.

Estudos numéricos na solução de problemas de mudança de fase / Maicon William Niebus Odone. -- 2014.
132 p. : il.

Orientador: Elson Magalhães Toledo

Coorientador: Luis Paulo da Silva Barra

Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de Juiz de Fora, ICE/Engenharia. Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, 2014.

1. Mudança de fase. 2. Entalpia-porosidade. 3. Volumes finitos. 4. Fronteira livre. 5. SIMPLE. I. Toledo, Elson Magalhães, orient. II. Barra, Luis Paulo da Silva, coorient. III. Título.

Maicon William Niebus Odone

Estudos numéricos na solução de problemas de mudança de fase

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional.

Aprovada em 28 de Agosto de 2014.

BANCA EXAMINADORA

Prof. D.Sc. Elson Magalhães Toledo - Orientador
LNCC / Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. D.Sc. Luis Paulo da Silva Barra - Coorientador
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. D.Sc. Rafael Alves Bonfim de Queiroz
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. D.Sc. José Karam Filho
LNCC

*Dedico este trabalho a todos que
direta ou indiretamente
contribuíram para sua realização.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à Deus por sempre me dar forças para lutar por meus objetivos e nunca me abandonar; à meu pai e à minha mãe que sempre me encorajaram em tudo; ao meu orientador prof. Elson Magalhães Toledo, que é quase como um pai para mim e sem o qual esse trabalho seria inimaginável; e à meu co-orientador prof. Luis Paulo da Silva Barra, que me salvou de vários apertos durante essa empreitada

*'O único lugar onde o sucesso
vem antes do trabalho é no
dicionário.'*

Albert Einstein

RESUMO

Problemas de mudança de fase líquido-sólido e/ou sólido-líquido são amplamente encontrados em diversas aplicações da indústria tais como na moldagem de diferentes tipos de peças, na aplicação de sprays térmicos para tratamento de superfícies e na fundição de materiais energéticos tais como o trinitrotolueno (TNT). Neste último caso, contrações de material, trincas e formação de vazios são frequentemente observados, devendo estes comportamentos serem previstos e evitados. Sendo assim, a simulação numérica de tais processos com algoritmos capazes de acompanhar a evolução da superfície livre, e a distribuição da temperatura no corpo durante o processo de fundição é importante. Pretende-se estudar diferentes estratégias na modelagem e solução de problemas desta natureza através das equações de transporte de massa, transferência de calor e de mudança de fase por meio do método dos volumes finitos. Na metodologia usada, os processos de solidificação e fusão são tratados por meio da aproximação do método da entalpia-porosidade baseado em malhas fixas.

Palavras-chave: Mudança de fase. Entalpia-porosidade. Volumes finitos. Fronteira livre. SIMPLE.

ABSTRACT

Phase change problems as liquid-solid and/or solid-liquid are widely found in several industrial applications such as in molding of different parts, the application of thermal spray treatment and the casting of energy materials such as trinitrotoluene (TNT). For the latter case, material contractions, cracks and empities formation are often observed and these behaviors should be anticipated and avoided. Thus, the numerical simulation of such processes with algorithms capable to follow free surface evolution and body temperature distribution during casting process is important. In this work we study strategies in modeling and solving problems of this nature through the mass transport equations, heat transfer and phase change using the finite volume method. In the methodology used, the melting and solidification process are treated by means of the enthalpy-porosity approximation method based on fixed grids.

Keywords: Phase change. Enthalpy-porosity. Finite Volume. Free surface. SIMPLE.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
1.1	Fenomenologia básica envolvida em problemas de mudança de fase .	12
1.2	Revisão bibliográfica	15
1.3	Organização do trabalho	17
2	O PROBLEMA DE STEFAN	18
2.1	Introdução	18
2.1.1	<i>Condução de calor</i>	18
2.1.2	<i>Condição de Stefan</i>	22
2.1.3	<i>O problema de Stefan</i>	24
2.2	Solução analítica dos Problemas de Stefan	26
2.2.1	<i>Introdução</i>	26
2.2.2	<i>Problema de Stefan de uma fase.....</i>	26
2.2.3	<i>Solução de Neumann.....</i>	28
2.2.4	<i>Problema de Stefan de duas fases.....</i>	30
2.3	Solução numérica de problemas de Stefan	32
2.3.1	<i>Discretização</i>	35
2.3.2	<i>Resultados Numéricos.....</i>	37
3	EQUAÇÕES GOVERNANTES DA DINÂMICA DOS FLUIDOS.....	42
3.1	Introdução	42
3.2	Descrições espacial e material	43
3.3	A derivada material	44
3.3.1	<i>Aceleração de uma partícula.....</i>	45
3.4	Equação da conservação da massa	46
3.5	Equação da conservação da quantidade de movimento linear	47
3.6	Equação da conservação da energia	49
3.6.1	<i>Trabalho realizado pelas tensões</i>	49
3.6.2	<i>Fluxo de energia devido à condução de calor</i>	50
3.6.3	<i>A equação da energia</i>	51

3.7	Equações de Navier-Stokes para um fluido Newtoniano	51
3.8	Forma diferencial e integral	54
4	O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS	56
4.1	Introdução	56
4.2	Malha de volumes finitos	56
4.3	MVF para problemas de difusão estacionários	58
4.3.1	<i>MVF para difusão unidimensional</i>	58
4.3.2	<i>MVF para difusão bidimensional</i>	60
4.4	MVF - Aplicação a casos de convecção-difusão estacionários	62
4.4.1	<i>O esquema de diferenças centrais (CDS)</i>	64
4.4.2	<i>O esquema upwind (UDS)</i>	66
4.4.3	<i>O esquema híbrido</i>	67
4.4.4	<i>O esquema exponencial</i>	68
4.4.5	<i>O esquema power-law</i>	70
4.5	Algoritmos de solução para o acoplamento pressão-velocidade	71
4.5.1	<i>Introdução</i>	71
4.5.2	<i>A malha deslocada (staggered)</i>	72
4.5.3	<i>Tratamento das equações do movimento</i>	77
4.5.4	<i>Correções para a pressão e para a velocidade</i>	80
4.5.5	<i>O algoritmo SIMPLE</i>	83
4.5.6	<i>Condições de contorno para a equação da correção da pressão</i> ..	84
4.6	Aplicação a problemas transientes advectivos/difusivos	85
4.6.1	<i>Esquema explícito</i>	88
4.6.2	<i>Esquema Crank-Nicolson</i>	89
4.6.3	<i>Esquema completamente implícito</i>	89
4.6.4	<i>Discretização de problemas de convecção-difusão transientes</i> ...	90
4.6.5	<i>O algoritmo SIMPLE transiente</i>	91
4.7	Exemplos numéricos	93
4.7.1	<i>Exemplo 1</i>	93
4.7.2	<i>Exemplo 2</i>	99

5	O MÉTODO DA ENTALPIA-POROSIDADE.....	105
5.1	Introdução	105
5.2	Equações governantes	106
5.3	Termos fonte	107
5.4	Discretização e procedimentos de solução	111
5.5	Exemplos numéricos	115
5.5.1	<i>Solidificação em Cavidade.....</i>	115
5.5.2	<i>Fundição de estanho</i>	122
6	CONCLUSÕES.....	126
	REFERÊNCIAS	129

1 INTRODUÇÃO

O estudo de problemas que envolvem processos de transferência de calor com mudança de fase são de grande importância em diversas áreas do conhecimento tais como na engenharia, na metalurgia e em várias aplicações industriais. Em geral, nestes problemas, os processos de transferência de calor, escoamento de fluidos e de mudança de fase estão fortemente acoplados [1]. Neste trabalho, abordam-se fundamentalmente os processos de fusão (transformação sólido \rightarrow líquido) e/ou solidificação (transformação líquido \rightarrow sólido).

Tais problemas são conhecidos como problemas de fronteira móvel, cuja principal característica é o fato de pelo menos uma parte da fronteira do problema ser “livre”, de modo que sua posição e forma ao longo do tempo são desconhecidas e devem ser resolvidas como parte da solução do problema. É também devido a este fato a maior dificuldade na solução matemática dos modelos relacionados a esta classe de problemas. Fisicamente, tal fronteira separa as fases sólida e líquida e, por esta razão, também é denominada frente de fusão/solidificação [2].

Uma classe de problemas de mudança de fase de grande importância são os chamados problemas de Stefan ([2, 3, 4, 6]), cujo estudo de seus modelos e soluções fornecem um ponto de partida para o desenvolvimento de modelos e soluções de problemas mais complexos envolvendo mudança de fase. Tais problemas apresentam soluções analíticas em casos extremamente limitados, envolvendo geometria semi-infinita e unidimensional, com propriedades físicas do material consideradas constantes em cada fase, temperatura de mudança de fase constante, sem fontes ou sumidouros de calor, transferência de calor apenas por condução isotrópica, sem fluxo de material, a interface entre as fases tendo espessura considerada nula e sendo uma isoterma à temperatura de mudança de fase.

1.1 Fenomenologia básica envolvida em problemas de mudança de fase

Em um material, ambas as fases sólida e líquida são caracterizadas pela presença de forças coesivas que mantêm os átomos em proximidade. Em um sólido, as moléculas

vibram em torno de posições de equilíbrio fixas, enquanto em um líquido as moléculas podem “escapar” dessas posições de equilíbrio. A manifestação macroscópica desta energia vibracional é denominada calor ou energia térmica, que se obtém através da temperatura. Em processos de mudança de fase, átomos na fase líquida são mais energéticos (quentes) que aqueles na fase sólida. Assim antes de um sólido derreter, uma certa quantidade de energia deve ser absorvida para que as forças de ligação que mantêm a estrutura sólida possam ser superadas. Esta quantidade de energia necessária para que um sólido possa derreter é chamada **calor latente** L , também conhecido como **calor latente de fusão** e representa a diferença nos níveis de energia térmica (entalpia de fusão) entre as fases líquida e sólida. Por outro lado, o caso da solidificação requer a remoção deste calor latente.

Há três formas de transferência de calor em um material: **condução**, **convecção** e **radiação**. Condução é a transferência de energia cinética entre os átomos, por exemplo através da colisão de átomos vizinhos e o movimento de elétrons; não há fluxo ou transferência de massa no material. Convecção é transferência de calor através do fluxo de partículas. Claramente, transferência de calor por convecção só pode ocorrer no material no estado líquido ou gasoso. Radiação é uma forma de transferência de energia que não requer um meio físico intermediário para se propagar. É a única forma de propagação de calor que pode ocorrer no vácuo.

A transição de uma fase para outra, ou seja, a absorção ou liberação de calor latente, ocorre em uma temperatura na qual a estabilidade de uma fase deteriora em favor da outra de acordo com a energia disponível. Esta temperatura, T_m , é a **temperatura de fusão** ou **temperatura de mudança de fase** e depende da pressão. Sob pressão fixa, T_m , pode ser um valor particular fixo, uma propriedade do material, ou uma função de outras variáveis termodinâmicas.

A região de transição de fase onde as fases sólida e líquida coexistem é chamada **interface**. Para a maioria dos materiais puros mudando de fase sob condições normais a uma temperatura fixa T_m , a interface parece localmente plana e de espessura desprezível. Assim, pode ser considerada como uma superfície bem definida separando a fase líquida da fase sólida à temperatura T_m . Em outros casos, como em misturas ou super-resfriamento, a região de mudança de fase pode ter espessura aparente e é chamada de **zona mushy**.

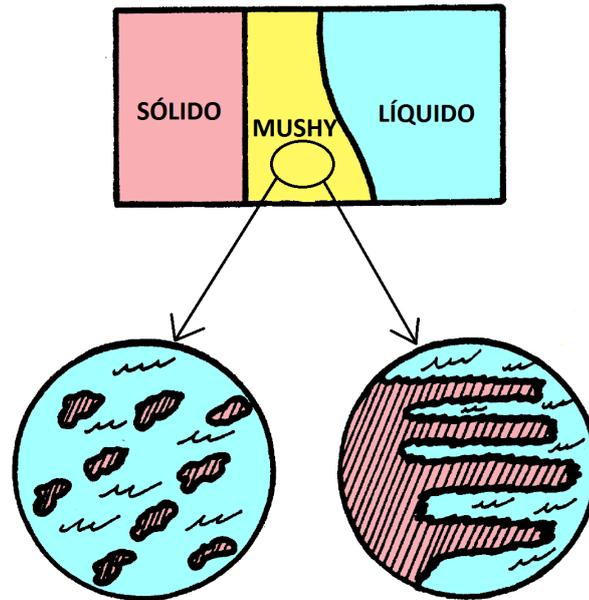


Figura 1.1: Representação de uma região de transição de fase.

A microestrutura de uma zona *mushy* pode ter formas bem complexas e variadas, e, em geral, sua forma depende da composição do material e das condições de resfriamento impostas ao material. Na Figura 1.1 apresenta-se esquematicamente uma região onde um material está mudando de fase. Observam-se três regiões distintas: uma região completamente sólida, outra completamente líquida e a zona *mushy*. A Figura 1.2 ilustra algumas formas que a zona *mushy* pode apresentar, incluindo o caso de uma fronteira planar.

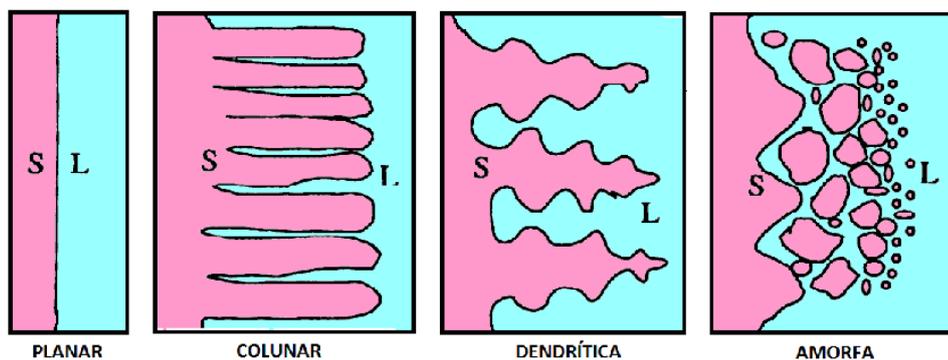


Figura 1.2: Interface planar e morfologia esquemática de uma zona *mushy*.

A maioria das propriedades termofísicas de um material geralmente varia de forma suave com a temperatura, podendo apresentar variações súbitas na temperatura de fusão T_m . Tais descontinuidades nas propriedades termofísicas complicam os modelos utilizados no estudo desses problemas por induzem descontinuidades nos coeficientes das equações

diferenciais que descrevem estes modelos. Dentre os efeitos causados por variações de propriedades com a temperatura o mais notável é causado pelas variações da densidade [2].

Variações típicas na densidade devido a fusão ou solidificação estão na faixa de 5% a 10% e em alguns casos podendo chegar até 30%. Na maioria dos materiais, a fase sólida é mais densa que a fase líquida o que, em um processo de solidificação, pode resultar na formação de vazios [5] e em um processo de derretimento, no rompimento do molde que comporta o material [2]. A variação da densidade com a temperatura induz fluxo de material por convecção natural na presença da gravidade, tendendo a equilibrar a temperatura no líquido.

1.2 Revisão bibliográfica

A classe de modelos de problemas de mudança de fase mais simples são os chamados Problemas de Stefan. Estes modelos são formulados com um mínimo de efeitos físicos a partir hipótese simplificadoras e são caracterizados por considerar apenas a condução como principal mecanismo de transferência de calor, sendo, portanto, suficiente uma formulação baseada na equação da energia na forma da equação de condução pura de calor. A solução numérica desses problemas normalmente emprega uma formulação baseada na entalpia (energia térmica) conhecida como método da entalpia ([2], [6], [7], [8], [9]). Formulações de problemas de Stefan também são encontradas em duas ou três dimensões, e o estudo de soluções desses problemas requer a utilização de métodos numéricos ([4], [10]).

Diferentemente dos problemas de Stefan, casos mais complexos de mudança de fase vão além da aplicação e da solução da equação da energia, devendo-se levar em conta, entre outros fatores, o efeito da convecção natural dentro da região líquida devido as variações na densidade quando o material se derrete ou se solidifica ([11]). Ao se considerar a convecção natural na região líquida, a interface sólido-líquido não mais possui uma forma regular bem definida, devido a presença do campo de velocidades na região líquida. Com isso, as equações básicas de dinâmica dos fluidos, ou seja, a equação da conservação da energia, equações da conservação da quantidade de movimento e da conservação da massa devem ser resolvidas para caracterizar adequadamente os efeitos da condução e da convecção ([12]).

Um grande número de métodos numéricos pode ser encontrado na literatura para a resolução dessas equações e de modo geral estes métodos podem ser colocados em dois grandes grupos: métodos de malha fixa ([13]) e métodos de malha móvel ([14]). Nos métodos de malha móvel um conjunto de equações de conservação é aplicado separadamente a cada uma das fases. Condições de continuidade da temperatura e do fluxo de calor devem ser aplicadas à interface sólido-líquido. Devido ao movimento da interface ao longo do tempo, a malha computacional empregada deve ser modificada a cada instante de tempo para rastrear corretamente a localização da interface. Nesses métodos a equação da energia normalmente é formulada em termos da temperatura. Nos métodos de malha fixa ([15], [16]), um único conjunto de equações de conservação é empregado em todo o domínio computacional, tanto na fase líquida quanto na fase sólida. Condições de interface não são necessárias e a grande dificuldade neste caso decorre da condição de que as velocidades advindas da resolução da equação da conservação da quantidade de movimento devem se anular na região sólida do domínio. Algumas técnicas para atender a essa condição de velocidade nula no sólido podem ser encontradas em ([17]).

Uma grande área de aplicação do estudo de processos de mudança de fase é o caso específico da solidificação de materiais energéticos como o trinitrotolueno (TNT) que, no momento de sua propulsão, sofrem grandes acelerações e são submetidos a forças de inércia que podem, na presença de vazios no material solidificado, gerar sua detonação prematura ([3]). Dessa forma, é de grande interesse o estudo dos fenômenos envolvidos neste processo uma vez que sua adequada compreensão e capacidade de simulação computacional podem auxiliar na identificação precisa das causas destes defeitos e reduzir sua ocorrência.

Modelos numéricos vêm sendo desenvolvidos ao longo das últimas décadas visando a adequada simulação computacional desses processos como nos trabalhos de [1], [5], [18], e [19]. Nesses trabalhos, os autores procuram analisar como as formas de resfriamento de materiais energéticos levam a efeitos indesejáveis tais como a formação de vazios no interior do material solidificado, contração do material devido variações na densidade e desenvolvimento de tensões térmicas residuais, e propõem certas condições de resfriamento para minimizar esses efeitos. Para as análises, usam desde códigos especificamente desenvolvidos para este fim bem como a utilização de programas como o Fluent [20] e a implementação de UDFs (User Defined Functions) [21] que permite a utilização de rotinas não inclusas no Fluent.

1.3 Organização do trabalho

A presente dissertação está organizada em 6 capítulos. Após uma breve introdução e revisão bibliográfica sobre o problema de mudança de fase abordamos no Capítulo 2 o Problema de Stefan, sua formulação e solução analítica para problemas unidimensionais e apresentando uma solução numérica com a utilização do método dos volumes finitos em sua discretização. Em seguida, no Capítulo 3 são apresentadas as equações de balanço da mecânica dos fluidos necessárias a formulação de problemas de mudança de fase mais complexos. No Capítulo 4, examina-se com detalhes o método dos volumes finitos aplicados a problemas estacionários e transientes, englobando os casos de difusão pura e também de advecção/difusão. Essa formulação preliminar permite a construção de um esquema de discretização para as equações de Navier-Stokes. Estas equações possuem não-linearidades e acoplamento entre os campos de pressão e velocidade, problemas que podem ser tratados através de algoritmos iterativos como o SIMPLE. O Capítulo 5 trata do método da entalpia/porosidade, um método de malha fixa para a solução de problemas de mudança de fase em que efeitos da convecção natural na fase líquida possam ser levados em conta. Neste método, termos fonte são definidos nas equações de movimento e a equação da energia é formulada em termos da entalpia. Resultados obtidos com a utilização do programa Fluent são apresentados e discutidos. Por fim, no Capítulo 6 algumas conclusões finais são apresentadas e são abordadas algumas perspectivas de trabalhos futuros dando continuidade ao que foi estudado até o momento.

2 O PROBLEMA DE STEFAN

2.1 Introdução

Apresenta-se nesta seção a formulação do modelo matemático da classe de problemas de mudança de fase mais simples que envolvem um mínimo de efeitos físicos necessários para sua formulação. Estes modelos são conhecidos como problemas de Stefan clássicos ou simplesmente problemas de Stefan, nome dado em referência a J. Stefan, que em meados do século XIX formulou o problema de encontrar a distribuição de temperatura e o histórico da frente de solidificação em uma “placa” de água em solidificação. O estudo desta classe de problemas é a base para que problemas mais complexos possam ser modelados, incluindo efeitos inicialmente desprezados. A característica principal destes problemas é que além da distribuição de temperaturas, a forma e a localização da interface sólido-líquido são desconhecidas. Por esta razão, estes problemas são conhecidos como problemas de fronteira móvel ou problemas de fronteira livre. ([2]) O processo de mudança de fase aqui considerado envolve um material com **massa específica** constante ρ , **calor latente** L , **temperatura de fusão** T_m , **calor específico** constante e conhecido em cada fase, c_L e c_S , e **condutividades térmicas** k_L e k_S . A transferência de calor ocorre apenas isotropicamente por condução, tanto na fase líquida quanto na fase sólida. As fases são separadas por uma interface bem definida e sem espessura - uma isoterma à temperatura T_m , onde o calor latente é absorvido ou liberado.

2.1.1 Condução de calor

As principais quantidades relacionadas à condução de calor através de um material são **temperatura**, **calor** (energia térmica) e **fluxo de calor**. A temperatura é uma medida macroscópica do movimento das moléculas de um material, medida em graus Kelvin (K), Celsius ($^{\circ}C$) ou Fahrenheit ($^{\circ}F$).

O calor absorvido por um material sob pressão constante é chamado **entalpia** (energia térmica). Neste capítulo, a entalpia por unidade de massa (kJ/Kg) será denotada por e e seu valor por unidade de volume (kJ/m^3) denotado por E . Para um material puro aquecido sob pressão constante, não havendo variação de volume, a entalpia representa a

energia total e o calor absorvido está relacionado com o aumento da temperatura por

$$de = c(T) dT \quad (2.1)$$

A quantidade $c(T)$ é o **calor específico**, medido em $kJ/Kg^\circ C$. Fisicamente, o calor específico representa a quantidade de energia ou de calor que deve ser cedida ou removida a 1 Kg de um material para que haja uma variação de $1^\circ C$ em sua temperatura. Trata-se de uma propriedade do material com valor sempre positivo, podendo variar com a temperatura sendo normalmente maior na fase líquida que na fase sólida. O calor que acompanha uma variação na temperatura dado pela Eq. 2.1 é chamado **calor sensível** ou **entalpia sensível**, em contraste com o **calor latente de mudança de fase**, que é a energia absorvida ou liberada à temperatura constante (T_m , a temperatura de fusão). Da Eq. 2.1, a entalpia sensível por unidade de massa de material à temperatura T é dada por

$$\text{entalpia sensível} = \int_{T_m}^T c(\tau) d\tau \quad (2.2)$$

com $c = c_L$ se o material é líquido ($T > T_m$) e $c = c_S$ se é sólido ($T < T_m$). Em $T = T_m$, o material pode ser tanto sólido ou líquido, sendo identificado pela energia (entalpia) disponível; **líquido** a T_m contém **calor latente** L por unidade de massa, enquanto **sólido** a T_m não possui calor latente. Fixando a escala de energia $e = 0$ para o sólido a T_m , a **entalpia total** pode ser definida como a soma do calor latente total (entre 0 e L) com a entalpia sensível, ou seja:

$$e = \begin{cases} e^L(T) := L + \int_{T_m}^T c_L(\tau) d\tau, & \text{para } T > T_m \quad (\text{líquido}) \\ e^S(T) := 0 + \int_{T_m}^T c_S(\tau) d\tau, & \text{para } T < T_m \quad (\text{sólido}) \end{cases} \quad (2.3)$$

Assim, as fases podem ser caracterizadas tanto pela temperatura quanto pela entalpia por

$$\begin{array}{l} \text{sólido} \quad \iff \quad T < T_m \quad \iff \quad e < 0 \\ \text{líquido} \quad \iff \quad T > T_m \quad \iff \quad e > L \end{array} \quad (2.4)$$

Em $T = T_m$, a entalpia sofre um salto de magnitude L . Se $e = 0$ o material é sólido

enquanto que para $e = L$ o material é líquido. Qualquer região onde

$$T = T_m \quad \text{e} \quad 0 < e < L \quad (2.5)$$

é chamada de **zona mushy**, região que contém as fases líquida e sólida simultaneamente. Em termos dos problemas de Stefan, a região de transição de fase consiste de uma interface sólido-líquido bem definida de espessura nula e o salto da entalpia através da interface é

$$[[e]]_{\text{sólido}}^{\text{líquido}} = e^L(T_m) - e^S(T_m) = L \quad (2.6)$$

Se o calor específico for constante em cada fase, a expressão 2.3 simplifica para

$$e = \begin{cases} e^L(T) := L + c_L(T - T_m), & \text{para } T > T_m \quad (\text{líquido}) \\ e^S(T) := 0 + c_S(T - T_m), & \text{para } T < T_m \quad (\text{sólido}) \end{cases} \quad (2.7)$$

Na Figura 2.1 pode-se comparar os gráficos da expressão 2.7 e seu inverso, que ajudam a exemplificar bem o exposto sobre a descontinuidade da temperatura em T_m e sua relação com a entalpia do material.

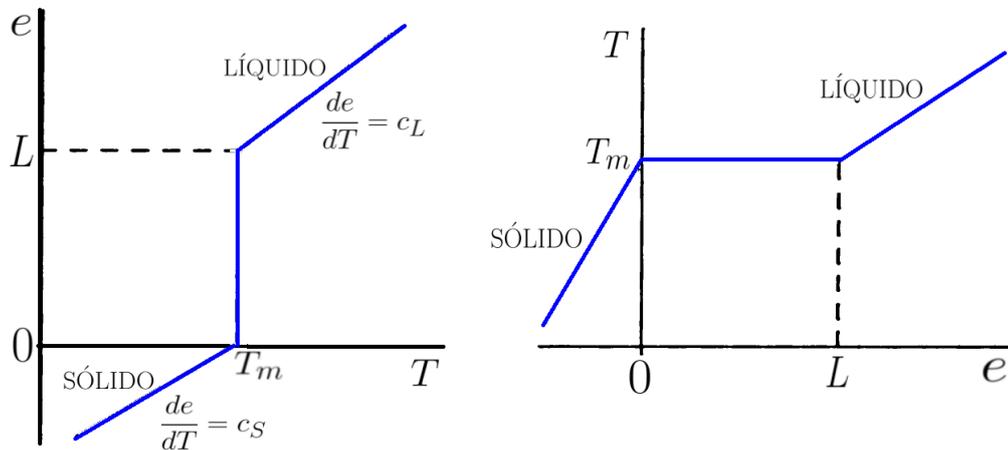


Figura 2.1: Relações de estado $e = e(T)$ - a esquerda e seu inverso, $T = T(e)$ com c_L e c_S constantes.

A quantidade de calor que atravessa uma unidade de área por unidade de tempo é chamada **fluxo de calor**, uma quantidade vetorial, denotada por \vec{q} cuja unidade de medida é $\text{kJ}/\text{sm}^2 = \text{kW}/\text{m}^2$ e sua dependência com a temperatura pode ser dada pela **Lei de Fourier**:

$$\vec{q} = -k\nabla T \quad (2.8)$$

onde o tensor \underline{k} é a **condutividade térmica** do material, medida em $kJ/ms^{\circ}C$ ou kW/mK . Assumindo que a condução de calor seja isotrópica, \underline{k} é definido apenas por um escalar $k > 0$ e a equação 2.8 pode ser escrita como

$$\vec{q} = -k\nabla T = -k \left(\frac{\partial T}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial T}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial T}{\partial z} \vec{k} \right) \quad (2.9)$$

em coordenadas cartesianas.

A **taxa de fluxo de calor** através de uma área de superfície A e vetor unitário normal \vec{n} é

$$(\vec{q} \cdot \vec{n})A = -\underline{k}\nabla T \cdot \vec{n}A \quad (2.10)$$

e representa o calor atravessando a área A na direção normal à superfície por unidade de tempo.

A lei fundamental da condução de calor é a **lei de conservação da energia**:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \nabla \cdot \vec{q} = F \quad (2.11)$$

onde F (em kJ/m^3s) é uma fonte volumétrica de calor (se $F > 0$) ou um sumidouro (se $F < 0$). Esta é a forma diferencial da **primeira lei da termodinâmica** escrita em termos da entalpia que, neste caso, representa a energia total e pode ser escrita em termos de taxas como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \int \int_V \rho e \, dV = \int \int \int_V F \, dV - \int \int_S \vec{q} \cdot \vec{n} \, dS \quad (2.12)$$

onde V é um volume, S sua superfície, e \vec{n} o vetor unitário normal a S direcionado para fora do volume. Pelo Teorema da Divergência e pelo fato do volume ser arbitrário, as equações 2.11 e 2.12 são equivalentes e, expressando e e \vec{q} em termos da temperatura por meio das relações 2.1 e 2.8, obtém-se a **equação da condução de calor**:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k\nabla T) + F \quad (2.13)$$

A equação 2.13 expressa a conservação de calor localmente por meio de condução isotrópica através do material de acordo com a lei de Fourier. Esta é uma equação diferencial parcial que rege o comportamento da temperatura $T(\vec{x}, t)$ na posição \vec{x} no

instante t válida para cada posição \vec{x} da região ocupada pelo material de massa específica ρ , calor específico c e condutividade k .

Quando a condutividade térmica k for constante, pode-se definir a **difusividade térmica** como

$$\alpha = \frac{k}{\rho c} \quad (m^2/s) \quad (2.14)$$

e rescrever a equação 2.13 na forma conhecida como **equação da difusão** ou **equação da condução de calor**:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T + F \quad (2.15)$$

2.1.2 Condição de Stefan

Nos processos de mudança de fase, de acordo com o descrito sobre a forma da interface sólido-líquido, a região ocupada pelo material em processo de transição de fase será dividida em duas regiões bem distintas, a fase sólida e a fase líquida, separadas por uma interface com forma bem definida e sem espessura, que será denotada por Σ . Além das condições de contorno tradicionais, é necessário definir-se uma condição que se aplique à interface sólido-líquido, uma vez que trata-se de um tipo de contorno. Na Figura 2.2 observa-se esquematicamente uma região em transição de fase, onde as fases sólida e líquida estão separadas por uma curva representando a interface.

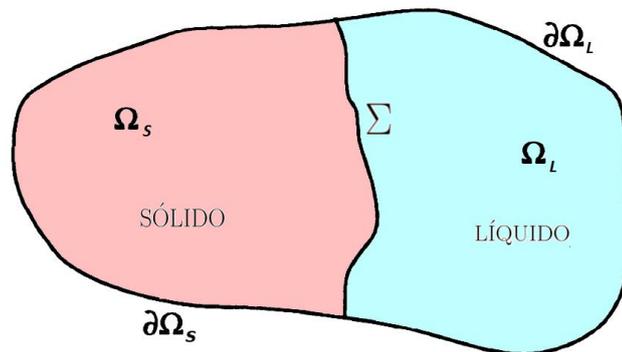


Figura 2.2: Fases sólida e líquida separadas por uma interface bem definida.

Na Figura 2.2, Ω_S e $\partial\Omega_S$ representam, respectivamente, o volume ocupado e a fronteira do material em estado sólido, e Ω_L e $\partial\Omega_L$ representam, respectivamente, o volume ocupado e a fronteira do material em estado líquido.

Em cada uma das fases, a equação do calor 2.15 precisa ser satisfeita. No sólido, as propriedades serão c_S e k_S e no líquido serão c_L e k_L . A interface constitui uma parte da fronteira para ambas as fases, sendo, portanto, necessária uma condição nesta interface para que a formulação do problema fique completa. Lembrando que a temperatura deve ser sempre contínua e que a interface constitui uma isoterma à T_m , pode-se escrever as seguintes relações para as fases líquida e sólida:

$$\lim_{\vec{x} \rightarrow \Sigma} T(\vec{x}, t) = T_m, \quad \text{com } \vec{x} \in \text{líquido} \quad \text{e} \quad \lim_{\vec{x} \rightarrow \Sigma} T(\vec{x}, t) = T_m, \quad \text{com } \vec{x} \in \text{sólido} \quad (2.16)$$

A condição adicional a respeito da localização da interface é conhecida com **condição de Stefan** e pode ser obtida através de um balanço de energia global. Para o caso unidimensional, considere um região delimitada por $0 \leq x \leq l$, de seção transversal A constante. Neste caso, calor pode ser adicionado ou removido através das faces $x = 0$ e $x = l$ de alguma maneira, resultando material em fase líquida em $0 \leq X(t)$ e em fase sólida em $X(t) \leq l$, regiões separadas por um ponto bem definido $X(t)$, que delimita a interface sólido-líquido, para cada instante $t > 0$. Assumindo a massa específica, os calores específicos e as condutividades térmicas constantes em cada fase, pode-se escrever as expressões para a entalpia total dada em 2.7 como uma expressão dada por ([2]):

$$E(t) = A \left[\int_0^{X(t)} (\rho c_L (T(x, t) - T_m) + \rho L) dx + \int_{X(t)}^l \rho c_S (T(x, t) - T_m) dx \right] \quad (2.17)$$

Através de um balanço global de calor pode-se escrever

$$\frac{dE}{dt} = \text{fluxo de calor total na região} = A[q(0, t) - q(l, t)] \quad (2.18)$$

onde $q(0, t)$ e $-q(l, t)$ representam os fluxos de calor através das faces $x = 0$ e $x = l$, respectivamente. Utilizando a regra da integral de Leibnitz às expressões 2.17 e 2.18 tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{A} \frac{dE}{dt} &= \rho c_L (T(X(t), t) - T_m) X'(t) + \int_0^{X(t)} \rho c_L \frac{\partial T}{\partial t}(x, t) dx + \\ &+ \rho L X'(t) - \rho c_S (T(X(t), t) - T_m) X'(t) + \int_{X(t)}^l \rho c_S \frac{\partial T}{\partial t}(x, t) dx \end{aligned} \quad (2.19)$$

Lembrando que $T(X(t), t) = T_m$, usando a equação do calor 2.15 e simplificando a notação para as derivadas, tem-se

$$\frac{1}{A} \frac{dE}{dt} = k_L T_x(X(t)^-, t) - k_L T_x(0, t) + \rho L X'(t) + k_S T_x(l, t) - k_S T_x(X(t)^+, t) \quad (2.20)$$

onde $T_x(X(t)^\mp, t)$ representa os valores de $T_x(x, t)$ quando $x \rightarrow X(t)^\mp$, ou seja, quando a posição x se aproxima da interface pela esquerda (-) ou pela direita (+). Como $-k_L T_x(0, t)$ e $+k_S T_x(l, t)$ são os fluxos $q(0, t)$ e $-q(l, t)$, logo, das equações 2.18 e 2.20 obtemos a chamada **condição de Stefan**:

$$\rho L X'(t) = -k_L T_x(X(t)^-, t) + k_S T_x(X(t)^+, t) \quad (2.21)$$

A relação 2.21 expressa que a taxa de variação no calor latente $\rho L X'(t)$ é igual a quantidade pela qual o fluxo de calor sofre um salto através da interface.

2.1.3 O problema de Stefan

O conteúdo exposto nas seções anteriores permite a formulação matemática de um processo de mudança de fase - o chamado problema de Stefan que pode ser definido como a seguir:

Uma região, definida por $0 \leq x \leq l$, inicialmente sólida à temperatura $T_{inic} < T_m$, é fundida impondo uma temperatura $T_h > T_m$ na face $x = 0$ e mantendo a face oposta, $x = l$, isolada. As propriedades termofísicas, ρ , c_L , k_l , c_S , k_s , α_L , α_S são assumidas constantes e conhecidas, e a interface sólido-líquido bem definida ocorrendo em $x = X(t)$.

A Figura 2.3 a seguir ilustra esquematicamente o processo físico descrito pelo problema de Stefan de duas fases.

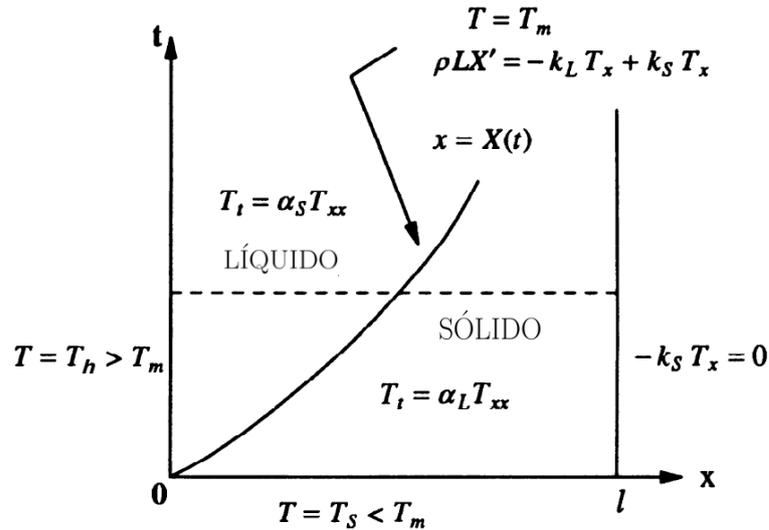


Figura 2.3: Diagrama espaço-tempo para o problema definido.

Para cada instante de tempo t a fase sólida ocupa a região $[0, X(t))$ e a fase líquida ocupa a região $(X(t), l]$. O ponto $x = X(t)$ representa a localização da interface, delimitando as fases sólida e líquida ao longo do tempo. Pode-se então descrever formalmente o problema de Stefan da seguinte maneira:

Encontrar a temperatura $T(x, t)$, para $0 \leq x \leq l$ e $t > 0$, e a posição da interface $X(t)$, para $t > 0$, satisfazendo:

Equações diferenciais:

$$T_t = \alpha_L T_{xx}, \quad \text{para } 0 < x < X(t), \quad t > 0 \quad (\text{região líquida}) \quad (2.22a)$$

$$T_t = \alpha_S T_{xx}, \quad \text{para } X(t) < x < l, \quad t > 0 \quad (\text{região sólida}) \quad (2.22b)$$

Condições de interface:

$$T(X(t), t) = T_m, \quad \text{para } t > 0 \quad (2.22c)$$

$$\rho L X'(t) = -k_L T_x(X(t)^-, t) + k_S T_x(X(t)^+, t), \quad \text{para } t > 0 \quad (2.22d)$$

Condições iniciais:

$$X(0) = 0 \quad (2.22e)$$

$$T(x, 0) = T_h < T_m, \quad \text{para } 0 \leq x \leq l \quad (\text{material inicialmente sólido}) \quad (2.22f)$$

Condições de contorno:

$$T(0, t) = T_h > T_m, \quad \text{para } t > 0 \quad (2.22g)$$

$$-k_S T_x(l, t) = 0, \quad \text{para } t > 0 \quad (2.22h)$$

onde as derivadas parciais espaciais estão denotadas por T_x e T_{xx} indicando primeira e segunda derivada, respectivamente.

2.2 Solução analítica dos Problemas de Stefan

2.2.1 Introdução

Nesta seção apresenta-se a formulação dos problemas de Stefan de uma fase e de duas fases, dois dos casos mais simples de problemas de mudança de fase que apresentam soluções analíticas.

Ainda que problemas de Stefan possam ser formulados para casos em duas ou três dimensões, soluções analíticas não estão disponíveis nesses casos. Tais problemas só apresentam soluções analíticas em casos extremamente limitados, envolvendo geometria unidimensional, com propriedades físicas do material de mudança de fase consideradas constantes em cada fase, temperatura de mudança de fase constante durante o processo de fusão/solidificação, sem fontes ou sumidouros de calor, transferência de calor apenas por condução isotrópica, sem fluxo de material, a interface entre as fases tendo espessura considerada nula e sendo uma isoterma à temperatura de mudança de fase.

2.2.2 Problema de Stefan de uma fase

O problema de Stefan de uma fase é o mais simples modelo de problema de mudança de fase que apresenta solução analítica. O processo de solução é baseado na solução de similaridade de Neumann envolvendo a função erro. A expressão “uma fase” refere-se ao fato de que apenas uma das fases é considerada “ativa” no processo enquanto a outra fase é mantida a temperatura de fusão T_m . O modelo físico deste problema pode ser descrito como a seguir:

Fusão de uma região semi-infinita, $0 \leq x < \infty$, inicialmente sólida à temperatura de fusão, T_m , impondo-se uma temperatura constante $T_h > T_m$ na face $x = 0$. Propriedades

físicas, ρ , c_L , k_L , L , $\alpha_L = k_L/\rho c_L$, todas constantes.

Este problema pode ser realizado fisicamente considerando-se um tubo de comprimento extremamente longo, de modo que a área de sua seção transversal possa ser considerada desprezível em relação ao seu comprimento. Esta característica nos permite considerar este tubo como semi-infinito. Seu interior está preenchido com um material inicialmente sólido e à temperatura de fusão. Sua superfície lateral encontra-se perfeitamente isolada. Uma de suas extremidades é exposta a uma fonte de calor enquanto a outra será considerada distante de modo a nunca ser alcançada pela frente de fusão durante o tempo de realização do experimento. A Figura 2.4 ilustra tal experimento.

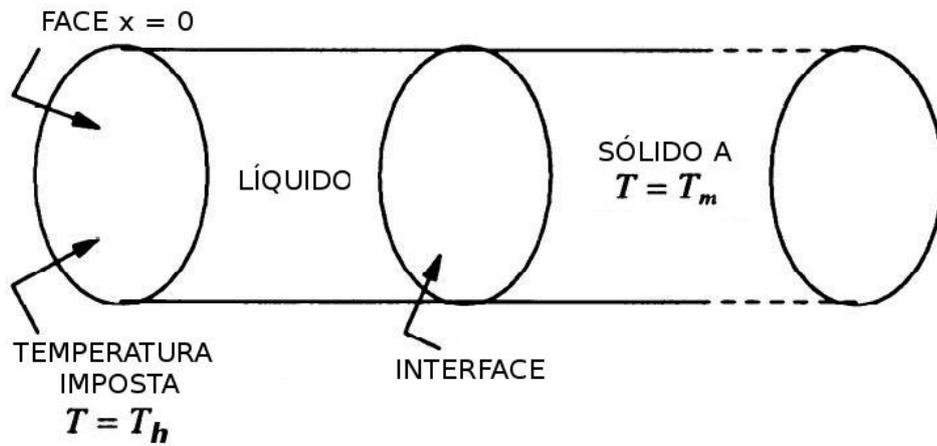


Figura 2.4: Ilustração do problema de Stefan de uma fase - fusão.

O modelo matemático correspondente ao problema físico descrito acima é definido a seguir.

Encontrar $T(x, t)$ e $X(t)$ tal que:

$$T_t = \alpha_L T_{xx}, \quad \text{para } 0 < x < X(t), \quad t > 0; \quad (2.23)$$

$$T(X(t), t) = T_m, \quad \text{para } t \geq 0; \quad (2.24)$$

$$\rho L X'(t) = -k_L T_x(X(t), t), \quad \text{para } t > 0; \quad (2.25)$$

$$X(0) = 0, \quad (\text{material inicialmente completamente sólido}); \quad (2.26)$$

$$T(0, t) = T_h > T_m, \quad \text{para } t > 0 \quad (2.27)$$

2.2.3 Solução de Neumann

Para a solução do problema tal como posto pelas equações anteriores assume-se que as duas variáveis independentes, x e t , possam ser combinadas e escritas como uma única variável $\eta = \eta(x, t)$. Chamamos η de variável de similaridade e o método de solução do problema pelo emprego desta variável de solução de similaridade. Para o problema em questão, a variável de similaridade adequada é ([2, 6])

$$\eta = \eta(x, t) = \frac{x}{2\sqrt{\alpha_L t}} \quad (2.28)$$

Supondo que a solução de 2.23 possa ser expressa por $T_L = T_L(\eta)$, por meio da regra da cadeia pode-se reescrever 2.23 como:

$$\frac{\partial^2 T_L}{\partial \eta^2} + 2\eta \frac{\partial T_L}{\partial \eta} = 0 \quad (2.29)$$

Assim, a equação diferencial parcial Eq. 2.23 é transformada na equação diferencial ordinária Eq. 2.29 que tem sua solução da forma:

$$T_L = A \operatorname{erf}(\eta) + B, \quad (2.30)$$

sendo A e B constantes e $\operatorname{erf}(z)$ denota a função erro dada por:

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-s^2} ds \quad (2.31)$$

Aplicando-se a condição de contorno (2.27) na equação (2.30), obtém-se $B = T_h$. Usando-se (2.24) e (2.31) na equação (2.30), tem-se:

$$T_m = A \operatorname{erf}\left(\frac{X}{2\sqrt{\alpha_L t}}\right) + T_h, \quad (2.32)$$

de onde obtém-se:

$$A = \frac{T_m - T_h}{\operatorname{erf}\left(\frac{X}{2\sqrt{\alpha_L t}}\right)} \quad (2.33)$$

Definindo-se X como $X = x|_{\eta=\lambda}$ temos que:

$$X = 2\lambda\sqrt{\alpha_L t}, \quad (2.34)$$

pode-se determinar A da Eq. (2.33) como:

$$A = \frac{T_m - T_h}{\operatorname{erf}(\lambda)} \quad (2.35)$$

Substituindo-se (2.35) em (2.30), obtém-se:

$$T_L(x, t) = T_h - (T_h - T_m) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_L t}}\right)}{\operatorname{erf}(\lambda)} \quad (2.36)$$

Substituindo-se (2.34) e (2.36) na equação (2.25), obtém-se:

$$k_L \frac{T_m - T_h}{\operatorname{erf}(\lambda)} \left[\frac{d(\operatorname{erf}(\eta))}{d\eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right]_X = \rho_L L \frac{2\lambda\sqrt{\alpha_L}}{2\sqrt{t}} \quad (2.37)$$

Sendo

$$\frac{d}{d\eta}(\operatorname{erf}(\eta)) = \frac{2}{\pi} e^{-\eta^2} \quad (2.38)$$

e utilizando-se a equação (2.28), tem-se:

$$\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) = \frac{c_L(T_m - T_h)}{L\sqrt{\pi}} \quad (2.39)$$

Então, o valor para λ é obtido através da solução da equação (2.39) pelo método iterativo de Newton-Raphson e podemos determinar a temperatura da fase líquida dada pela equação (2.36):

$$T_L(x, t) = T_h - (T_h - T_m) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_L t}}\right)}{\operatorname{erf}(\lambda)}, \quad (2.40)$$

e a posição da interface, dada pela equação (2.34):

$$X(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha_L t}. \quad (2.41)$$

Da equação 2.39, define-se a razão entre a entalpia sensível, $c\Delta T$ e o calor latente de fusão L como o **número de Stefan**:

$$Ste = \frac{c\Delta T}{L} = \frac{c(T_h - T_m)}{L} \quad (2.42)$$

Essencialmente, o valor do número de Stefan indica a adequabilidade de um determinado método para analisar um dado processo de transferência de calor. Valores grandes de St

indicam que o processo será predominante por condução de calor pura. Pequenos valores de St indicam que o processo será dominado pela mudança de fase.

A Figura 2.5 a seguir ilustra o diagrama espaço-tempo para o problema de Stefan de uma fase.

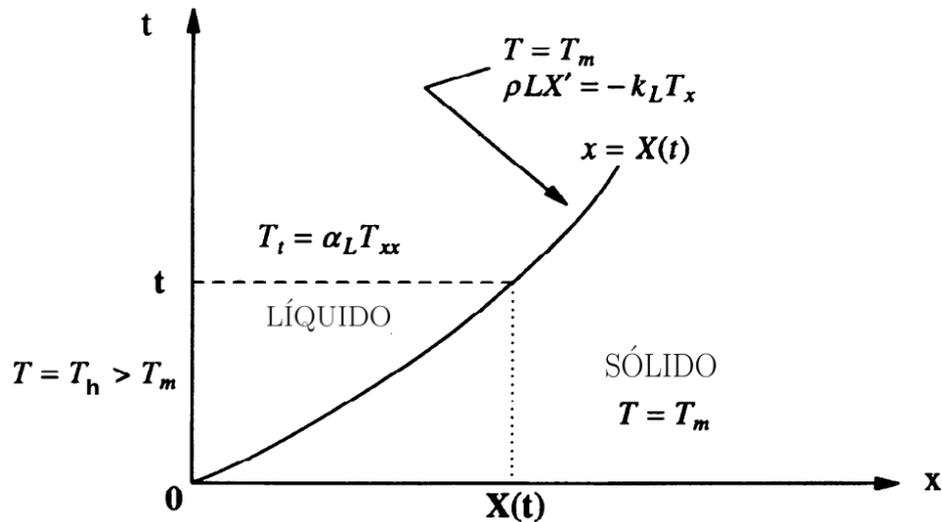


Figura 2.5: Problema de Stefan de uma fase.

2.2.4 Problema de Stefan de duas fases

No problema de Stefan de uma fase, conforme descrito anteriormente, uma das fases é considerada “ativa” no processo enquanto a temperatura da outra fase é mantida à temperatura constante, T_m , eliminando-se a necessidade de formular uma equação de condução de calor para esta fase. Assim o problema de Stefan de uma fase consiste de uma região semi-infinita com temperatura inicial uniforme T_m com o material inicialmente sólido (para o problema de fusão) ou líquido (para o problema de solidificação).

O problema de Stefan de duas fases é caracterizado pelo fato de que ambas as fases, sólida e líquida, participam efetivamente do processo, com suas temperaturas variando, sendo necessário utilizar a equação de condução para cada uma das fases. Considerando-se o caso da fusão, o material é então inicialmente sólido, mas sua temperatura inicial deve ser um valor $T_S < T_m$.

O modelo físico de um problema de Stefan de duas fases para o caso da fusão pode ser descrito como a seguir.

Fusão de uma região semi-infinita, $0 \leq x < \infty$, inicialmente sólida a uma temperatura uniforme, $T_c < T_m$, impondo-se uma temperatura constante $T_h > T_m$ na face $x = 0$.

Propriedades físicas, ρ , c_L , k_L , c_S , k_S , L , $\alpha_L = k_L/\rho c_L$, $\alpha_S = k_S/\rho c_S$ todas constantes.

Observações semelhantes as realizadas para o problema de uma fase podem ser descritas para a realização de um experimento do problema de duas fases aqui descrito e o modelo matemático que descreve o problema pode ser formulado como a seguir.

Encontrar $T(x, t)$ e $X(t)$ tal que:

$$T_t = \alpha_L T_{xx}, \quad \text{para } 0 < x < X(t), \quad t > 0; \quad (\text{fase líquida}) \quad (2.43)$$

$$T_t = \alpha_S T_{xx}, \quad \text{para } X(t) < x, \quad t > 0; \quad (\text{fase sólida}) \quad (2.44)$$

$$T(X(t), t) = T_m, \quad \text{para } t \geq 0; \quad (\text{temperatura da interface}) \quad (2.45)$$

$$\rho L X'(t) = -k_L T_x(X(t)^-, t) + k_S T_x(X(t)^+, t), \quad \text{para } t > 0; \quad (\text{Condição de Stefan}) \quad (2.46)$$

$$T(x, 0) = T_c < T_m, \quad X(0) = 0, \quad x > 0 \quad (\text{condições iniciais}); \quad (2.47)$$

$$T(0, t) = T_h > T_m, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} T(x, t) = T_c \quad \text{para } t > 0 \quad (\text{condições de contorno}) \quad (2.48)$$

A Figura 2.6 a seguir ilustra o diagrama espaço-tempo do problema de Stefan de duas fases.

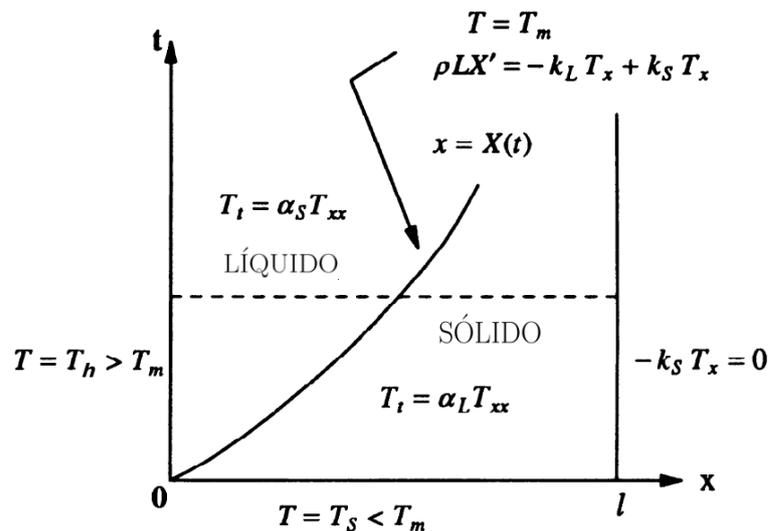


Figura 2.6: Problema de Stefan de duas fases.

A estrutura deste problema permite a obtenção de uma solução de similaridade de Neumann seguindo passos idênticos àqueles utilizados na solução do problema de Stefan de uma fase. A solução para o problema de Stefan de duas fases é dada por [2]:

Posição da interface:

$$X(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha_L t}, \quad \text{para } t > 0 \quad (2.49)$$

Temperatura da fase líquida $0 < x < X(t)$, e $t > 0$:

$$T(x, t) = T_h - (T_h - T_m) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_L t}}\right)}{\operatorname{erf}\lambda} \quad (2.50)$$

Temperatura da fase sólida $x > X(t)$, e $t > 0$:

$$T(x, t) = T_c + (T_m - T_c) \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_S t}}\right)}{\operatorname{erfc}(\lambda\sqrt{\alpha_L/\alpha_S})} \quad (2.51)$$

Na equação (2.51), $\operatorname{erfc}(x)$ é a função erro complementar, definida por

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) \quad (2.52)$$

Ainda, em (2.50) e (2.51), λ é a solução da equação transcendental

$$\frac{St_L}{e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda)} - \frac{St_S}{\nu e^{\nu^2 \lambda^2} \operatorname{erfc}(\nu\lambda)} = \lambda\sqrt{\pi}, \quad (2.53)$$

com

$$St_L = \frac{c_L(T_h - T_m)}{L}, \quad St_S = \frac{c_S(T_m - T_c)}{L} \quad \text{e} \quad \nu = \sqrt{\frac{\alpha_L}{\alpha_S}} \quad (2.54)$$

ou seja, o número de Stefan é a razão entre o calor sensível e o calor latente de fusão.

2.3 Solução numérica de problemas de Stefan

Uma das principais dificuldades na solução de problemas de mudança de fase é o fato de não ser possível caracterizar corretamente o estado físico da matéria apenas por sua temperatura. A razão disso é que três situações distintas podem ocorrer quando um material está à temperatura de mudança de fase T_m : ele pode estar completamente sólido, completamente líquido ou estar mudando de fase, apresentando ambas as fases simultaneamente.

Uma alternativa para esse problema é escrever as equações governantes em termos de propriedades que não apresentem valores constantes a temperatura de mudança de fase, e, como pode ser observado na Figura 2.7, a entalpia possui esta característica de variar durante mudança de fase, indicando através de uma descontinuidade em seu valor a ocorrência da mudança de fase.

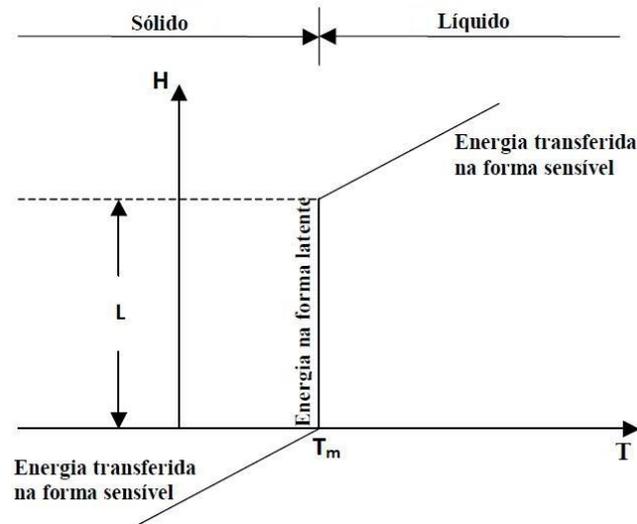


Figura 2.7: Comportamento da entalpia em função da temperatura.

Tomando como exemplo um caso de fusão, enquanto $T < T_m$, a energia cedida ao material é usada para elevar sua temperatura a uma taxa que depende do calor específico c_S do material no estado sólido. Quando a temperatura alcança o valor $T = T_m$, o material ainda estará completamente sólido à temperatura de mudança de fase, enquanto que a energia terá valor igual a zero. Se o fornecimento de energia prosseguir a partir deste ponto, ele não provoca a elevação da temperatura mas causará a mudança de fase do material. Quando o fornecimento de energia fizer com que a entalpia tenha o seu valor igual ao calor latente de fusão L , teremos o material completamente líquido e à temperatura de mudança de fase. A partir deste ponto, o fornecimento de energia ao corpo continuará elevando o valor da temperatura por condução.

Assim, fica claro que a entalpia não apresenta valor constante na temperatura de mudança de fase e pode-se formular equações em termos desta propriedade termodinâmica que nos permite traçar o processo de mudança de fase. Lembrando que a entalpia de um material pode ser escrita como a soma do calor sensível com o calor latente (para cada fase) através da equação 2.3 tem-se que a entalpia por unidade de volume $E = \rho e$ pode

ser escrita como:

$$E(x, t) = \begin{cases} \int_{T_m}^{T(x,t)} \rho c_S(\tau) d\tau & , \quad T(x, t) < T_m \quad (\text{sólido}) \\ \int_{T_m}^{T(x,t)} \rho c_L(\tau) d\tau + \rho L & , \quad T(x, t) > T_m \quad (\text{líquido}). \end{cases} \quad (2.55)$$

Quando o calor específico for considerado constante em cada fase, a equação anterior simplifica-se para

$$E(x, t) = \begin{cases} \rho c_S(T(x, t) - T_m) & , \quad T(x, t) < T_m \quad (\text{sólido}) \\ \rho c_L(T(x, t) - T_m) + \rho L & , \quad T(x, t) > T_m \quad (\text{líquido}) \end{cases} \quad (2.56)$$

Resolvendo a equação (2.56) para T , obtém-se

$$T = \begin{cases} T_m + \frac{E}{\rho c_S}, & E \leq 0 \quad (\text{sólido}) \\ T_m & 0 < E < \rho L \quad (\text{interface}) \\ T_m + \frac{E - \rho L}{\rho c_L}, & E \geq \rho L \quad (\text{líquido}) \end{cases} \quad (2.57)$$

Assim, quando $T = T_m$, a entalpia admite valores de 0 a ρL , sendo que: se $E = 0$, o material é sólido; se $E = \rho L$, é líquido; e qualquer ponto onde $T = T_m$ e $0 < E < \rho L$ é um ponto da denominada região ou zona *mushy* - região que contém a interface.

Desse modo, pode-se expressar a conservação da energia através do balanço integral de calor em volumes arbitrários e nos intervalos de tempo:

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_V E dV \right) dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_{\partial V} -\vec{q} \cdot \vec{n} dS dt. \quad (2.58)$$

sendo $\vec{q} = -k\nabla T$ o fluxo de calor, e $-\vec{q} \cdot \vec{n}$ o fluxo de calor que entra no volume V através do contorno ∂V e \vec{n} o vetor normal que aponta para fora de ∂V .

2.3.1 Discretização

Apresenta-se nesta seção o método dos volumes finitos aplicado, particularmente, ao problema de Stefan através da utilização da entalpia. No Capítulo 3 da dissertação este método será generalizado para problemas bi e tri-dimensionais discutindo-se com mais detalhes suas diversas possibilidades e variações.

O primeiro passo é a subdivisão do domínio ocupado pelo material em uma quantidade finita de elementos V_j , chamados de volumes de controle. Em seguida, aplica-se a equação (2.58) em cada um dos volumes para obter o balanço de calor discreto. Em um problema unidimensional de fusão, o domínio $\Omega = x \in [0, l]$ inicialmente sólido à temperatura T_m é dividido em M intervalos de mesmo comprimento Δx . Se x_j é a posição do centro do volume V_j e t_n é o instante inicial t_0 acrescido de n intervalos de tempo iguais, ou seja, $t_n = n\Delta t$, então:

$$T(x_j, 0) = T_j^0 = T_m, \quad \forall x \in \Omega, \quad j = 1, 2, \dots, M \quad (2.59)$$

Sendo T_j e E_j a temperatura e a entalpia, respectivamente, em um V_j , então:

$$V_j \quad \text{é sólido se} \quad \begin{cases} E_j < 0 & (T_j < T_m) \\ E_j = 0 & (T_j = T_m) \end{cases}$$

$$V_j \quad \text{é líquido se} \quad \begin{cases} E = \rho L & (T_j = T_m) \\ E_j > \rho L & (T_j > T_m) \end{cases} \quad (2.60)$$

Os volumes nos quais $T_j = T_m$ e $0 < E_j < \rho L$ constituem a chamada zona *mushy*, onde coexistem as fases sólida e líquida. Para o caso unidimensional, a expressão para a lei de conservação de energia na sua forma discreta para o volume de controle $V_j = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}] \times A$, obtida a partir da equação (2.58) é

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(A \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} E(x, t) dV \right) dt = - \int_t^{t+\Delta t} A \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} q_x(x, t) dx dt \quad (2.61)$$

Designando por $q_{j\pm 1/2}$ o fluxo de calor na interface entre o meio externo e o primeiro ou o último volume V_j ou entre dois volumes e considerando-se a aproximação $q^{n+\theta} =$

$(1 - \theta)q^n + \theta q^{n+1}$ obtém-se:

$$(E_j^{n+1} - E_j^n)\Delta x = \Delta t \left(q_{j-1/2}^{n+\theta} - q_{j+1/2}^{n+\theta} \right) \quad (2.62)$$

onde se $\theta = 0$ o algoritmo será explícito e se $0 < \theta \leq 1$, o algoritmo será implícito.

Se, em $x = 0$, o domínio está submetido a um fluxo convectivo, que é proporcional à diferença de temperatura entre a superfície do material e a temperatura ambiente imposta T_∞ , tem-se:

$$q(0, t) = h[T_\infty(t) - T_0(t)], \quad t > 0 \quad \rightarrow \quad q_{\frac{1}{2}}^{n+\theta} = -\frac{T_1^{n+\theta} - T_\infty^{n+\theta}}{\frac{1}{h} + R_{\frac{1}{2}}}, \quad R_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \frac{\Delta x_1}{k_1}, \quad (2.63)$$

onde h é o coeficiente de transferência de calor convectivo e depende do material que constitui o domínio do fluido que fornece calor. Além disso, em $x = l$, a barra é termicamente perfeitamente isolada, o que significa que esse lado encontra-se submetido a um fluxo de calor imposto igual a zero:

$$q(l, t) = q_{M+\frac{1}{2}}^{n+\theta} = 0, \quad t > 0. \quad (2.64)$$

Supondo que a interface sólido/líquido tenha espessura nula, em cada instante de tempo ela estará presente em apenas uma célula, a célula *mushy*, onde as fases sólida e líquida coexistem, definindo-se para cada célula a chamada fração líquida no volume em questão, determinada por:

$$\lambda_j = \frac{E_j}{\rho L}. \quad (2.65)$$

Assim, a expressão para o cálculo da entalpia no elemento j no instante $n + 1$ é:

$$E_j^{n+1} = E_j^n + \frac{\Delta t_n}{\Delta x_j} \left[q_{j-\frac{1}{2}}^{n+\theta} - q_{j+\frac{1}{2}}^{n+\theta} \right], \quad j = 1, 2, \dots, M \quad (2.66)$$

onde

$$q_{j-\frac{1}{2}}^{n+\theta} = -\frac{T_j^{n+\theta} - T_{j-1}^{n+\theta}}{R_{j-\frac{1}{2}}}, \quad \text{sendo} \quad R_{j-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x}{k_{j-1}} + \frac{\Delta x}{k_j} \right), \quad j = 2, 3, \dots, M \quad (2.67)$$

em que k_j é a condutividade térmica do elemento V_j e $R_{j-1/2}$ é a resistividade térmica entre os elementos V_{j-1} e V_j .

Do resultado obtido para o elemento, se $E_j^{n+1} \leq 0$ ou $E_j^{n+1} \geq \rho L$, obtém-se a temperatura no elemento através da equação 2.56.

$$T_j^{n+1} = T_m + \frac{E_j^{n+1}}{\rho c_S}, \quad \text{se } E_j^{n+1} \leq 0 \quad (\text{sólido}) \quad (2.68)$$

$$T_j^{n+1} = T_m + \frac{E_j^{n+1} - \rho L}{\rho c_L}, \quad \text{se } E_j^{n+1} \geq \rho L \quad (\text{líquido}) \quad (2.69)$$

Se $0 < E_j^{n+1} < \rho L$, então o elemento é *mushy* e a temperatura é T_m .

Para encontrar a posição da frente de mudança de fase X^{n+1} a partir do valor de E_j^{n+1} obtido no volume *mushy*, calcula-se a fração líquida no volume por meio da equação (2.65), de modo que, se $j = m$ é a célula *mushy*, então a interface estará em

$$X^{n+1} = x_{m-1}^{n+1} + \lambda_j \Delta x \quad (2.70)$$

2.3.2 Resultados Numéricos

Foram empregados os algoritmos explícito ($\theta = 0$) e implícito (para $\theta = 1$) do método da entalpia, descrito anteriormente para a solução do problema de Stefan de uma fase. Os resultados obtidos são comparados com a solução analítica dada pela equação 2.40. A solução numérica foi obtida para um domínio unidimensional finito $\Omega = [0, 1]$, com $c_S = c_L = k_S = k_L = \rho = 1$, $L = 10$, $T_m = 0$ e $T(0, t) = T_\infty = 1$. Com estes valores, resolvendo a equação (2.39) pode-se obter $\lambda = 0,22$.

A diferença dos dois algoritmos decorre principalmente do método implícito ser incondicionalmente estável, enquanto que para se garantir a estabilidade do método explícito é necessário que o intervalo de tempo de cada iteração obedeça a relação

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{\alpha} \quad (2.71)$$

Nas Figuras 2.8, 2.9 e 2.10, são mostrados os resultados para variação da temperatura ao longo do tempo e do domínio do problema, para o método explícito, implícito e para a solução analítica, respectivamente.

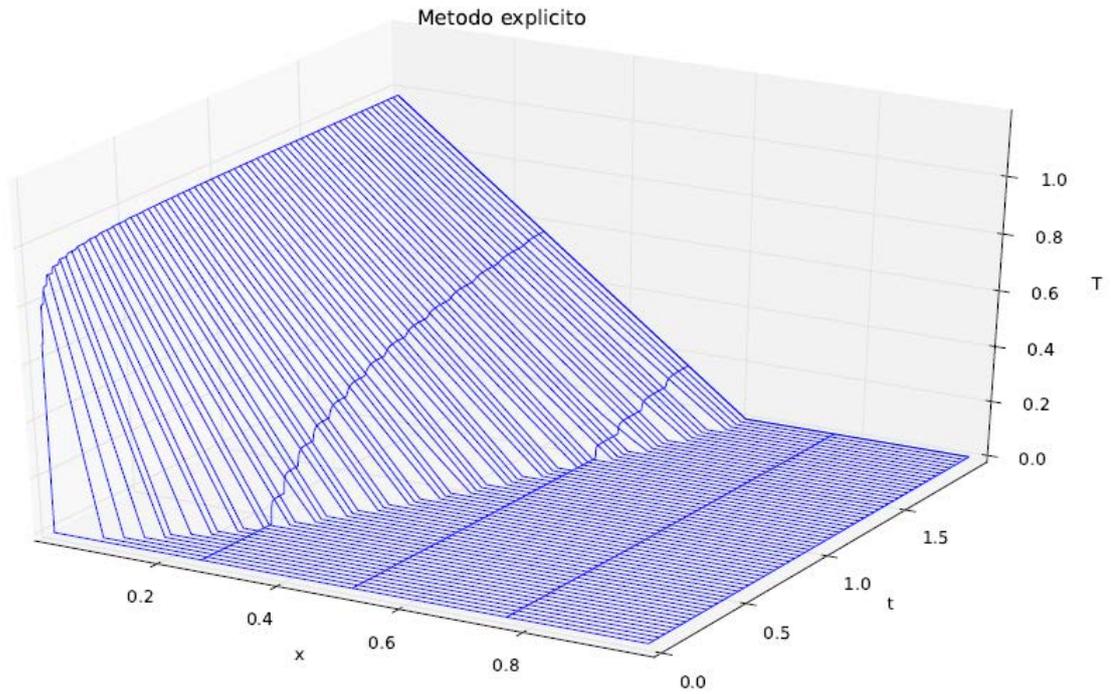


Figura 2.8: Perfil de temperaturas, $\Delta x = 0.025$ e $\Delta t = 0.0003125$ (método explícito).

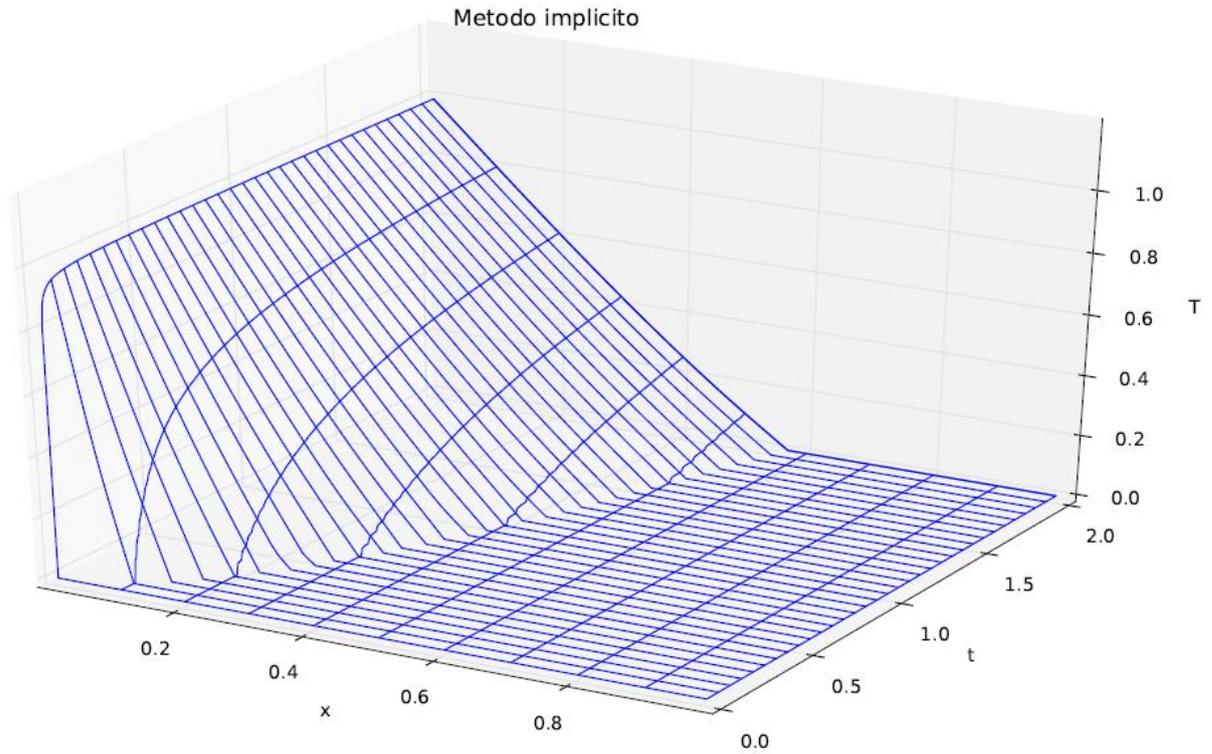


Figura 2.9: Perfil de temperaturas, $\Delta x = 0.01$ e $\Delta t = 0.000625$ (método implícito).

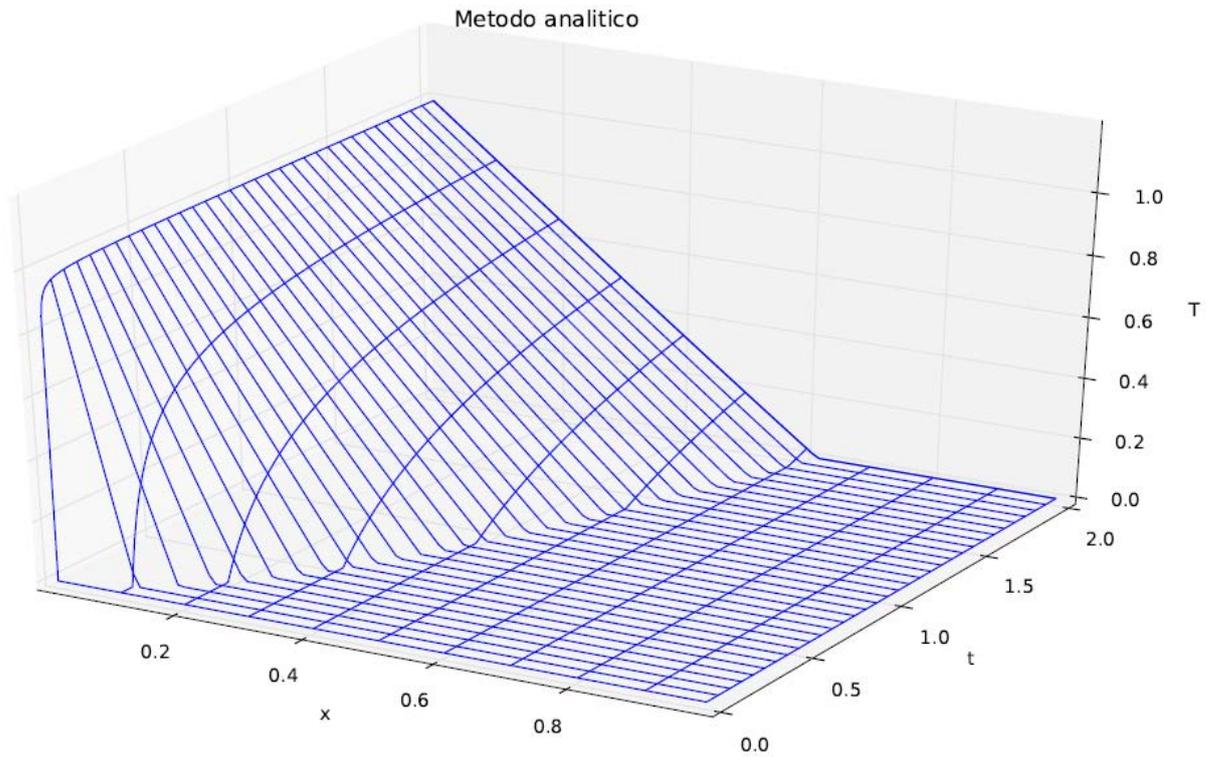


Figura 2.10: Perfil de temperaturas (solução analítica).

A Figura 2.11 apresenta o comportamento da temperatura calculada pelo método explícito ao longo do tempo para $x = 0.1375$. Pode-se observar que a curva obtida acompanha a solução analítica satisfatoriamente.

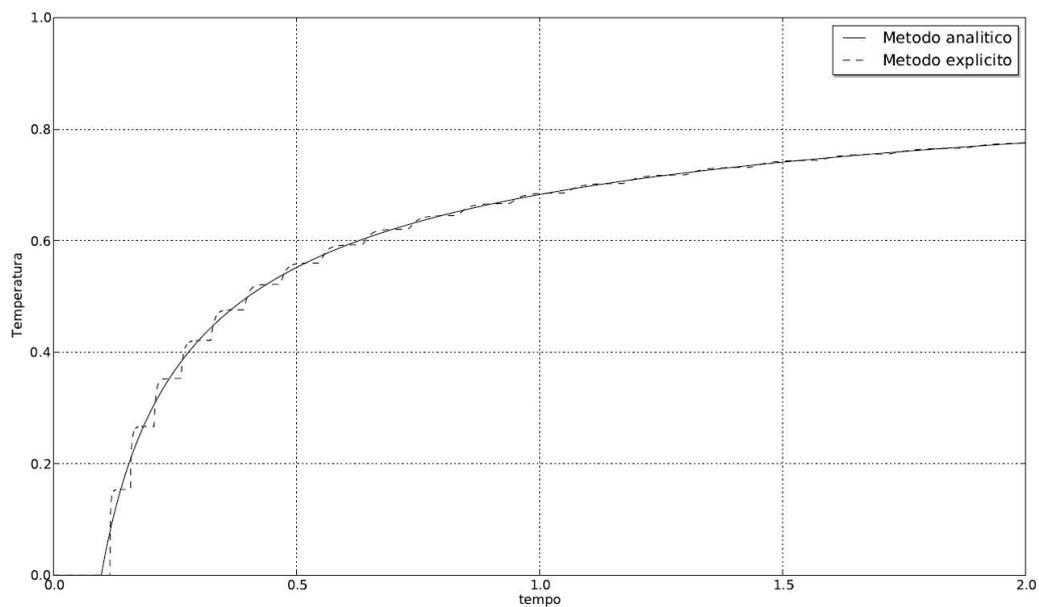


Figura 2.11: Perfil de temperaturas ao longo do tempo, $x = 0.1375$, $\Delta x = 0.025$ e $\Delta t = 0.0003125$ (método explícito).

Na Figura 2.12, é mostrado o comportamento da frente de fusão ao longo do tempo

obtido pelo método explícito, com $\Delta x = 0.05$. Percebe-se que, apesar da discretização espacial estar pouco refinada, a frente de fusão encontrada é bem próxima a da solução analítica. As Figuras 2.13 e 2.14, mostradas a seguir, apresentam o perfil de temperaturas obtido para $t = 2.0$ respectivamente para a solução com os métodos explícito e implícito.

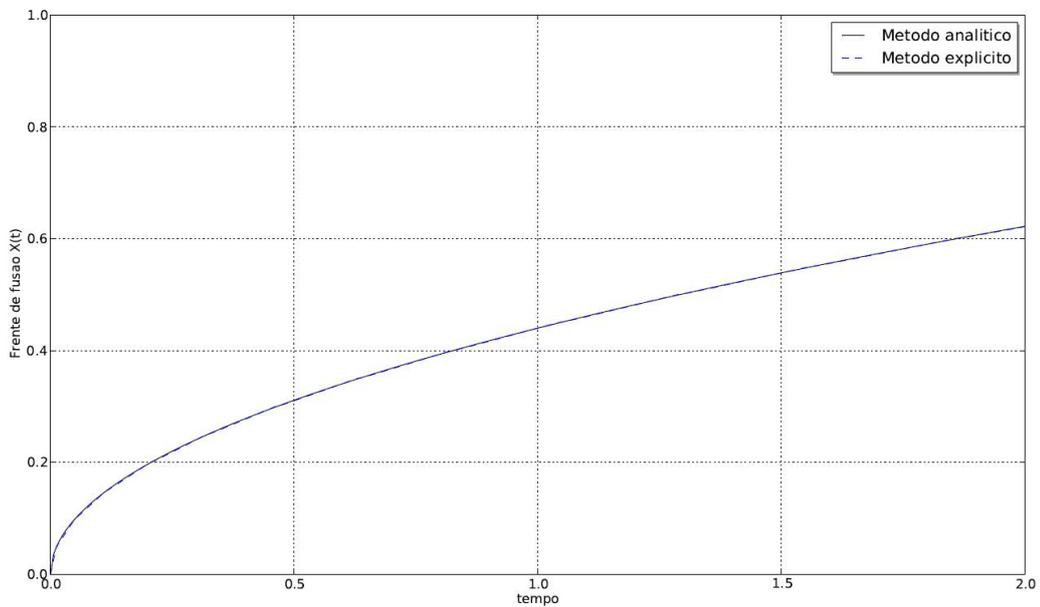


Figura 2.12: Frente de fusão, $\Delta x = 0.05$ e $\Delta t = 0.00125$ (método explícito).

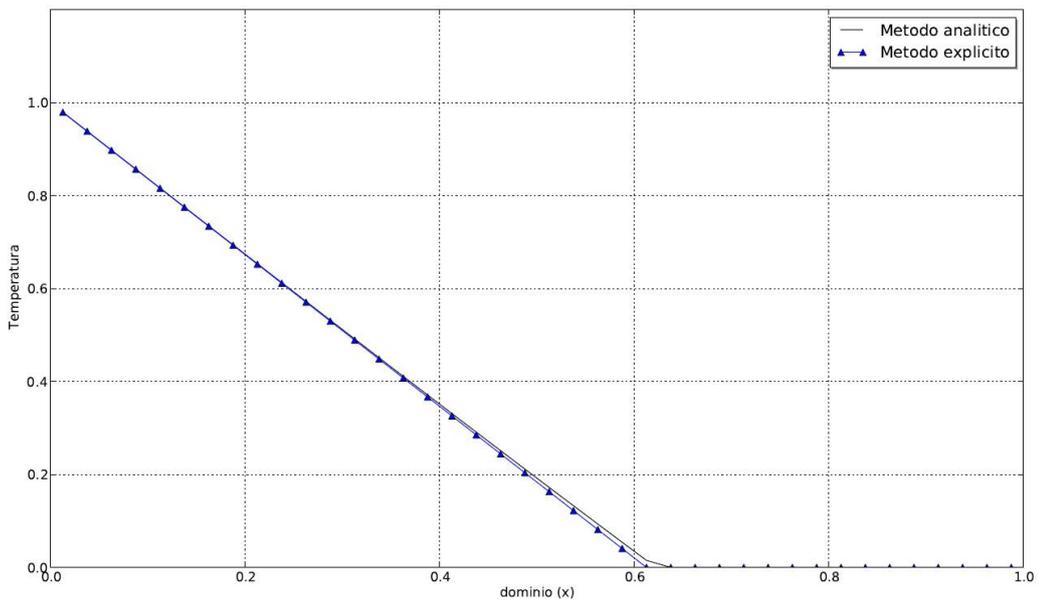


Figura 2.13: Perfil de temperaturas em $t = 2.0$, $\Delta x = 0.025$ e $\Delta t = 0.0003125$ (método explícito).

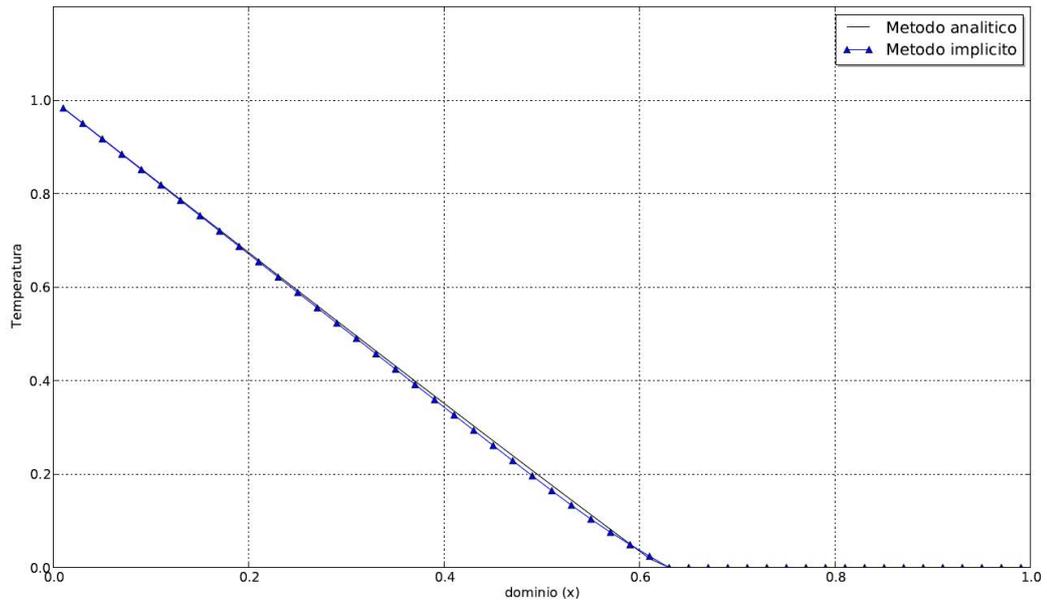


Figura 2.14: Perfil de temperaturas em $t = 2.0$, $\Delta x = 0.0125$ (método implícito).

3 EQUAÇÕES GOVERNANTES DA DINÂMICA DOS FLUIDOS

3.1 Introdução

No capítulo anterior foi abordado o problema de Stefan - problema de fronteira móvel envolvendo mudança de fase de um material do estado sólido para líquido (fusão) ou do estado líquido para sólido (solidificação). Esta classe de problemas de mudança de fase assume hipóteses simplificadoras que permitem que soluções analíticas possam ser determinadas para esses problemas, limitando muito as situações práticas que podem ser modeladas pela formulação desses problemas. Problemas de Stefan também apresentam formulações em duas ou três dimensões mas ainda assim muitas simplificações são feitas em suas formulações e essencialmente levam em conta apenas os efeitos da transferência de calor por condução.

Em situações práticas, o processo de mudança de fase não pode ser completamente modelado apenas pela equação da energia, sendo necessário levar em conta comportamentos como o transporte de matéria e calor por meio da convecção natural bem como os efeitos de expansão/contração do material devido à variação da densidade com a temperatura. Assim, torna-se necessário formular os modelos de forma que estes outros fatores sejam incluídos nos processos de mudança de fase.

Visando o desenvolvimento do chamado método da entalpia-porosidade, apresenta-se neste capítulo as equações governantes de escoamento de fluidos e de transferência de calor - equações que formam a base para a formulação do referido método. Tais equações decorrem das leis de conservação, a saber:

- *A massa de um fluido é conservada;*
- *A taxa de variação do momento linear é igual ao somatório das forças em uma partícula de fluido - Segunda lei de Newton;*
- *A taxa de variação da energia é igual a soma da taxa de adição de calor e a taxa de trabalho exercido em uma partícula de fluido - primeira lei da termodinâmica.*

3.2 Descrições espacial e material

Considere um campo de escoamento geral como ilustrado pelas linhas de corrente na Figura 3.1 e considere um volume fechado arbitrário tomado dentro deste escoamento

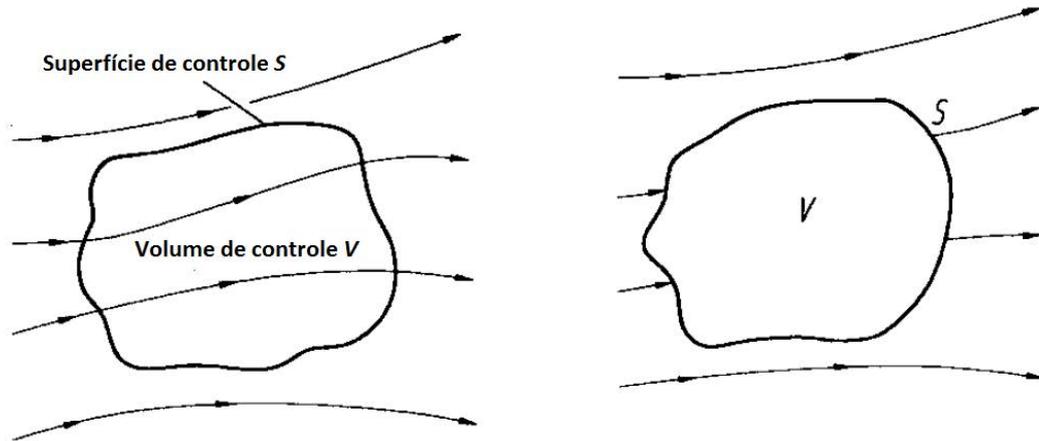


Figura 3.1: Volume de controle finito.

Este volume define um *volume de controle*, V , e uma *superfície de controle*, S , que contorna o volume. Este volume de controle (VC) pode ser tomado como fixo no espaço enquanto o fluido se move através dele (Figura 3.1 à esquerda) ou movendo-se com o fluido de modo que as partículas de fluido dentro deste são sempre as mesmas (Figura 3.1 à direita). As leis de conservação da física são aplicadas ao fluido contido dentro de um VC e ao fluido atravessando a superfície de controle (SC), limitando assim a análise a uma região finita do escoamento.

Para um material em movimento, tal como um fluido em escoamento, sua temperatura T , sua velocidade \vec{V} e seu estado de tensão \mathbf{T} podem variar com o tempo. A descrição dessas variações podem ser feitas como a seguir.

- 1 - Seguindo partículas específicas, definidas por sua coordenada material

$\vec{X} = (X, Y, Z)$ ao longo do tempo t . Ou seja, expressando T , \vec{V} e \mathbf{T} como

$$\begin{aligned} T &= T(X, Y, Z, t) \\ \vec{V} &= \vec{V}(X, Y, Z, t) \\ \mathbf{T} &= \mathbf{T}(X, Y, Z, t) \end{aligned} \tag{3.1}$$

Tal forma de expressar essas variações é conhecida como *descrição material* ou *descrição Lagrangeana* e *descrição material*.

- 2 - Observando as variações em localizações fixas no espaço, ou seja, expressando as variações de T , \vec{V} e \mathbf{T} como funções de uma posição fixa $\vec{x} = (x, y, z)$ e do tempo:

$$\begin{aligned} T &= T(x, y, z, t) \\ \vec{V} &= \vec{V}(x, y, z, t) \\ \mathbf{T} &= \mathbf{T}(x, y, z, t) \end{aligned} \quad (3.2)$$

Esta descrição é conhecida como *descrição espacial* ou *descrição Euleriana*.

3.3 A derivada material

Antes de estabelecer as equações governantes da dinâmica dos fluidos e de transferência de calor a partir do procedimento explicitado na seção anterior é conveniente estabelecer uma notação definindo algumas relações para facilitar a escrita dessas equações.

A taxa de variação de uma quantidade (temperatura, velocidade ou tensor de tensões) de uma partícula material é conhecida como *derivada material* e é denotada por D/Dt .

Se a descrição material de uma quantidade escalar é usada, tem-se

$$T = T(X, Y, Z, t) \quad (3.3)$$

Então,

$$\frac{DT}{Dt} = \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_{(X,Y,Z)-fixo} \quad (3.4)$$

Se a descrição espacial da mesma quantidade é usada, então

$$T = T(x, y, z, t) \quad (3.5)$$

onde as coordenadas (x, y, z) da posição atual de uma partícula material no instante de tempo t são relacionadas às coordenadas materiais por meio de

$$T = T(x, y, z, t) = T(x(X, Y, Z, t), y(X, Y, Z, t), z(X, Y, Z, t)) \quad (3.6)$$

Assim,

$$\frac{DT}{Dt} = \left(\frac{DT}{Dt} \right)_{(X,Y,Z)-fixo} = \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \frac{\partial x}{\partial t} + \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right) \frac{\partial y}{\partial t} + \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right) \frac{\partial z}{\partial t} + \left(\frac{\partial T}{\partial t} \right)_{(x,y,z)fixo} \quad (3.7)$$

onde os valores de $\partial x/\partial t$, $\partial y/\partial t$ e $\partial z/\partial t$ representam as componentes da velocidade da partícula (X, Y, Z) .

Assim, a derivada material pode ser escrita como

$$\frac{DT}{Dt} = \left(\frac{DT}{Dt} \right)_{(X,Y,Z)-fixo} = \frac{\partial T}{\partial t} + u \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) + v \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right) + w \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.8)$$

ou ainda

$$\frac{DT}{Dt} = \left(\frac{DT}{Dt} \right)_{(X,Y,Z)-fixo} = \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla T \quad (3.9)$$

3.3.1 Aceleração de uma partícula

Para a definição das equações de conservação da quantidade de movimento linear trabalhe-se com a taxa de variação da quantidade de movimento de uma partícula, ou seja, com a taxa de variação da velocidade da partícula - a aceleração.

Na *descrição material*, as componentes da velocidade de uma partícula em um instante de tempo t são dadas por

$$u = \frac{\partial x}{\partial t}, \quad v = \frac{\partial y}{\partial t}, \quad e \quad w = \frac{\partial z}{\partial t} \quad (3.10)$$

ou seja,

$$\vec{V} = (u, v, w) = \left(\frac{\partial \vec{x}}{\partial t} \right)_{(X,Y,Z)-fixo} = \frac{D\vec{x}}{Dt} \quad (3.11)$$

A aceleração da partícula em um instante de tempo t será dada, portanto, pela derivada material da velocidade, ou seja

$$\vec{a} = \left(\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} \right)_{(X,Y,Z)-fixo} = \frac{D\vec{V}}{Dt} \quad (3.12)$$

Em *descrição espacial*, a velocidade \vec{V} é dada por

$$\vec{V} = (u(x, y, z, t), v(x, y, z, t), w(x, y, z, t)) \quad (3.13)$$

e a aceleração será dada por

$$\vec{a} = \frac{D\vec{V}}{Dt} = \left(\frac{D}{Dt}u(x, y, z, t), \frac{D}{Dt}v(x, y, z, t), \frac{D}{Dt}w(x, y, z, t) \right) \quad (3.14)$$

Em componentes, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt}u(x, y, z, t) &= \frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + w\frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{D}{Dt}v(x, y, z, t) &= \frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + w\frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{D}{Dt}w(x, y, z, t) &= \frac{\partial w}{\partial t} + u\frac{\partial w}{\partial x} + v\frac{\partial w}{\partial y} + w\frac{\partial w}{\partial z} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Assim, a aceleração de uma partícula em um instante de tempo t é dada por

$$\vec{a} = \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\nabla \vec{V})\vec{V} \quad (3.16)$$

3.4 Equação da conservação da massa

O princípio de conservação da massa estabelece que se o movimento de um volume infinitesimal de material for observado através do tempo, então seu volume dV e sua massa específica ρ podem variar mas a sua massa total, ρdV deve permanecer inalterada, ou seja,

$$\frac{D}{Dt}(\rho dV) = \rho \frac{D}{Dt}(dV) + \frac{D\rho}{Dt}dV = 0 \quad (3.17)$$

A taxa de variação do volume, $D(dV)/Dt$ está relacionada com a velocidade \vec{V} através da expressão

$$\frac{1}{dV} \frac{D}{Dt}(dV) = \nabla \cdot \vec{V} \quad (3.18)$$

Assim, a equação (3.17) pode ser reescrita como

$$\rho \nabla \cdot \vec{V} + \frac{D\rho}{Dt} = 0 \quad (3.19)$$

onde na descrição espacial

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \rho \quad (3.20)$$

A equação (3.19) é a *equação da conservação da massa* ou *equação da continuidade*.

Em coordenadas cartesianas, a equação (3.19) é escrita como

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + v \frac{\partial \rho}{\partial y} + w \frac{\partial \rho}{\partial z} = 0 \quad (3.21)$$

Para um fluido for incompressível a equação da conservação da massa é reduzida a

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3.22)$$

3.5 Equação da conservação da quantidade de movimento linear

A segunda lei de Newton estabelece que a taxa de variação da quantidade de movimento de uma partícula de fluido (ou de um volume de fluido) é igual ao somatório das forças que atuam sobre esta partícula (sobre este volume). A taxa de variação das componentes x , y e z da quantidade de movimento (momento linear) de um volume de fluido são dadas por $\rho \frac{Du}{Dt}$, $\rho \frac{Dv}{Dt}$ e $\rho \frac{Dw}{Dt}$, respectivamente, e correspondem a cada uma das três componentes da aceleração $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$.

As forças que atuam em uma partícula de fluido podem ser forças de superfície ou forças de corpo (ou de volume). Seja $\vec{B} = (B_x, B_y, B_z)$ a força de corpo (tal como o peso) por unidade de massa, ρ a massa específica na posição (x, y, z) e \vec{a} a aceleração da partícula na posição (x, y, z) .

Para o volume infinitesimal de fluido considerado na Figura 3.2, as forças de superfície são resultados das tensões que atuam sobre cada face deste volume e indicam o estado de tensão neste volume.

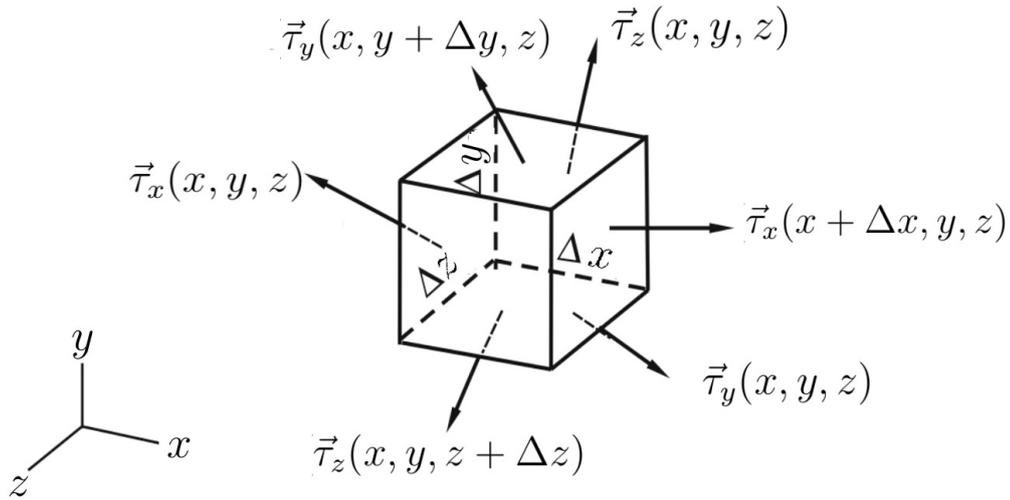


Figura 3.2: Componentes da tensão.

A segunda lei de Newton escrita para o elemento de fluido na Figura 3.2 é

$$\begin{aligned}
 & [\vec{\tau}_x(x + \Delta x, y, z) - \vec{\tau}_x(x, y, z)]\Delta y\Delta z + [\vec{\tau}_y(x, y + \Delta y, z) - \vec{\tau}_y(x, y, z)]\Delta x\Delta z \\
 & + [\vec{\tau}_z(x, y, z + \Delta z) - \vec{\tau}_z(x, y, z)]\Delta x\Delta y + \rho\vec{B}\Delta x\Delta y\Delta z = (\rho\Delta x\Delta y\Delta z)\vec{a} \quad (3.23)
 \end{aligned}$$

Dividindo cada termo da equação (3.23) pelo volume do elemento $\Delta x\Delta y\Delta z$, tem-se

$$\begin{aligned}
 & \left[\frac{\vec{\tau}_x(x + \Delta x, y, z) - \vec{\tau}_x(x, y, z)}{\Delta x} \right] + \left[\frac{\vec{\tau}_y(x, y + \Delta y, z) - \vec{\tau}_y(x, y, z)}{\Delta y} \right] \\
 & + \left[\frac{\vec{\tau}_z(x, y, z + \Delta z) - \vec{\tau}_z(x, y, z)}{\Delta z} \right] + \rho\vec{B} = \rho\vec{a} \quad (3.24)
 \end{aligned}$$

Agora, tomando-se os limites $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta y \rightarrow 0$ e $\Delta z \rightarrow 0$ na equação (3.24) obtém-se:

$$\frac{\partial \vec{\tau}_x}{\partial x} + \frac{\partial \vec{\tau}_y}{\partial y} + \frac{\partial \vec{\tau}_z}{\partial z} + \rho\vec{B} = \rho\vec{a} \quad (3.25)$$

A relação entre as componentes do vetor tensão $\vec{\tau}$ com o tensor de tensões \mathbf{T} é dada por:

$$\begin{aligned}
 \vec{\tau}_x &= (\sigma_{xx}, \tau_{yx}, \tau_{zx}) \\
 \vec{\tau}_y &= (\tau_{xy}, \sigma_{yy}, \tau_{zy}) \\
 \vec{\tau}_z &= (\tau_{xz}, \tau_{yz}, \sigma_{zz})
 \end{aligned} \quad (3.26)$$

Logo, a equação (3.25) pode ser escrita em forma vetorial como

$$\operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \vec{B} = \rho \vec{a} \quad (3.27)$$

que corresponde a equação do movimento a ser satisfeita por qualquer material, seja fluido ou sólido.

3.6 Equação da conservação da energia

A equação da energia é obtida a partir da primeira lei da termodinâmica para uma partícula de fluido que estabelece: *a taxa de variação da energia da partícula de fluido é igual a soma da taxa total de calor adicionado a partícula com taxa total de trabalho realizado sobre a partícula.*

3.6.1 Trabalho realizado pelas tensões

De acordo com a Figura 3.2, a taxa de trabalho realizado sobre o elemento de fluido é:

$$\begin{aligned} & [(\vec{\tau}_x \cdot \vec{V})|_{(x+\Delta x, y, z)} - (\vec{\tau}_x \cdot \vec{V})|_{(x, y, z)}] \Delta y \Delta z + \\ & [(\vec{\tau}_y \cdot \vec{V})|_{(x, y+\Delta y, z)} - (\vec{\tau}_y \cdot \vec{V})|_{(x, y, z)}] \Delta x \Delta z + \\ & [(\vec{\tau}_z \cdot \vec{V})|_{(x, y, z+\Delta z)} - (\vec{\tau}_z \cdot \vec{V})|_{(x, y, z)}] \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (3.28)$$

Dividindo-se a expressão (3.28) pelo volume $\Delta x \Delta y \Delta z$ tem-se

$$\begin{aligned} & \frac{(\vec{\tau}_x \cdot \vec{V})|_{(x+\Delta x, y, z)} - (\vec{\tau}_x \cdot \vec{V})|_{(x, y, z)}}{\Delta x} + \\ & \frac{(\vec{\tau}_y \cdot \vec{V})|_{(x, y+\Delta y, z)} - (\vec{\tau}_y \cdot \vec{V})|_{(x, y, z)}}{\Delta y} + \\ & \frac{(\vec{\tau}_z \cdot \vec{V})|_{(x, y, z+\Delta z)} - (\vec{\tau}_z \cdot \vec{V})|_{(x, y, z)}}{\Delta z} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Tomando-se os limites $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta y \rightarrow 0$ e $\Delta z \rightarrow 0$ em (3.29) obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial x}(\vec{\tau}_x \cdot \vec{V}) + \frac{\partial}{\partial y}(\vec{\tau}_y \cdot \vec{V}) + \frac{\partial}{\partial z}(\vec{\tau}_z \cdot \vec{V}) \quad (3.30)$$

Em termos do tensor de tensão \mathbf{T} , a expressão (3.30) pode ser escrita na forma vetorial como

$$\operatorname{div}(\mathbf{T}\vec{V}) \quad (3.31)$$

A taxa de trabalho realizado sobre o elemento de fluido pelas forças de corpo é dada por $(\rho\vec{B}dV) \cdot \vec{V} = \rho\vec{B} \cdot \vec{V}$. Logo, a taxa total de trabalho realizado sobre o elemento de fluido pelas forças de superfície e pelas forças de corpo é

$$P = \operatorname{div}(\mathbf{T}\vec{V}) + \rho\vec{B} \cdot \vec{V} = \vec{V} \operatorname{div} \mathbf{T} + \nabla\vec{V} \cdot \mathbf{T} + \rho\vec{B} \cdot \vec{V} \quad (3.32)$$

3.6.2 Fluxo de energia devido à condução de calor

Seja \vec{q} um vetor cuja magnitude fornece a taxa de calor que flui através de uma unidade de área por condução e cuja direção é a do fluxo de calor. De acordo com a Figura 3.2, a taxa total na qual o calor flui para dentro do elemento de fluido é dada por:

$$\begin{aligned} & [-q_x(x + \Delta x, y, z) + q_x(x, y, z)]\Delta y\Delta z + \\ & [-q_y(x, y + \Delta y, z) + q_y(x, y, z)]\Delta x\Delta z + \\ & [-q_z(x, y, z + \Delta z) + q_z(x, y, z)]\Delta x\Delta y \end{aligned} \quad (3.33)$$

Dividindo-se a expressão (3.33) pelo volume $\Delta x\Delta y\Delta z$ tem-se

$$\begin{aligned} & \frac{-q_x(x + \Delta x, y, z) + q_x(x, y, z)}{\Delta x} + \\ & \frac{-q_y(x, y + \Delta y, z) + q_y(x, y, z)}{\Delta y} + \\ & \frac{-q_z(x, y, z + \Delta z) + q_z(x, y, z)}{\Delta z} \end{aligned} \quad (3.34)$$

Tomando-se os limites $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta y \rightarrow 0$ e $\Delta z \rightarrow 0$ em (3.34) obtém-se

$$- \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) \quad (3.35)$$

que representa o vetor fluxo de calor \vec{Q}_c dado por

$$\vec{Q}_c = \operatorname{div} \vec{q} \quad (3.36)$$

Se o fluxo de calor for dado pela lei de Fourier, então tem-se:

$$q_x = -k \frac{\partial T}{\partial x} \quad q_y = -k \frac{\partial T}{\partial y} \quad q_z = -k \frac{\partial T}{\partial z} \quad (3.37)$$

Logo, o vetor fluxo de calor é dado por

$$\vec{Q}_c = -div(k\nabla T) \quad (3.38)$$

3.6.3 A equação da energia

Considere uma partícula de fluido com volume diferencial dV que ocupa a posição \vec{x} em um instante de tempo t . Sua energia específica, E , pode ser definida como a soma da energia térmica interna (entalpia), h , com a energia cinética, $\frac{1}{2}|\vec{V}|^2$. Sejam Q_c a taxa de calor absorvido por condução através de seu contorno, Q_s uma fonte de calor, e P a taxa de trabalho realizado sobre a partícula pelas forças de corpo e de superfície. Na ausência de outras formas fornecimento de energia, os postulados da conservação da energia de uma partícula de fluido é garantida através da igualdade entre a taxa de variação da energia com a soma da taxa total de trabalho realizado sobre a partícula, a taxa total de adição de calor ao fluido e o aumento de energia devido a fontes. Assim, a equação da energia é

$$\frac{DE}{Dt} = P + Q_c + Q_s \quad (3.39)$$

Sendo P dado pela equação (3.32) e Q_c dado pela equação (3.38), então a equação da energia pode ser escrita como

$$\frac{DE}{Dt} = -div(k\nabla T) + \vec{V} \cdot div \mathbf{T} + \nabla \vec{V} \cdot \mathbf{T} + \rho \vec{B} \cdot \vec{V} + Q_s \quad (3.40)$$

3.7 Equações de Navier-Stokes para um fluido Newtoniano

O estado de tensão para um fluido em movimento de corpo rígido (incluindo o repouso) é dado por um tensor isotrópico de modo que o tensor de tensões pode ser decomposto em

duas partes:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \mathbf{T}' \quad (3.41)$$

onde p é a pressão hidrostática e o tensor \mathbf{T}' depende apenas da taxa de deformação tal que é zero quando o fluido está em movimento de corpo rígido ou em repouso.

Um fluido Newtoniano é uma classe de material idealizada com as seguintes características:

- Para cada ponto material, os valores das componentes de \mathbf{T}' em um instante de tempo t dependem linearmente das componentes do tensor taxa de deformação \mathbf{D} no mesmo instante. As componentes do tensor taxa de deformação estão relacionadas às componentes do gradiente de velocidade por

$$D_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad D_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad D_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z} \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} D_{xy} = D_{yx} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ D_{yz} = D_{zy} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ D_{xz} = D_{zx} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (3.43)$$

- O fluido é isotrópico com respeito a qualquer configuração de referência, de modo que o tensor \mathbf{T}' pode ser escrito como

$$\mathbf{T}' = \lambda(\operatorname{div} \vec{V})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D} \quad (3.44)$$

sendo

$$\operatorname{div} \vec{V} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \quad (3.45)$$

a taxa de deformação volumétrica, a constante μ é a chamada primeira viscosidade (dinâmica), que relaciona as tensões com as deformações lineares, e a contante λ é a segunda viscosidade, que relaciona as tensões com a deformação volumétrica.

Assim, o tensor de tensão total \mathbf{T} para um fluido Newtoniano é dado por

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \lambda(\operatorname{div} \vec{V})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D} \quad (3.46)$$

Em um fluido incompressível tem-se

$$\operatorname{div} \vec{V} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3.47)$$

em todos os instantes de tempo de modo que a equação constitutiva (3.46) se torna

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \mu\mathbf{D} \quad (3.48)$$

Da equação (3.48) tem-se que

$$\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz} = -3p + 2\mu \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \quad (3.49)$$

ou seja,

$$p = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \quad (3.50)$$

Portanto, em fluido incompressível, a pressão p representa a tensão média normal. O valor de p não depende explicitamente de outras quantidades cinemáticas.

Como os valores das componentes de \mathbf{D} são dados pelas expressões (3.42) e (1.44) então as componentes da equação constitutiva de \mathbf{T} podem ser escritas como

$$\sigma_{xx} = -p + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \quad \sigma_{yy} = -p + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \quad \sigma_{zz} = -p + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \quad (3.51)$$

$$\begin{aligned} \tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \tau_{xz} = \tau_{zx} &= \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \tau_{yz} = \tau_{zy} &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (3.52)$$

As equações de Navier-Stokes são equações do movimento escritas em termos das componentes da velocidade do fluido. Das equações (3.16) e (3.27) tem-se

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\nabla \vec{V}) \vec{V} \right) = \operatorname{div} \mathbf{T} + \rho \vec{B} \quad (3.53)$$

Substituindo a equação constitutiva para o tensor de tensões para um fluido Newtoniano

incompressível (equação (3.48)) na equação do movimento (3.53), obtém-se

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \cdot (\nabla \vec{V}) \right) = \text{div}(-p\mathbf{I} + \mu\mathbf{D}) + \rho\vec{B} \quad (3.54)$$

As componentes da equação (3.54) são dadas por:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \rho B_x \quad (3.55)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \rho B_y \quad (3.56)$$

$$\rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \rho B_z \quad (3.57)$$

Ou ainda, a equação (3.54) pode ser posta na seguinte forma vetorial mais compacta:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\nabla \vec{V}) \vec{V} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{V} + \rho \vec{B} \quad (3.58)$$

As equações (3.58) são as equações de Navier-Stokes do movimento para um fluido Newtoniano incompressível. Existem quatro incógnitas, u , v , w e p nas três equações e a quarta equação para o fechamento do sistema é a equação da continuidade:

$$\text{div} \vec{V} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3.59)$$

3.8 Forma diferencial e integral

Equações como as formuladas anteriormente como a conservação da massa, conservação do movimento e conservação da energia podem ser escritas em termos de uma variável escalar genérica ϕ e a equação representará a forma conservativa de todas as equações de escoamentos de fluidos. Essa equação, chamada de **equação de transporte** para a propriedade ϕ é

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi\vec{V}) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) + S_\phi \quad (3.60)$$

onde Γ é o coeficiente de difusão. Esta estabelece que *a taxa de variação de ϕ do elemento de fluido mais a taxa total do fluxo de ϕ para fora do elemento de fluido é igual a soma da taxa de variação de ϕ por difusão com a taxa de variação de ϕ devido a fontes.*

O método dos volumes finitos (a ser visto no próximo capítulo) tem como base a

integração da equação (3.53) em um volume de controle (VC) tridimensional:

$$\int_{VC} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_{VC} \nabla \cdot (\rho\phi\vec{V}) dV = \int_{VC} \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) dV + \int_{VC} S_\phi dV \quad (3.61)$$

As integrais de volume sobre os termos convectivo e difusivo podem ser reescritas com uma integral de superfície usando o teorema da divergência de Gauss, levando a

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{VC} \rho\phi dV \right) + \int_A \vec{n} \cdot (\rho\phi\vec{V}) dA = \int_A \vec{n} \cdot (\Gamma\nabla\phi) dA + \int_{VC} S_\phi dV \quad (3.62)$$

onde \vec{n} é o vetor normal que aponta para fora da superfície do VC, e a ordem de integração e diferenciação foi trocada no termo transiente, significando a taxa de variação da quantidade total da propriedade ϕ num volume de controle. Assim, a equação (3.58) expressa que a soma da taxa de aumento de ϕ dentro do VC com a taxa total de decréscimo de ϕ por convecção através da superfície do VC é igual a soma da taxa total de aumento de ϕ por difusão através da superfície do VC com a taxa total de criação de ϕ dentro do VC.

Em problemas transientes, utilizamos também a integração da equação (3.53) com relação ao tempo t sobre um intervalo Δt , ou seja, de t a $t + \Delta t$, obtendo-se a seguinte forma integrada da equação de transporte:

$$\int_{\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{VC} \rho\phi dV \right) dt + \int_{\Delta t} \int_A \vec{n} \cdot (\rho\phi\vec{V}) dA dt = \int_{\Delta t} \int_A \vec{n} \cdot (\Gamma\nabla\phi) dA dt + \int_{\Delta t} \int_{VC} S_\phi dV dt \quad (3.63)$$

Esta equação é o ponto de partida para a aplicação do método dos volumes finitos na solução numérica de problemas não estacionários apresentado no próximo capítulo.

4 O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

4.1 Introdução

O método dos volumes finitos (MVF) é um método de discretização para resolução de equações ou para sistemas de equações diferenciais parciais que expressem a conservação ou o balanço de alguma propriedade. Neste capítulo apresentam-se os principais passos do MVF, já utilizado no Capítulo 2, para a solução numérica do problema de Stefan. Apresenta-se a aplicação deste método aos clássicos problemas de difusão, advecção-difusão estacionários, ilustrando-se os principais aspectos de sua aplicação a problemas transientes juntamente com o algoritmo SIMPLE para solução iterativa das equações de Navier-Stokes aplicado a escoamentos incompressíveis.

4.2 Malha de volumes finitos

O primeiro passo nesta formulação é a geração de um conjunto de pontos discretos onde as variáveis do problema em questão deverão ser calculadas. No MVF o domínio de solução do problema é subdividido em um número finito de volumes de controle (VC) por uma malha que, diferentemente dos métodos de diferenças finitas, definem os contornos dos VCs. A cada VC é então associado um ponto nodal onde as variáveis do problema serão calculadas. [22].

Um trecho de um domínio unidimensional é apresentado na Figura 4.1 onde alguns elementos que definem a malha são mostrados.

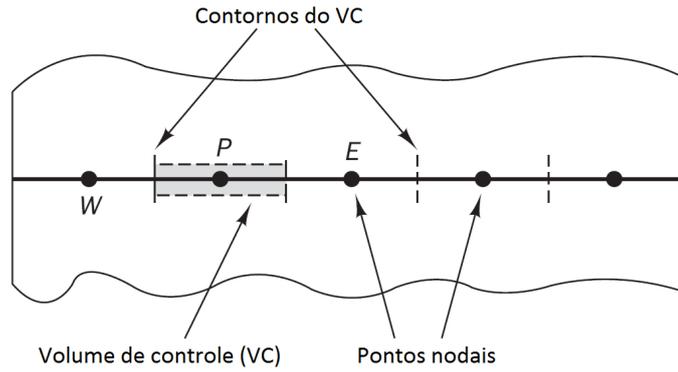


Figura 4.1: Trecho de um domínio unidimensional.

Na Figura 4.2 apresenta-se destacado um VC em torno de um ponto P e seus pontos vizinhos W e E , que será usada para introduzir algumas notações.

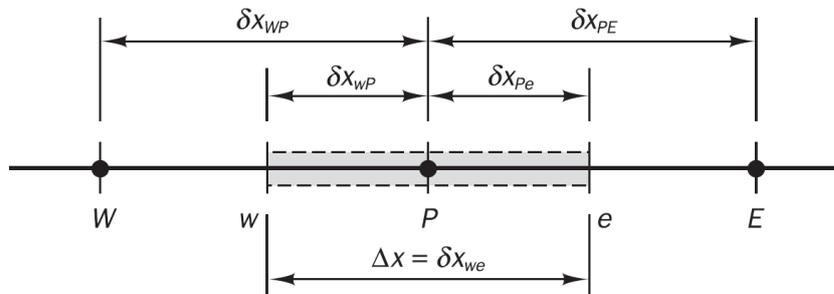


Figura 4.2: Notações para um volume de controle.

Um ponto escolhido deste VC é denotado por P e tem como pontos vizinhos à oeste (*West*) e à leste (*East*) os pontos W e E , respectivamente. A face do VC a oeste é denotada por w e a face do VC a leste é denotada por e . A distância entre os pontos W e P é denotada por δx_{WP} e a distância entre P e E denotada por δx_{PE} . As distâncias entre a face w e o ponto P e entre P e a face e são denotadas por δx_{wP} e δx_{Pe} , respectivamente, e o comprimento do VC é $\Delta x = \delta x_{we}$.

A Figura 4.3 ilustra um trecho de um domínio bidimensional discretizado por um conjunto de VCs.

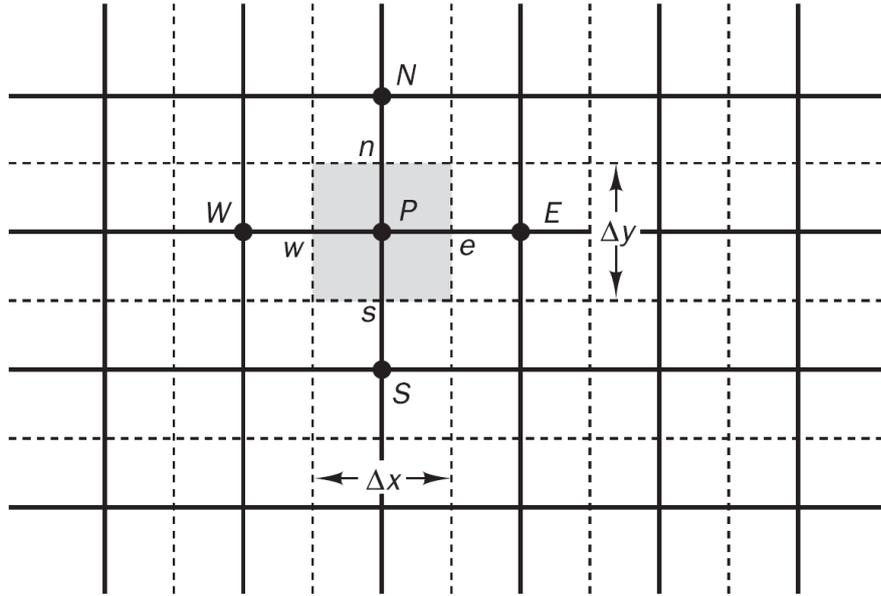


Figura 4.3: Malha de volumes de controle bidimensional.

Neste caso a mesma notação empregada para o conjunto de VCs no caso unidimensional é válida, sendo acrescentadas notações similares para os pontos vizinho de P ao norte (*North*) e ao sul (*South*) denotados, respectivamente, por N e S . As faces do VC ao norte é denotada por n e ao sul por s .

4.3 MVF para problemas de difusão estacionários

4.3.1 MVF para difusão unidimensional

A equação governante do problema de difusão estacionário obtida a partir da equação da difusão de uma grandeza ϕ é:

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi = 0 \quad (4.1)$$

que pode ser reescrita no caso unidimensional como:

$$\frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) + S = 0 \quad (4.2)$$

onde Γ é o coeficiente de difusão e S é o termo fonte. Um exemplo de aplicação governado por esta equação é o da condução de calor em uma barra unidimensional.

Para se obter as equações discretas para este processo pelo MVF, integra-se a equação

(4.2) sobre um VC em torno de um ponto P (Figura 4.2):

$$\int_{\Delta V} \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) + \int_{\Delta V} S = \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w + \bar{S} \Delta V = 0 \quad (4.3)$$

onde A é a área da face do VC, ΔV é o volume e \bar{S} é o valor médio do termo fonte S sobre o VC. A equação (4.3) estabelece que o fluxo difusivo de ϕ saindo pela face e menos o fluxo difusivo de ϕ entrando pela face w é igual a geração de ϕ dentro deste volume, representando assim um balanço para ϕ sobre este VC.

No processo da discretização, os valores do coeficiente de difusão e do gradiente de ϕ avaliados sobre as faces w e e do VC são requeridos e devem ser obtidos por meio de alguma interpolação entre os pontos nodais. Adotando-se uma aproximação linear para avaliar os valores requeridos na interface, obtem-se:

$$\Gamma_w = \frac{\Gamma_W + \Gamma_P}{2} \quad \text{e} \quad \Gamma_e = \frac{\Gamma_P + \Gamma_E}{2} \quad (4.4)$$

para os valores do coeficiente de difusão sobre as faces w e e e

$$\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e = \Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) \quad \text{e} \quad \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w = \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right) \quad (4.5)$$

para os fluxos difusivos sobre as interfaces que representa uma aproximação de diferença central.

Se o termo fonte for função de ϕ , pode-se aproximar o termo fonte S por meios da expressão:

$$\bar{S} \Delta V = S_u + S_P \phi_P \quad (4.6)$$

Substituindo-se as expressões dadas em (4.5) e em (4.6) na equação (4.3) tem-se

$$\Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) - \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right) + (S_u + S_P \phi_P) = 0 \quad (4.7)$$

que pode ser escrita como

$$\left(\frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e + \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w - S_P \right) \phi_P = \left(\frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w \right) \phi_W + \left(\frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e \right) \phi_E + S_u \quad (4.8)$$

Identificando-se os coeficientes de ϕ_W , ϕ_E e ϕ_P na equação (4.8) como a_W , a_E e a_P

respectivamente, pode-se escrever

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + S_u \quad (4.9)$$

onde os coeficientes a_W , a_E e a_P são

$$a_W = \frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}} \quad (4.10a)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.10b)$$

$$a_P = a_W + a_E - S_P \quad (4.10c)$$

O procedimento deve ser aplicado a cada ponto discreto do domínio obtendo-se assim um sistema tri-diagonal de equações algébricas a ser resolvido, fornecendo a solução para a variável em cada ponto.

4.3.2 *MVF para difusão bidimensional*

A derivação empregada para a discretização do problema de difusão estacionário unidimensional pode ser estendida para o caso bidimensional sem maiores dificuldades apenas repetindo-se os passos anteriores e considerando-se a direção y . A equação que rege o fenômeno de difusão estacionário bidimensional é:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S_\phi = 0 \quad (4.11)$$

Integrando-se a equação (4.11) sobre um volume de controle como ilustrado na Figura 4.3 obtém-se

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dy + \int_{\Delta V} \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) dx dy + \int_{\Delta V} S_\phi dV = 0 \quad (4.12)$$

Como $A_e = A_w = \Delta y$ e $A_n = A_s = \Delta x$ tem-se

$$\left[\Gamma_e A_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \Gamma_w A_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] + \left[\Gamma_n A_n \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \Gamma_s A_s \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right] + \bar{S} \Delta V = 0 \quad (4.13)$$

A equação (4.13), assim como a equação (4.3) para o caso unidimensional representa um balanço da geração da quantidade ϕ dentro de um VC e de seus fluxos através das faces do VC. Os fluxos difusivos através das faces do VC podem ser aproximados por meio de

uma interpolação linear e podendo ser expressos por:

$$\Gamma_w A_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w = \Gamma_w A_w \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\delta x_{WP}} \quad (4.14a)$$

$$\Gamma_e A_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \Gamma_e A_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\delta x_{PE}} \quad (4.14b)$$

$$\Gamma_s A_s \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s = \Gamma_s A_s \frac{(\phi_P - \phi_S)}{\delta y_{SP}} \quad (4.14c)$$

$$\Gamma_n A_n \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n = \Gamma_n A_n \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\delta y_{PN}} \quad (4.14d)$$

A utilização na equação (4.13), como no caso unidimensional, das expressões do esquema de diferença central para aproximação do termo difusivo no caso bidimensional leva a:

$$\Gamma_e A_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\delta x_{PE}} - \Gamma_w A_w \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\delta x_{WP}} + \Gamma_n A_n \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\delta y_{PN}} - \Gamma_s A_s \frac{(\phi_P - \phi_S)}{\delta y_{SP}} + \bar{S} \Delta V = 0 \quad (4.15)$$

que rearranjada pode ser escrita como

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}} + \frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{PE}} + \frac{\Gamma_s A_s}{\delta y_{SP}} + \frac{\Gamma_n A_n}{\delta y_{PN}} - S_P \right) \phi_P = \\ & \left(\frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}} \right) \phi_W + \left(\frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{PE}} \right) \phi_E + \left(\frac{\Gamma_s A_s}{\delta y_{SP}} \right) \phi_S + \left(\frac{\Gamma_n A_n}{\delta y_{PN}} \right) \phi_N + S_u \end{aligned} \quad (4.16)$$

Identificando-se os coeficientes da equação (4.16), chega-se na seguinte equação algébrica:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S_u \quad (4.17)$$

onde os coeficientes são dados por

$$a_W = \frac{\Gamma_w A_w}{\delta x_{WP}} \quad (4.18a)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e A_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.18b)$$

$$a_S = \frac{\Gamma_s A_s}{\delta y_{SP}} \quad (4.18c)$$

$$a_N = \frac{\Gamma_n A_n}{\delta y_{PN}} \quad (4.18d)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N - S_P \quad (4.18e)$$

sendo as áreas das faces dadas por $A_e = A_w = \Delta y$ e $A_n = A_s = \Delta x$.

Como no caso unidimensional, deve-se escrever uma equação como a equação (4.17)

para cada ponto do domínio discreto do problema. Em pontos próximos aos contornos, onde ϕ ou o fluxo de ϕ é conhecido, as equações devem ser modificadas para incorporar estes valores conhecidos. Em geral, o coeficiente do ponto no contorno é ajustado para zero e o fluxo através do contorno é introduzido como uma fonte por meio dos termos S_u e S_P . A aplicação deste procedimento a cada ponto discreto do domínio fornece um sistema penta-diagonal de equações algébricas a ser resolvido, cuja solução fornece o valor da variável em cada ponto.

O caso tridimensional é uma extensão do caso bidimensional, sendo as equações algébricas facilmente obtidas seguindo-se os passos dos casos unidimensional e bidimensional. Em todos os casos, cada equação algébrica obtida será da forma

$$a_P \phi_P = \sum a_{nb} \phi_{nb} + S_u \quad (4.19)$$

onde o somatório é tomado entre todos os pontos vizinhos (nb) de P , sendo 2, 4 e 6 respectivamente para os casos unidimensional, bidimensional e tridimensional com o coeficiente para o ponto P dado por

$$a_P = \sum a_{nb} - S_P \quad (4.20)$$

4.4 MVF - Aplicação a casos de convecção-difusão estacionários

Em problemas nos quais o escoamento deve ser levado em conta, os efeitos da convecção devem ser considerados. O principal problema na discretização do termo convectivo é a avaliação da propriedade transportada ϕ e de seu fluxo convectivo nas faces dos VCs.

Para a avaliação dos fluxos difusivos, no problema puramente difusivo as funções de interpolação usadas de diferenças centrais não trazem problemas de estabilidade para o método numérico.

Para a descrição dos métodos de aproximação para o termo convectivo que se segue, será assumido que o campo de velocidades é conhecido e disponível em todos os pontos do domínio do problema.

A equação governante de um processo de convecção-difusão estacionário pode ser

obtida a partir da equação de transporte de uma quantidade escalar genérica ϕ desprezando-se o termo transiente, levando a

$$\nabla \cdot (\rho \vec{V} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi \quad (4.21)$$

cuja integral sobre um VC fornece

$$\int_A \vec{n} \cdot (\rho \vec{V} \phi) dA = \int_A \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA + \int_{VC} S_\phi dV \quad (4.22)$$

Esta equação que representa o balanço de fluxo em um VC. O lado esquerdo contém o fluxo convectivo total e o lado direito o fluxo difusivo total acrescido da geração ou destruição de quantidade ϕ dentro do VC.

O problema de convecção-difusão estacionário unidimensional e sem fontes para uma grandeza escalar ϕ é modelado pela seguinte equação:

$$\frac{d}{dx}(\rho u \phi) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) \quad (4.23)$$

O escoamento também deve satisfazer a equação da continuidade que, para o caso unidimensional, é escrita como

$$\frac{d}{dx}(\rho u) = 0 \quad (4.24)$$

Considere o VC ilustrado na Figura 4.4 em torno de um ponto P onde a velocidade u é conhecida nas faces w e e do VC. A mesma nomenclatura usada antes é válida aqui.

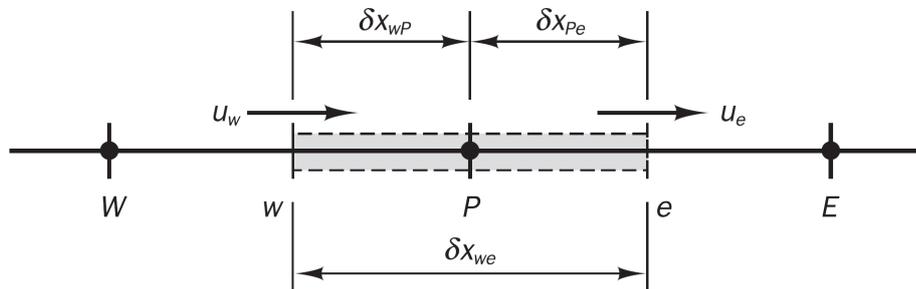


Figura 4.4: Volume de controle com velocidades conhecidas das faces.

Integrando-se a equação (4.23) no VC da Figura 4.4 tem-se:

$$(\rho u A \phi)_e - (\rho u A \phi)_w = \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w \quad (4.25)$$

e integrando-se a equação da continuidade (4.24) no VC obtém-se:

$$(\rho u A)_e - (\rho u A)_w = 0 \quad (4.26)$$

Para simplificar a notação definem-se duas variáveis, F e D , para representar o fluxo de massa convectivo por unidade de área e a condutância de difusão, respectivamente, nas faces dos VCs:

$$F = \rho u \quad \text{e} \quad D = \frac{\Gamma}{\delta x} \quad (4.27)$$

Assim, os valores de F e D nas faces dos VCs são

$$F_w = (\rho u)_w \quad F_e = (\rho u)_e \quad (4.28)$$

$$D_w = \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} \quad D_e = \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.29)$$

Assumindo que $A_e = A_w = A$, pode-se dividir ambos os lados da equação (4.25) pela área A e empregando o esquema de diferença central (CDS - *Central Differencig Scheme*) para os termos difusivos, a equação (4.25) pode ser escrita como:

$$F_e \phi_e - F_w \phi_w = D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W) \quad (4.30)$$

e a equação da continuidade (4.26) como:

$$F_e - F_w = 0 \quad (4.31)$$

Na tarefa agora de encontrar funções de interpolação para os fluxos convectivos F nas faces dos VCs existem inúmeras possibilidades e, no que se segue, apresentam-se algumas formas de aproximação mais conhecidas.

4.4.1 O esquema de diferenças centrais (CDS)

Uma primeira tentativa de aproximação dos fluxos convectivos é empregar o CDS, esquema linear que envolve interpolação entre apenas dois pontos. Para uma malha regular uniforme, os valores de ϕ nas faces dos VCs w e e pelo CDS podem ser escritos como

$$\phi_e = \frac{(\phi_P + \phi_E)}{2} \quad \text{e} \quad \phi_w = \frac{(\phi_W + \phi_P)}{2} \quad (4.32)$$

Substituindo-se os valores dados em (4.32) na equação (4.30) obtem-se

$$\frac{F_e}{2}(\phi_P + \phi_E) - \frac{F_w}{2}(\phi_W + \phi_P) = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \quad (4.33)$$

Rearranjando-se (4.33) tem-se

$$\left[\left(D_w - \frac{F_w}{2} \right) + \left(D_e + \frac{F_e}{2} \right) \right] \phi_P = \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) \phi_W + \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) \phi_E \quad (4.34)$$

ou ainda

$$\left[\left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) + \left(D_e + \frac{F_e}{2} \right) + (F_e - F_w) \right] \phi_P = \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) \phi_W + \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) \phi_E \quad (4.35)$$

Identificando-se os coeficientes de ϕ_W e de ϕ_E tem-se

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E \quad (4.36)$$

onde os coeficientes a_W , a_E e a_P são

$$a_W = D_w + \frac{F_w}{2} \quad (4.37a)$$

$$a_E = D_e - \frac{F_e}{2} \quad (4.37b)$$

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) \quad (4.37c)$$

A equação (4.36) é a equação algébrica obtida para o VC em torno do ponto P pelo esquema de diferenças centrais. Como antes, deve-se escrever uma equação como a (4.36) para cada ponto discreto do domínio e então resolver o sistema de equações para obter-se o campo ϕ em todo o domínio discreto.

Podemos constatar que esta equação de diferenças pode ser reescrita como:

$$(1 + Pe)\phi_{i-1} - 2\phi_i + (1 - Pe)\phi_{i+1} = 0 \quad (4.38)$$

Se $D_w = D_e$ e $\Delta x = \Delta y$, além de Γ constante, Pe é o número de Peclet da malha definido por:

$$Pe = \frac{F}{D} = \frac{\rho u \Delta x}{2\Gamma} \quad (4.39)$$

A solução deste problema resulta em oscilações espúrias para $Pe > 1$ o que resulta em uma limitação severa para Δx para a obtenção de resultados sem estas oscilações. Para a estabilidade da solução deve-se satisfazer a:

$$Pe \leq 1 \quad (4.40)$$

Considerando-se a velocidade u positiva, observa-se pela relação (4.40), que à medida que a velocidade cresce, é preciso reduzir o valor de Δx para se manter válida a desigualdade (4.40).

4.4.2 O esquema upwind (UDS)

Tal como ocorre no método das diferenças finitas uma solução para evitar esta limitação é o emprego de aproximações upwind cuja aplicação ao método dos volumes finitos apresenta-se a seguir.

O esquema de discretização upwind (UDS - *Upwind Differencing Scheme*) tem a característica de considerar a direção do escoamento para determinar o valor da propriedade transportada ϕ nas interfaces dos VCs. O valor de ϕ em uma interface é tomado como sendo o valor de ϕ no ponto nodal no sentido oposto ao vetor velocidade. A Figura 4.5 mostra quais valores nodais são usados para se avaliar o fluxo convectivo em cada uma das faces do VC dependendo do sinal da velocidade.

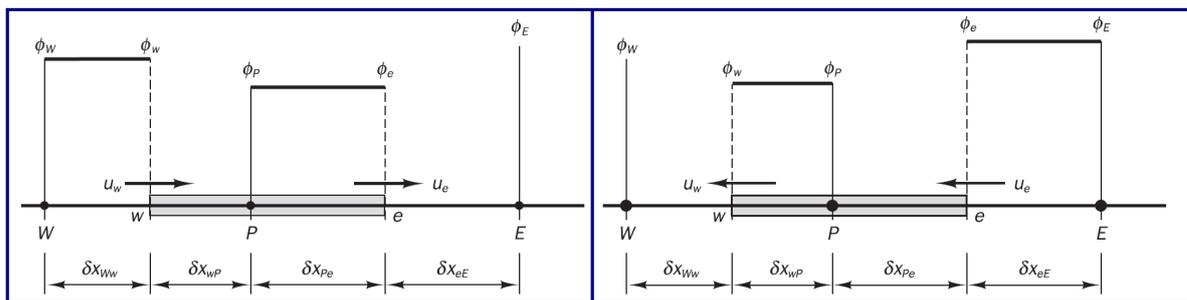


Figura 4.5: Ilustração do esquema upwind.

De acordo com a Figura 4.5, quando $u_w > 0$ e $u_e > 0$, ou seja, $F_w > 0$ e $F_e > 0$, tem-se

$$\phi_w = \phi_W \quad \text{e} \quad \phi_e = \phi_P \quad (4.41)$$

E quando $u_w < 0$ e $u_e < 0$, ou seja, $F_w < 0$ e $F_e < 0$, tem-se

$$\phi_w = \phi_P \quad \text{e} \quad \phi_e = \phi_E \quad (4.42)$$

As expressões dadas por (4.41) e (4.42) podem ser combinadas em uma única expressão por meio da função máximo entre dois valores, que será denotada por $[[A, B]]$, para representar o máximo entre A e B . Assim

$$F_e \phi_e = \phi_P |[F_e, 0]| - \phi_E |[-F_e, 0]| \quad (4.43)$$

$$F_w \phi_w = \phi_W |[F_w, 0]| - \phi_P |[-F_w, 0]| \quad (4.44)$$

e a equação (4.30) pode ser escrita como

$$\phi_P |[F_e, 0]| - \phi_E |[-F_e, 0]| - (\phi_W |[F_w, 0]| - \phi_P |[-F_w, 0]|) = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) \quad (4.45)$$

Reorganizando e identificando os seus coeficientes, a equação (4.45) fica escrita como a seguinte equação algébrica:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E \quad (4.46)$$

Com os coeficientes dados por

$$a_W = D_w + |[F_w, 0]| \quad (4.47a)$$

$$a_E = D_e + |[-F_e, 0]| \quad (4.47b)$$

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) \quad (4.47c)$$

4.4.3 O esquema híbrido

O esquema de discretização híbrido para os fluxos convectivos através das faces dos VCs é baseado em uma combinação entre os esquemas CDS e UDS. O esquema CDS (de segunda ordem) é empregado para números de Peclet pequenos ($|Pe| < 1$) enquanto que o esquema UDS (de primeira ordem) é empregado para números de Peclet grandes ($|Pe| \geq 1$).

A formulação do esquema híbrido é baseada no número de Peclet local para avaliar o

fluxo total em cada face dos VCs. Assim, para a face oeste w , o número de Peclet é

$$Pe_w = \frac{F_w}{D_w} = \frac{(\rho u)_w \delta x_{WP}}{2\Gamma_w} \quad (4.48)$$

e a fórmula para o fluxo total por unidade de área através da face w é dada por

$$q_w = F_w \left[\frac{1}{2} \left(1 + \frac{4}{Pe_w} \right) \phi_W + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{4}{Pe_w} \right) \phi_P \right], \quad \text{para } |Pe_w| < 1 \quad (4.49a)$$

$$q_w = F_w \phi_W, \quad \text{para } Pe_w \geq 1 \quad (4.49b)$$

$$q_w = F_w \phi_P, \quad \text{para } Pe_w \leq -1 \quad (4.49c)$$

Expressões similares para o fluxo total através da face e do VC podem ser obtidas sem maiores dificuldades. Observa-se pelas expressões (4.49) que para $|Pe| < 1$, os fluxos são avaliados por meio do esquema CDS e quando $|Pe| \geq 1$, os fluxos são avaliados por meio do esquema UDS.

A equação algébrica obtida pelo esquema híbrido é

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E \quad (4.50)$$

Os coeficientes dos pontos vizinhos à P , a_W e a_E , podem ser escritos em termos da função máximo entre dois valores e são dados por

$$a_W = \max \left[F_w, \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right), 0 \right] \quad (4.51a)$$

$$a_E = \max \left[-F_e, \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right), 0 \right] \quad (4.51b)$$

e o coeficiente central, para o ponto P é dado por

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) \quad (4.52)$$

4.4.4 O esquema exponencial

Primeiramente, observa-se que a equação (4.23) possui solução analítica se o coeficiente de difusão Γ for constante, pois ρu já é constante pela equação da continuidade (4.24). Para um domínio $0 \leq x \leq l$ com condições de contorno dadas por $\phi = \phi_0$ em $x = 0$ e

$\phi(x = l) = \phi_l$ a solução analítica de (4.23) é

$$\frac{\phi - \phi_0}{\phi_l - \phi_0} = \frac{e^{(\rho ux/\Gamma)} - 1}{e^{(\rho ul/\Gamma)} - 1} \quad (4.53)$$

Considerando-se o fluxo total, isto é, a soma do fluxo convectivo com o fluxo difusivo tem-se

$$J = \rho u \phi - \Gamma \frac{d\phi}{dx} \quad (4.54)$$

Assim, a equação (4.23) se torna

$$\frac{dJ}{dx} = 0 \quad (4.55)$$

que integrada sobre um VC em torno de um ponto P fornece

$$J_e - J_w = 0 \quad (4.56)$$

Usando a solução exata dada por (4.53) como função de interpolação entre os pontos P e E , substituindo-se ϕ_0 e ϕ_l por ϕ_P e ϕ_E respectivamente e a distância l por δx_{PE} , o fluxo J_e pode ser escrito como

$$J_e = F_e \left(\phi_P + \frac{\phi_P - \phi_E}{e^{Pe_e} - 1} \right) \quad (4.57)$$

Expressão similar pode ser obtida para o fluxo J_w e substituição dos valores de J_w e J_e na equação (4.56) leva a

$$F_e \left(\phi_P + \frac{\phi_P - \phi_E}{e^{Pe_e} - 1} \right) - F_w \left(\phi_W + \frac{\phi_W - \phi_P}{e^{Pe_w} - 1} \right) = 0 \quad (4.58)$$

que pode ser reorganizada e escrita como a seguinte equação algébrica

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E \quad (4.59)$$

com os coeficientes dados por

$$a_W = \frac{F_w e^{(F_w/D_w)}}{e^{(F_w/D_w)} - 1} \quad (4.60a)$$

$$a_E = \frac{F_e}{e^{(F_e/D_e)} - 1} \quad (4.60b)$$

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) \quad (4.60c)$$

Deve ser observado que o esquema exponencial quando aplicado a problemas estacionários unidimensionais, produzem a solução exata do problema para qualquer número de Peclet e para qualquer número de pontos. Porém, este esquema não é recomendado para casos bidimensionais e tridimensionais pois é custoso devido ao cálculo das exponenciais, podendo ser indesejável sua aplicação nessas situações.

4.4.5 O esquema *power-law*

No esquema *power-law* a difusão é feita igual a zero quando o $Pe > 10$. Para $0 < Pe < 10$ o fluxo é avaliado por uma expressão polinomial. Tomando como exemplo o coeficiente a_E , tem-se:

$$\frac{a_E}{D_e} = -P_e, \quad \text{para } P_e < -10 \quad (4.61a)$$

$$\frac{a_E}{D_e} = (1 + 0,1P_e)^5 - P_e, \quad \text{para } -10 \leq P_e < 0 \quad (4.61b)$$

$$\frac{a_E}{D_e} = (1 - 0,1P_e)^5, \quad \text{para } 0 \leq P_e \leq 10 \quad (4.61c)$$

$$\frac{a_E}{D_e} = 0, \quad \text{para } P_e > 10 \quad (4.61d)$$

Em suma, a expressão para o coeficiente a_E e o coeficiente a_W são

$$a_E = D_e \times \max \left[0, \left(1 - \frac{0,1|F_e|}{D_e} \right)^5 \right] + \max[-F_e, 0] \quad (4.62a)$$

$$a_W = D_w \times \max \left[0, \left(1 - \frac{0,1|F_w|}{D_w} \right)^5 \right] + \max[F_w, 0] \quad (4.62b)$$

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) \quad (4.62c)$$

Todos os esquemas apresentados foram descritos primordialmente para serem aplicados a problemas unidimensionais e a extensão desses esquemas para problemas multidimensionais são facilmente obtidos repetindo-se os mesmos passos para cada uma das dimensões envolvidas. Portanto, maiores detalhes da derivação desses esquemas em duas ou três dimensões não serão apresentados.

4.5 Algoritmos de solução para o acoplamento pressão-velocidade

4.5.1 Introdução

Deve-se observar que, conforme assumido no início da seção 4.4, todos os esquemas de discretização do termo convectivo nos problemas de convecção-difusão foram descritos para casos em que o campo de velocidades era conhecido em todos os pontos do escoamento. Porém, no problema tratado neste trabalho é de interesse avaliar a transferência de calor por convecção por meio da equação da energia, enquanto que o campo de velocidades é desconhecido e deve ser determinado juntamente com as demais variáveis do problema. Basicamente, são dois problemas a serem resolvidos: as equações de Navier-Stokes e o problema de transferência de calor.

Para o caso de escoamentos estacionários em duas dimensões as equações do movimento podem ser obtidas das equações de Navier-Stokes desprezando-se o termo transiente para as componentes da velocidade u e v e $\Gamma = \mu$ acrescidas da equação da conservação da massa, dadas por:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho uu) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vu) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial p}{\partial x} + S_u \quad (4.63)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vv) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \frac{\partial p}{\partial y} + S_v \quad (4.64)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v) = 0 \quad (4.65)$$

As equações (4.63), (4.64) e (4.65) apresentam dois problemas para sua solução: os termos convectivos nas equações do movimento são não-lineares, e as três equações são acopladas envolvendo o gradiente de pressão não existindo qualquer outra equação para a pressão.

Se o gradiente de pressão é conhecido, o processo de obtenção das equações discretizadas para as velocidades a partir das equações de movimento é exatamente o mesmo que o de qualquer outra variável escalar e os esquemas apresentados neste capítulo são aplicáveis. Se o escoamento é compressível, a equação da continuidade pode ser usada como uma equação de transporte para a densidade e a pressão pode ser obtida a partir da densidade e da temperatura por meio de uma equação de estado $p = p(\rho, T)$.

Porém, se o escoamento é incompressível, a densidade é constante e por definição não possui acoplamento com a pressão. Neste caso, o acoplamento entre a pressão e a velocidade induz a uma restrição à solução do escoamento: se um campo de pressões correto for aplicado às equações do movimento, então o campo de velocidades calculado deve satisfazer a equação da continuidade.

Em ambos os problemas, a não-linearidade e o acoplamento pressão-velocidade podem ser tratados por meio de algoritmos iterativos como o SIMPLE ([23]). Neste algoritmo os fluxos convectivos por unidade de massa F nas faces dos VCs são avaliados por meio de campos arbitrários para a velocidade. Uma estimativa para o campo de pressão é usado para o cálculo das equações do movimento e uma equação de correção da pressão, deduzida a partir da equação da continuidade, é empregada para a correção dessas estimativas dos campos de velocidade e de pressão. O processo iterativo inicia-se com as estimativas iniciais para a velocidade e para a pressão e no decorrer das iterações o objetivo é melhorar estes valores até a convergência dos campos.

4.5.2 A malha deslocada (*staggered*)

Considere componente u da equação da quantidade de movimento. A equação dessa componente para um caso unidimensional é

$$\frac{d}{dx}(\rho uu) = \frac{d}{dx} \left(\mu \frac{du}{dx} \right) - \frac{dp}{dx} + S_u \quad (4.66)$$

A discretização dos termos convectivo e difusivo foram apresentadas nas seções anteriores enquanto que o único termo novo é a derivada da pressão, $-dp/dx$. A integração deste termo em um VC fornece $p_w - p_e$. Pode-se expressar essa diferença de pressão através das faces dos VCs por meio de valores nodais. Assumindo-se um perfil linear e considerando-se que os pontos nodais estão exatamente no centro de cada VC, tem-se

$$p_w - p_e = \frac{p_W + p_P}{2} - \frac{p_P + p_E}{2} = \frac{p_W - p_E}{2} \quad (4.67)$$

A equação (4.67) expressa que a equação do movimento incluirá diferenças de pressão entre pontos alternados ao invés de consecutivos. Além disso significar a utilização de menos pontos nodais do que realmente é empregado, diminuindo a precisão da solução, também é possível obter soluções nas quais um campo de pressões não uniforme acabe

se comportando como um campo uniforme (com $\nabla p = 0$, ainda que o campo de pressões apresente variações espaciais). Exemplos dessas ocorrências são melhores ilustrados nas Figuras 4.6 e 4.7 para os casos unidimensional e bidimensional, respectivamente.

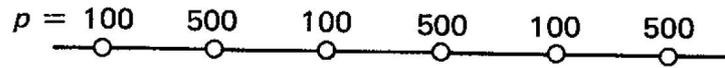


Figura 4.6: Campo de pressões unidimensional.

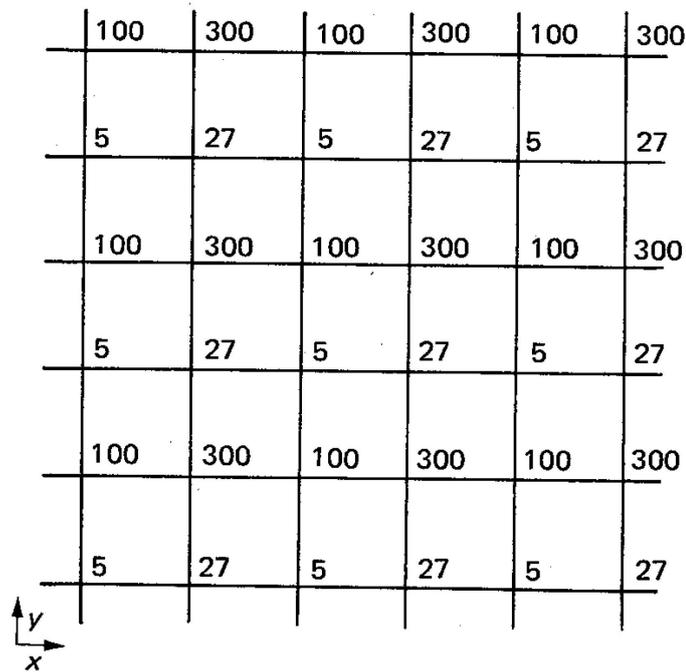


Figura 4.7: Campo de pressões bidimensional.

Observa-se no caso unidimensional que a diferença entre dois pontos não consecutivos é sempre zero. O mesmo é válido no caso bidimensional sendo que agora o mesmo é válido nas duas direções.

Outro problema similar está relacionado à equação da continuidade. Para o caso unidimensional, a equação da continuidade com densidade constante é

$$\frac{du}{dx} = 0 \quad (4.68)$$

que integrada em um VC em torno de um ponto P fornece

$$u_e - u_w = 0 \quad (4.69)$$

Usando um perfil linear para avaliar as velocidades nas faces do VC, obtêm-se

$$\frac{u_P + u_E}{2} - \frac{u_W + u_P}{2} = 0 \implies u_E - u_W = 0 \quad (4.70)$$

Observa-se que a equação da continuidade discreta (4.70) demanda igualdade entre as velocidades entre pontos alternados e não em pontos adjacentes. Assim, um campo de velocidades como na Figura 4.8 satisfaz a equação discreta da continuidade.

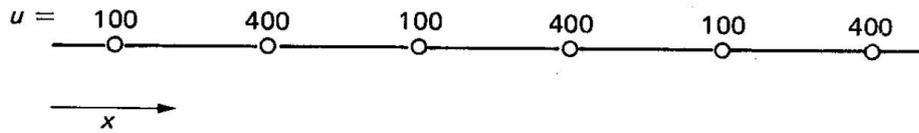


Figura 4.8: Campo de velocidades unidimensional.

Os problemas relatados anteriormente podem ser eliminados atentando-se para o fato de que nem todas as variáveis de um problema precisam ser alocadas nos mesmos pontos da malha. Para o problema em questão pode-se usar as chamadas malhas *staggered* para as componentes da velocidade. A ideia é a avaliação das variáveis escalares como a temperatura e a pressão nos centros dos VCs e avaliar as componentes das velocidades nos centros das faces dos VCs escalares, num arranjo que é denominado *staggered*. A Figura 4.9 ilustra um VC para variáveis escalares (a área hachurada) e a localização das componentes u e v e a Figura 4.10 ilustra em maiores detalhes um VC utilizado para variáveis escalares e a localização das componentes da velocidade.

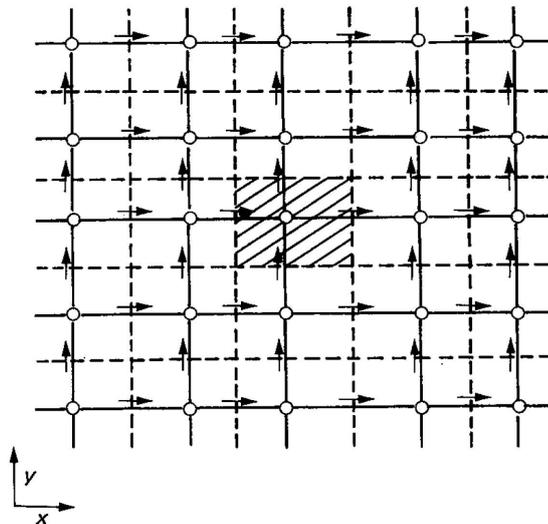


Figura 4.9: Volume de controle e localizações das componentes da velocidade: $\rightarrow = u$, $\uparrow = v$, $\circ =$ demais variáveis

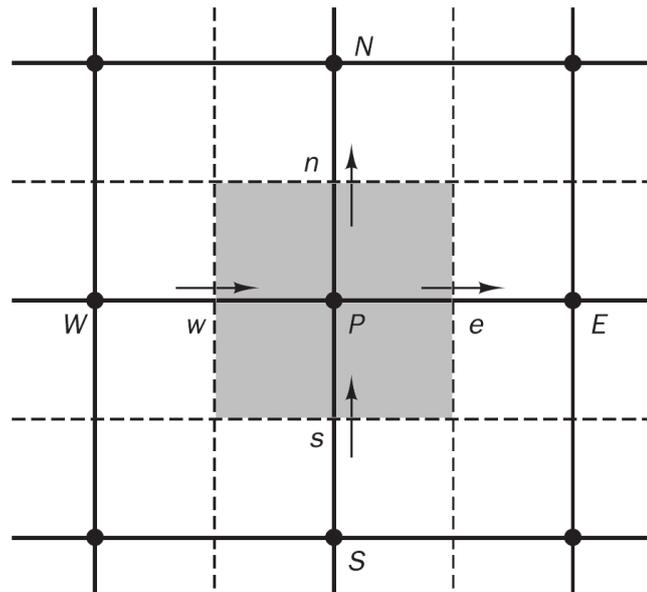


Figura 4.10: Volume de controle para variáveis escalares.

Na malha *staggered* na direção x , a componente u da velocidade é localizada nas faces dos VCs que são normais à direção x , enquanto que a componente v da velocidade é localizada nas faces dos VCs que são normais à direção y .

Usando malhas *staggered* para as componentes da velocidade, observa-se que os pontos nodais para a pressão coincidem com as faces dos VCs para as componentes da velocidade. Em um VC para a componente u (Figura 4.11), a componente x do gradiente pressão integrada em um VC em torno do ponto e é dada por

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{p_P - p_E}{\delta x_u} \Delta V_u = (p_P - p_E) A_e \quad (4.71)$$

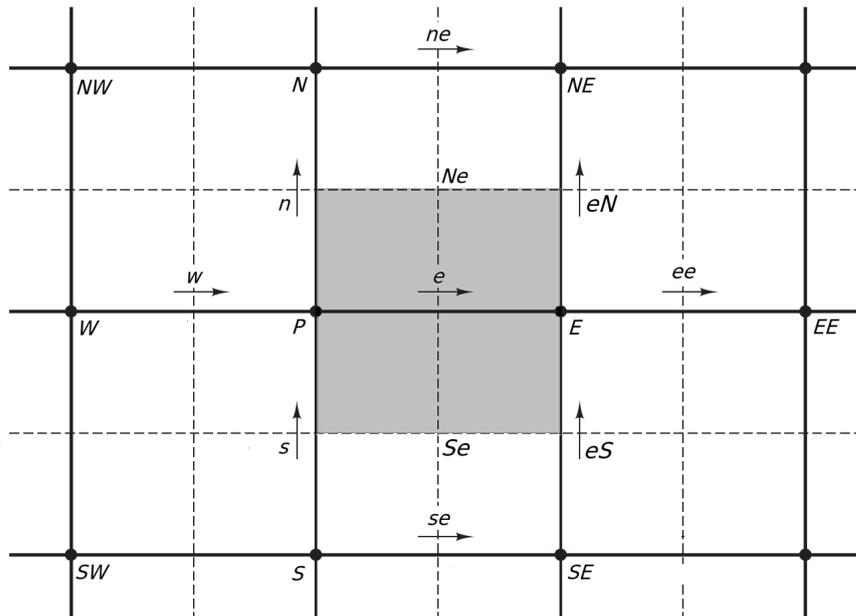


Figura 4.11: Volume de controle para a componente u .

e em um VC para a componente v da velocidade (Figura 4.12), a componente y do gradiente de pressão é representada por

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{p_P - p_N}{\delta y_v} \Delta V_v = (p_P - p_N) A_n \quad (4.72)$$

Portanto, adotando-se malhas deslocadas para as componentes da velocidade, observa-se que não há necessidade de algum tipo de interpolação para a pressão, pois estas já estarão disponíveis onde são requeridas e o gradiente de pressão será avaliado em pontos nodais consecutivos e não alternados.

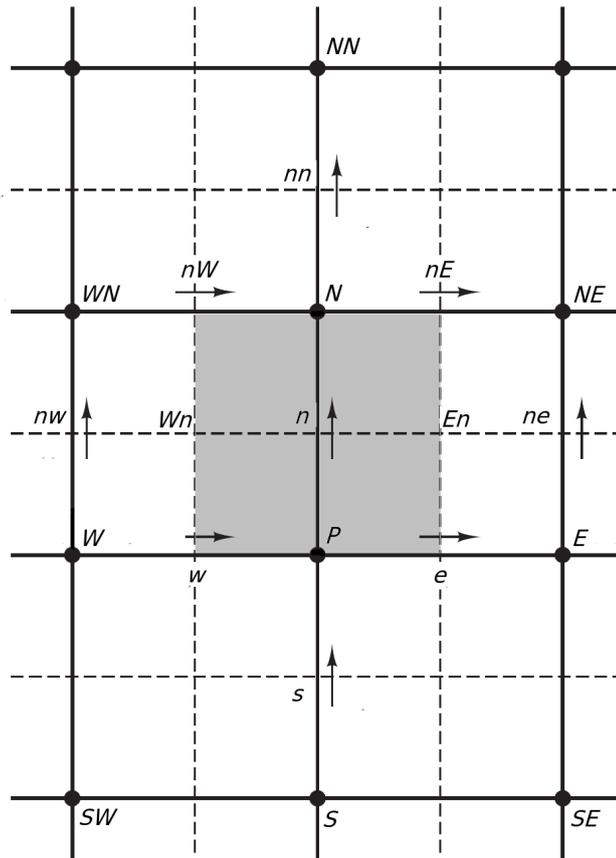


Figura 4.12: Volume de controle para a componente v .

4.5.3 Tratamento das equações do movimento

As equações da conservação da quantidade de movimento linear, equações (4.63) e (4.64) podem agora ser integradas com o uso do método dos volumes finitos para suas discretizações. A princípio, não existe diferenças significativas entre a forma discreta da equação geral de transporte e as equações do movimento. As maiores diferenças ficam por conta do fato de os VCs usados para a componente u serem deslocadas na direção x (Figura 4.11) e os VCs usados para a componente v serem deslocadas na direção y (Figura 4.12). Isso significa que o cálculo do coeficiente de difusão (a viscosidade) e dos fluxos de massa através das faces de seus VCs podem requerer algum tipo de interpolação.

A equação algébrica discreta da componente u da equação do movimento é

$$\begin{aligned}
 a_e u_e &= a_w u_w + a_{ee} u_{ee} + a_{se} u_{se} + a_{ne} u_{ne} + (p_P - p_E) A_e + b_u \Rightarrow \\
 a_e u_e &= \sum a_{nb} u_{nb} + (p_P - p_E) A_e + b_u
 \end{aligned}
 \tag{4.73}$$

onde o somatório é tomado sobre a quantidade de pontos vizinhos e depende da dimensão do problema (são quatro pontos vizinhos para o caso bidimensional), os coeficientes a_{nb} contêm combinações dos fluxos difusivos e convectivos através das faces dos VCs e dependem do esquema de discretização empregado (central, upwind, power-law, híbrido, exponencial, etc), b_u é o termo fonte da componente u (sem o gradiente de pressão). O termo $(p_P - p_E)A_e$ é a discretização da componente x do gradiente de pressão e representa a força de pressão que atua sobre o VC de u na direção x e A_e é a área na qual a diferença de pressão atua.

Os fluxos convectivos por unidade de massa (F) e a condutância de difusão (D) através das faces dos VCs necessitam interpolação e são dados por:

$$F_P = (\rho u)_P = \frac{F_w + F_e}{2} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_W + \rho_P}{2} \right) u_w + \left(\frac{\rho_P + \rho_E}{2} \right) u_e \right] \quad (4.74a)$$

$$F_E = (\rho u)_E = \frac{F_e + F_{ee}}{2} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_P + \rho_E}{2} \right) u_e + \left(\frac{\rho_E + \rho_{EE}}{2} \right) u_{ee} \right] \quad (4.74b)$$

$$F_{Se} = (\rho v)_{Se} = \frac{F_s + F_{eS}}{2} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_S + \rho_P}{2} \right) v_s + \left(\frac{\rho_{SE} + \rho_E}{2} \right) v_{eS} \right] \quad (4.74c)$$

$$F_{Ne} = (\rho v)_{Ne} = \frac{F_n + F_{cN}}{2} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_P + \rho_N}{2} \right) v_n + \left(\frac{\rho_E + \rho_{NE}}{2} \right) v_{eN} \right] \quad (4.74d)$$

$$D_P = \frac{\mu_P}{\delta x_{we}} \quad (4.74e)$$

$$D_E = \frac{\mu_E}{\delta x_{eee}} \quad (4.74f)$$

$$D_{Se} = \frac{\mu_P + \mu_E + \mu_S + \mu_{SE}}{4\delta y_{e,se}} \quad (4.74g)$$

$$D_{Ne} = \frac{\mu_N + \mu_{NE} + \mu_P + \mu_E}{4\delta y_{e,ne}} \quad (4.74h)$$

No procedimento iterativo de solução das equações do movimento, as componentes u e v usadas para avaliar as expressões anteriores são aquelas obtidas da iteração anterior ou a estimativa inicial se for a primeira iteração. Estes valores de u e v são valores conhecidos que contribuem para os coeficientes a na equação (4.73) e são distintos de u_e dos u_{nb} que são as variáveis do problema.

As equações discretas do movimento para as demais direções são tratadas de modo similar a da componente u . Para a componente v , integração da equação (4.64) sobre um

VC como indicado na Figura 4.12 leva a

$$a_n v_n = a_{wn} v_{wn} + a_{en} u_{en} + a_{sn} u_{sn} + a_{nn} u_{nn} + (p_P - p_N) A_n + b_v \Rightarrow$$

$$a_n v_n = \sum a_{nb} v_{nb} + (p_P - p_N) A_n + b_n \quad (4.75)$$

Observações semelhantes a equação da componente u são válidas para a componente v . Como antes, os coeficientes a_n e a_{nb} possuem combinações do fluxo difusivo F e da condutância de difusão D através das faces dos VCs. Seus valores são dados por:

$$F_{Wn} = (\rho u)_{Wn} = \frac{F_w + F_{nW}}{2} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_W + \rho_P}{2} \right) u_w + \left(\frac{\rho_{WN} + \rho_N}{2} \right) u_{nW} \right] \quad (4.76a)$$

$$F_{En} = (\rho u)_{En} = \frac{F_e + F_{nE}}{2} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_P + \rho_E}{2} \right) u_e + \left(\frac{\rho_N + \rho_{NE}}{2} \right) u_{nE} \right] \quad (4.76b)$$

$$F_P = (\rho v)_P = \frac{F_s + F_n}{2} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_S + \rho_P}{2} \right) v_s + \left(\frac{\rho_P + \rho_N}{2} \right) v_n \right] \quad (4.76c)$$

$$F_N = (\rho v)_N = \frac{F_n + F_{nn}}{2} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\rho_P + \rho_N}{2} \right) v_n + \left(\frac{\rho_N + \rho_{NN}}{2} \right) v_{nn} \right] \quad (4.76d)$$

$$D_{Wn} = \frac{\mu_W + \mu_P + \mu_{WN} + \mu_N}{4\delta x_{nwn}} \quad (4.76e)$$

$$D_{En} = \frac{\mu_P + \mu_E + \mu_N + \mu_{NE}}{4\delta x_{n,ne}} \quad (4.76f)$$

$$D_P = \frac{\mu_P}{\delta y_{sn}} \quad (4.76g)$$

$$D_N = \frac{\mu_N}{\delta y_{n,nn}} \quad (4.76h)$$

Como antes, em cada iteração os valores de u e v usados para avaliar os valores de F nas faces dos VCs são aqueles resultantes da iteração anterior e se diferem dos valores v_n e v_{nb} que são as variáveis da equação.

Dado um campo de pressões p , as equações discretas do movimento dadas pelas expressões (4.73) e (4.75) podem ser escritas para cada VC de u e v e então resolvidas para se obter o campo de velocidades. Se o campo de pressões for correto, então o campo de velocidades obtido irá satisfazer a equação da continuidade. Mas, como o campo de pressões é desconhecido, deve-se formular um método para o cálculo da pressão.

4.5.4 Correções para a pressão e para a velocidade

Para a solução das equações do movimento discretas é necessário que o campo de pressões seja estimado inicialmente. Esta estimativa para o campo de pressões será denotada por p^* . Estimativa inicial também é requerida para o campo de velocidades, sendo empregada para o cálculo dos fluxos convectivos e, conseqüentemente, para o cálculo dos coeficientes, conforme descrito na seção anterior. Uma vez calculados os coeficientes e o gradiente de pressão baseados nas estimativas iniciais, as equações do movimento podem ser resolvidas fornecendo componentes u^* e v^* , que satisfazem:

$$a_e u_e^* = \sum a_{nb} u_{nb}^* + (p_P^* - p_E^*) A_e + b_u \quad (4.77)$$

$$a_n v_n^* = \sum a_{nb} v_{nb}^* + (p_P^* - p_N^*) A_n + b_v \quad (4.78)$$

Isto é, as componentes u^* e v^* satisfazem às equações (4.77) (4.78) baseadas na estimativa inicial para a pressão p^* .

A ideia agora é encontrar um modo de se melhorar a estimativa inicial para a pressão p^* de modo que as componentes u^* e v^* tendam a satisfazer a equação da continuidade. Pode-se considerar que uma estimativa melhor para p^* ou que o campo de pressões correto seja dado por

$$p = p^* + p' \quad (4.79)$$

Ou seja, a pressão correta é a soma de uma estimativa p^* com uma correção p' , chamada correção da pressão.

De maneira similar, as correções para u^* e v^* em resposta à correção da pressão podem ser definidas por

$$u = u^* + u' \quad \text{e} \quad v = v^* + v' \quad (4.80)$$

Subtraindo-se as equações (4.77) e (4.78) das equações (4.73) e (4.75), respectivamente, obtêm-se

$$a_e (u_e - u_e^*) = \sum a_{nb} (u_{nb} - u_{nb}^*) + [(p_P - p_P^*) - (p_E - p_E^*)] A_e \quad (4.81)$$

$$a_n (v_n - v_n^*) = \sum a_{nb} (v_{nb} - v_{nb}^*) + [(p_P - p_P^*) - (p_N - p_N^*)] A_n \quad (4.82)$$

que, de acordo com as expressões para a correção da velocidade dadas em (4.80), podem

ser reescritas como

$$a_e u' = \sum a_{nb} u' + (p'_P - p'_E) A_e \quad (4.83)$$

$$a_n v' = \sum a_{nb} v' + (p'_P - p'_N) A_n \quad (4.84)$$

Neste ponto, uma aproximação é feita: os termos $\sum a_{nb} u'$ e $\sum a_{nb} v'$ nas equações (4.83) e (4.84) são omitidos, sendo esta a principal aproximação do algoritmo SIMPLE.

Introduzindo-se esta aproximação, obtêm-se

$$u' = d_e (p'_P - p'_E) \quad (4.85)$$

$$v' = d_n (p'_P - p'_N) \quad (4.86)$$

onde

$$d_e = \frac{A_e}{a_e} \quad \text{e} \quad d_n = \frac{A_n}{a_n} \quad (4.87)$$

As equações (4.85) e (4.86) representam as correções a serem aplicadas às velocidades pelas fórmulas dadas em (4.80), levando a

$$u_e = u_e^* + d_e (p'_P - p'_E) \quad (4.88)$$

$$v_n = v_n^* + d_n (p'_P - p'_N) \quad (4.89)$$

Expressões similares para as velocidades w e s podem ser deduzidas e são dadas por

$$u_w = u_w^* + d_w (p'_W - p'_P) \quad d_w = \frac{A_w}{a_w} \quad (4.90)$$

$$v_s = v_s^* + d_s (p'_S - p'_P) \quad d_s = \frac{A_s}{a_s} \quad (4.91)$$

Conforme descrito nas seções anteriores, o campo de velocidades deve obedecer à equação da continuidade. Integração da equação da continuidade (4.65) em um VC como o da Figura 4.10 leva a

$$[(\rho u A)_e - (\rho u A_w)] + [(\rho v A)_n - (\rho v A_s)] = 0 \quad (4.92)$$

Substituindo as velocidades corrigidas (4.88) e (4.89) na equação da continuidade discreta (4.90) e lembrando que expressões similares para as velocidades nas faces w e s podem

ser escritas, tem-se

$$\begin{aligned} & [\rho_e A_e (u_e^* + d_e (p'_P - p'_E)) - \rho_w A_w (u_w^* + d_w (p'_W - p'_P))] + \\ & [\rho_n A_n (v_n^* + d_n (p'_P - p'_N)) - \rho_s A_s (v_s^* + d_s (p'_S - p'_P))] = 0 \end{aligned} \quad (4.93)$$

A equação (4.93) pode ser reorganizada para

$$\begin{aligned} & [(\rho dA)_e + (\rho dA)_w + (\rho dA)_n + (\rho dA)_s] p'_P = \\ & (\rho dA)_w p'_W + (\rho dA)_e p'_E + (\rho dA)_s p'_S + (\rho dA)_n p'_N + \\ & [(\rho u^* A)_w - (\rho u^* A)_e + (\rho v^* A)_s - (\rho v^* A)_n] \end{aligned} \quad (4.94)$$

Identificando os coeficientes de p' pode-se escrever (4.94) como

$$a_P p'_P = a_W p'_W + a_E p'_E + a_S p'_S + a_N p'_N + b'_P \quad (4.95)$$

com os coeficientes dados por

$$a_W = (\rho dA)_w \quad (4.96a)$$

$$a_E = (\rho dA)_e \quad (4.96b)$$

$$a_S = (\rho dA)_s \quad (4.96c)$$

$$a_N = (\rho dA)_n \quad (4.96d)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N \quad (4.96e)$$

A equação (4.95) representa a equação da continuidade discreta como uma equação de correção da pressão p' . O termo fonte b' representa um desbalanceamento de massa devido o emprego do campo de velocidades u^* e v^* incorreto. Ao resolver a equação (4.95) obtém-se a correção da pressão p' em todos os pontos. Em seguida, corrige-se a pressão por meio da fórmula (4.79) e as componentes da velocidade por meio das equações (4.85) a (4.89).

A correção da pressão por meio da fórmula (4.79) deve ser sobre-relaxada para se evitar divergência durante o processo iterativo. Assim, é recomendado escrever a correção da pressão como

$$p = p^* + \alpha_p p' \quad (4.97)$$

onde α_p é o fator de sobre-relaxação, cujo valor deve ser tomado em $0 < \alpha_p < 1$.

As componentes da velocidade também necessitam de sobre-relaxação. Os fatores de sobre-relaxação podem ser incluídos diretamente nas equações discretas do movimento, podendo serem escritas como

$$\left(\frac{a_e}{\alpha_u}\right) u_e = \sum a_{nb} u_{nb} + (p_P - p_E) A_e + b_u + \left[1 - \alpha_u \frac{a_e}{\alpha_u}\right] u_e^{n-1} \quad (4.98)$$

$$\left(\frac{a_n}{\alpha_v}\right) u_n = \sum a_{nb} v_{nb} + (p_P - p_N) A_n + b_v + \left[1 - \alpha_v \frac{a_n}{\alpha_v}\right] v_n^{n-1} \quad (4.99)$$

onde α_u e α_v são os fatores de sobre-relaxação das componentes da velocidade e u_n^{n-1} e v_n^{n-1} são as componentes obtidas da iteração anterior.

A equação da correção da pressão também é afetada pela sobre-relaxação da velocidade.

Os termos d podem ser escritos como

$$d_e = \frac{A_e \alpha_u}{a_e}, \quad d_n = \frac{A_n \alpha_v}{a_n}, \quad d_w = \frac{A_w \alpha_u}{a_w}, \quad d_s = \frac{A_s \alpha_v}{a_s} \quad (4.100)$$

4.5.5 O algoritmo SIMPLE

O algoritmo descrito através das seções anteriores é conhecido como SIMPLE - *Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations*, cuja sequência de operações é:

- 1- Estimar um campo de pressões p^* e um campo de velocidades u e v para o cálculo dos coeficientes das equações do movimento.
- 2- Resolver os sistemas de equações do movimento a partir das equações (4.98) e (4.99), obtendo-se as componentes u^* e v^* baseadas na estimativa p^* .
- 3- Resolver o sistema de equações da correção da pressão obtendo-se o campo p' .
- 4- Corrigir a estimativa da pressão por meio da fórmula (4.97).
- 5- Corrigir as velocidades u^* e v^* usando a correção da pressão por meio das fórmulas (4.88) a (4.97).
- 6- Resolver os sistemas de equações para outras variáveis tais como a temperatura se estas influenciarem por meio de termos fontes ou propriedades o campo de escoamento. Se tal variável não influencia o campo de escoamento, ela pode ser resolvida após uma solução convergente das equações do movimento.

- 7- Usar as os campos p , u e v corrigidos como novas estimativas, retornando-se ao item 1 para o cálculo do coeficientes. Repete-se todo o procedimento até uma solução convergente ser obtida

Neste trabalho, a convergência é alcançada quando o módulo da diferença entre os valores das variáveis de duas iterações consecutivas é menor do que uma dada tolerância.

4.5.6 Condições de contorno para a equação da correção da pressão

Existem dois tipos de condições de contorno para a equação da correção da pressão: valor da pressão dado ou componente normal da velocidade no contorno dada.

Quando o valor da pressão é especificado no contorno, então as correções para estas pressões são zero, ou seja, $p' = 0$ nos pontos do contorno onde a pressão é dada.

Se o valor da velocidade normal no contorno é dado, como por exemplo ilustrado na Figura 4.13, onde a velocidade u_e é dada, então na derivação da equação da correção da pressão para o VC da Figura, o fluxo através da face que coincide com o contorno não deve ser expresso em termos de u^* , mas sim em termos de u_e propriamente dito. Isso vai implicar no coeficiente a_E ser igual a zero na equação de p' .

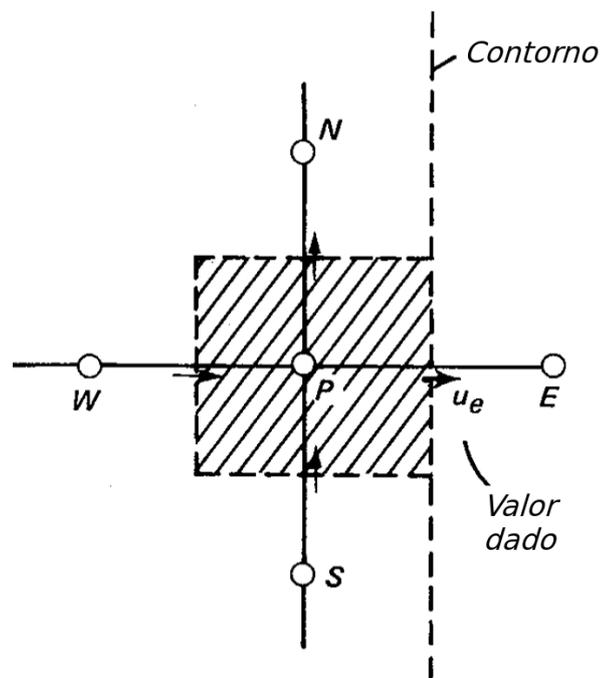


Figura 4.13: Condição de contorno com u_e dado.

Uma observação deve ser feita com respeito à natureza relativa da pressão. Em um caso estacionário de densidade constante na qual as velocidades normais são especificadas em todo o contorno, conforme descrito acima, os coeficientes da equação da correção da pressão nos correspondentes contornos serão nulos. Assim, a equação de p' fica sem como determinar os valores absolutos de p' , de modo que p' e $p' + C$, sendo C uma constante arbitrária, ambos irão satisfazer a equação de p' . Porém, em geral, os valores absolutos da pressão e da correção da pressão são irrelevantes. Apenas diferenças na pressão são relevantes que, por sua vez, não são afetadas por uma constante arbitrária adicionada ao campo p' . Portanto, diz-se que a pressão é uma variável relativa e não absoluta [23].

Apesar da natureza relativa da pressão, o uso de um método iterativo para a solução do sistema de equações garante uma solução convergente, sendo o valor absoluto decidido por meio da estimativa inicial. Já o uso de um método direto pode encontrar uma matriz singular e não fornecer uma solução. Este problema pode ser resolvido fixando-se o valor de p' em um VC arbitrário e então resolver as equações de p' para o restante dos VCs ([23]).

O algoritmo SIMPLE é o pioneiro de uma série de algoritmos e variantes deste procedimento têm sido desenvolvidas e utilizadas. Assim temos, por exemplo o algoritmo SIMPLER que não elimina nenhum termo quando da determinação da correção da pressão permitindo a obtenção de melhores aproximações para esta variável com um gasto maior de cálculos mas com uma convergência mais rápida.[24]

4.6 Aplicação a problemas transientes advectivos/difusivos

Até o momento foram considerados apenas problemas em regime estacionário, isto é, sem considerar a dependência temporal dos problemas. A equação geral de transporte de uma grandeza escalar ϕ é

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho u\phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi \quad (4.101)$$

onde o primeiro termo representa a taxa de variação temporal. Para a discretização da equação (4.101) pelo método dos volumes finitos é necessário, além da integração em um

VC, a integração sobre um intervalo de tempo finito Δt . Integrando-se no espaço e no tempo, substituindo as integrais de volume por integrais de superfície e trocando a ordem de integração do termo transiente, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{VC} \left(\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dt \right) dV + \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_A \vec{n} \cdot (\rho u \phi) dA \right) dt = \\ \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_A \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA \right) dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} S_\phi dV dt \end{aligned} \quad (4.102)$$

As integrais nos VCs já foram abordadas nas seções anteriores para os problemas estacionários e são essencialmente as mesmas nos problemas transientes. Assim, apenas a integração temporal necessita de atenção.

Primeiramente será considerada a equação da condução de calor unidimensional transiente, dada por

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + S \quad (4.103)$$

onde c é o calor específico e k a condutividade térmica.

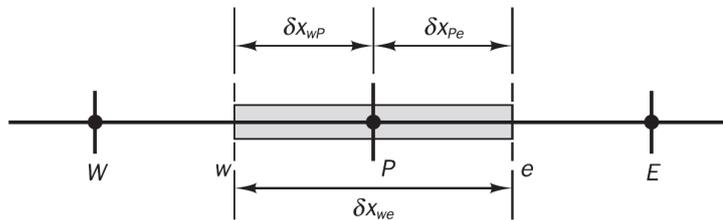


Figura 4.14: Volume de controle unidimensional.

Integração da equação (4.103) sobre o VC ilustrado na Figura 4.14 e sobre um intervalo de tempo de t a $t + \Delta t$ fornece

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dV dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dV dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} S dV dt \quad (4.104)$$

que pode ser reescrita como

$$\int_{VC} \left[\int_t^{t+\Delta t} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dt \right] dV = \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(kA \frac{\partial T}{\partial x} \right)_e - \left(kA \frac{\partial T}{\partial x} \right)_w \right] dt + \int_t^{t+\Delta t} \bar{S} \Delta V dt \quad (4.105)$$

Na equação (4.105), A é a área da face do VC, $\Delta V = A\Delta x$ o seu volume, onde $\Delta x = \delta x_{we}$

é o comprimento do VC e \bar{S} é a valor médio do termo fonte.

Supondo que a temperatura em um ponto nodal prevalece em todo o volume de controle, o lado esquerdo de (4.105) pode ser escrito como

$$\int_{VC} \left[\int_t^{t+\Delta t} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dt \right] dV = \rho c (T_P - T_P^0) \Delta V \quad (4.106)$$

onde o sobrescrito T_P^0 refere-se a temperatura no instante t enquanto que as temperaturas em $t + \Delta t$ não possuem sobrescrito. Os termos difusivos no lado direito de (4.105) podem ser discretizados pelo esquema de diferenças centrais, levando a

$$\rho c (T_P - T_P^0) \Delta V = \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(k_e A \frac{T_E - T_P}{\delta x_{PE}} \right) - \left(k_w A \frac{T_P - T_W}{\delta x_{WP}} \right) \right] dt + \int_t^{t+\Delta t} \bar{S} \Delta V dt \quad (4.107)$$

Para a avaliação do lado direito desta equação, deve-se estipular como os valores T_P , T_E e T_W variam com o tempo. Uma generalização adotada para este tipo de integral no tempo é

$$I_T = \int_t^{t+\Delta t} T_P dt = [\theta T_P + (1 - \theta) T_P^0] \Delta t \quad (4.108)$$

onde θ é um fator ponderante entre 0 e 1, cujas escolhas de valores mais comuns são

$$\theta = 0 \quad \Rightarrow \quad I_T = T_P^0 \Delta t \quad (4.109a)$$

$$\theta = 1/2 \quad \Rightarrow \quad I_T = \frac{1}{2} (T_P + T_P^0) \Delta t \quad (4.109b)$$

$$\theta = 1 \quad \Rightarrow \quad I_T = T_P \Delta t \quad (4.109c)$$

Empregando a definição dada em (4.108) na equação (4.107), reorganizando e identificando seus coeficientes obtém-se

$$\begin{aligned} a_P T_P &= a_W [\theta T_W + (1 - \theta) T_W^0] + a_E [\theta T_E + (1 - \theta) T_E^0] + \\ &[a_P^0 - (1 - \theta) a_W - (1 - \theta) a_E] T_P^0 + b \end{aligned} \quad (4.110)$$

com os coeficientes dados por:

$$a_W = \frac{k_w}{\delta x_{WP}} \quad (4.111a)$$

$$a_E = \frac{k_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.111b)$$

$$a_P = \theta(a_w + a_E) + a_P^0 \quad (4.111c)$$

$$a_P^0 = \rho c \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.111d)$$

$$b = \bar{S} \Delta x \quad (4.111e)$$

A forma final da equação discreta depende da escolha do valor de θ . Se $\theta = 0$, as temperaturas são tomadas no passo de tempo t para avaliação das novas temperaturas no instante $t + \Delta t$, e o esquema é *explícito*. Qualquer valor de θ tal que $0 < \theta \leq 1$ é chamado de implícito, sendo que quando $\theta = 1/2$ o esquema é chamado de *Crank-Nicolson* e se $\theta = 1$ o esquema é *completamente implícito*. Em ambos os métodos implícitos, a resolução de um sistema de equações é necessária para a determinação do campo T .

4.6.1 Esquema explícito

Tomando-se $\theta = 0$ na equação (4.110) obtêm-se o esquema explícito, com o termo fonte linearizado por $b = S_u + S_P T_P$ e a equação se torna

$$a_P T_P = a_W T_W^0 + a_E T_E^0 + [a_P^0 - (a_W + a_E - S_P)] T_P^0 + S_u \quad (4.112)$$

com coeficientes dados por

$$a_W = \frac{k_w}{\delta x_{WP}} \quad (4.113a)$$

$$a_E = \frac{k_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.113b)$$

$$a_P = a_P^0 \quad (4.113c)$$

$$a_P^0 = \rho c \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.113d)$$

O lado direito de (4.112) contém valores de T apenas no passo de tempo anterior necessitando-se apenas de marchar no tempo para calcular os novos valores. A facilidade da marcha no tempo é compensada pela necessidade de se restringir um valor para o passo

de tempo, condição dada por

$$\Delta t = \rho c \frac{(\Delta x)^2}{2k} \quad (4.114)$$

4.6.2 Esquema Crank-Nicolson

Tomando-se $\theta = 1/2$ na equação (4.110) resulta no chamado esquema Crank-Nicolson, com linearização do termo fonte dada por $b = S_u + \frac{1}{2}S_P T_P + \frac{1}{2}S_P T_P^0$ e a equação discreta se torna

$$a_P T_P = a_W \left[\frac{T_W + T_W^0}{2} \right] + a_E \left[\frac{T_E + T_E^0}{2} \right] + \left[a_P^0 - \frac{a_E}{2} - \frac{a_W}{2} \right] T_P^0 + S_u + \frac{1}{2}S_P T_P^0 \quad (4.115)$$

com coeficientes dados por

$$a_W = \frac{k_w}{\delta x_{WP}} \quad (4.116a)$$

$$a_E = \frac{k_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.116b)$$

$$a_P = \frac{1}{2}(a_W + a_E) + a_P^0 - \frac{1}{2}S_P \quad (4.116c)$$

$$a_P^0 = \rho c \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.116d)$$

Como mais de um valor de T é desconhecido no passo de tempo $t + \Delta t$, o método é implícito e há necessidade de se resolver um sistema de equações a cada passo de tempo. Embora seja um método implícito, há necessidade de satisfazer uma condição, embora ligeiramente menos restritiva que no caso explícito:

$$\Delta t = \rho c \frac{(\Delta x)^2}{k} \quad (4.117)$$

que serve para garantir que os coeficientes da equação sejam positivos.

4.6.3 Esquema completamente implícito

Tomando-se $\theta = 1$ na equação (4.110) resulta no chamado esquema completamente implícito, com linearização do termo fonte dada por $b = S_u + S_P T_P$ e a equação discreta se torna

$$a_P T_P = a_W T_W + a_E T_E + a_P^0 T_P^0 + S_u \quad (4.118)$$

onde os coeficientes são dados por

$$a_W = \frac{k_w}{\delta x_{WP}} \quad (4.119a)$$

$$a_E = \frac{k_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.119b)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_P^0 - S_P \quad (4.119c)$$

$$a_P^0 = \rho c \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.119d)$$

Ambos os lados de (4.118) possuem temperaturas desconhecidas no passo de tempo $t + \Delta t$, necessitando a resolução de um sistema de equações a cada passo de tempo. A vantagem do método completamente implícito é que não existem restrições para que os coeficientes sejam positivos, tornando o método incondicionalmente estável para qualquer tamanho do passo de tempo. Pelas características de robustez e estabilidade incondicional, o método totalmente implícito é recomendado para a maioria dos problemas transientes.

4.6.4 *Discretização de problemas de convecção-difusão transientes*

A extensão do problema de difusão transiente unidimensional para os problemas mais gerais de convecção-difusão transientes em duas ou três dimensões é relativamente direta e simples. A discretização espacial nos volumes de controle dos termos convectivo e difusivo seguem a mesma linha de raciocínio apresentada nas seções anteriores, enquanto que para a discretização temporal tem-se a opção de adotar os algoritmos explícito ou implícito.

Em problemas gerais de escoamento, também utiliza-se o esquema híbrido para a discretização dos termos convectivos. Assim, a equação de convecção-difusão transiente bidimensional é dado por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S \quad (4.120)$$

A equação discreta correspondente à equação (4.120) empregando-se discretização temporal totalmente implícita e discretização espacial do termo convectivo pelo esquema

híbrido é

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_P^0 \phi_P^0 + S_u \quad (4.121)$$

com os coeficientes dados por

$$a_W = \max \left[F_w, \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right), 0 \right] \quad (4.122a)$$

$$a_E = \max \left[-F_e, \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right), 0 \right] \quad (4.122b)$$

$$a_S = \max \left[F_s, \left(D_s + \frac{F_s}{2} \right), 0 \right] \quad (4.122c)$$

$$a_N = \max \left[-F_n, \left(D_n - \frac{F_n}{2} \right), 0 \right] \quad (4.122d)$$

$$a_P^0 = \frac{\rho_P^0 \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (4.122e)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + (F_e - F_w + F_n - F_s) - S_P \quad (4.122f)$$

4.6.5 O algoritmo SIMPLE transiente

O algoritmo SIMPLE, formulado para problemas de escoamento estacionários, pode ser aplicado para problemas transientes. Em relação ao que foi aqui apresentado anteriormente, as diferenças ficam por conta da inclusão dos termos transientes nas equações do movimento e na equação da conservação da massa. O sistema de equações do movimento e da conservação da massa transientes é:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v u) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial p}{\partial x} + S_u \quad (4.123)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u v) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v v) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \frac{\partial p}{\partial y} + S_v \quad (4.124)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0 \quad (4.125)$$

A discretização dessas equações segue toda linha de raciocínio apresentada neste capítulo e pode ser feita sem maiores dificuldades. Caso a massa específica ρ seja constante, a equação da continuidade na forma da equação da correção da pressão continuará tendo a mesma forma que no caso estacionário.

Deve-se observar que em problemas transientes, o algoritmo SIMPLE é executado a cada passo de tempo até a convergência. A Figura 4.15 mostra um fluxograma para a aplicação do algoritmo SIMPLE transiente, onde ϕ representa uma grandeza escalar

qualquer, tal como a temperatura.

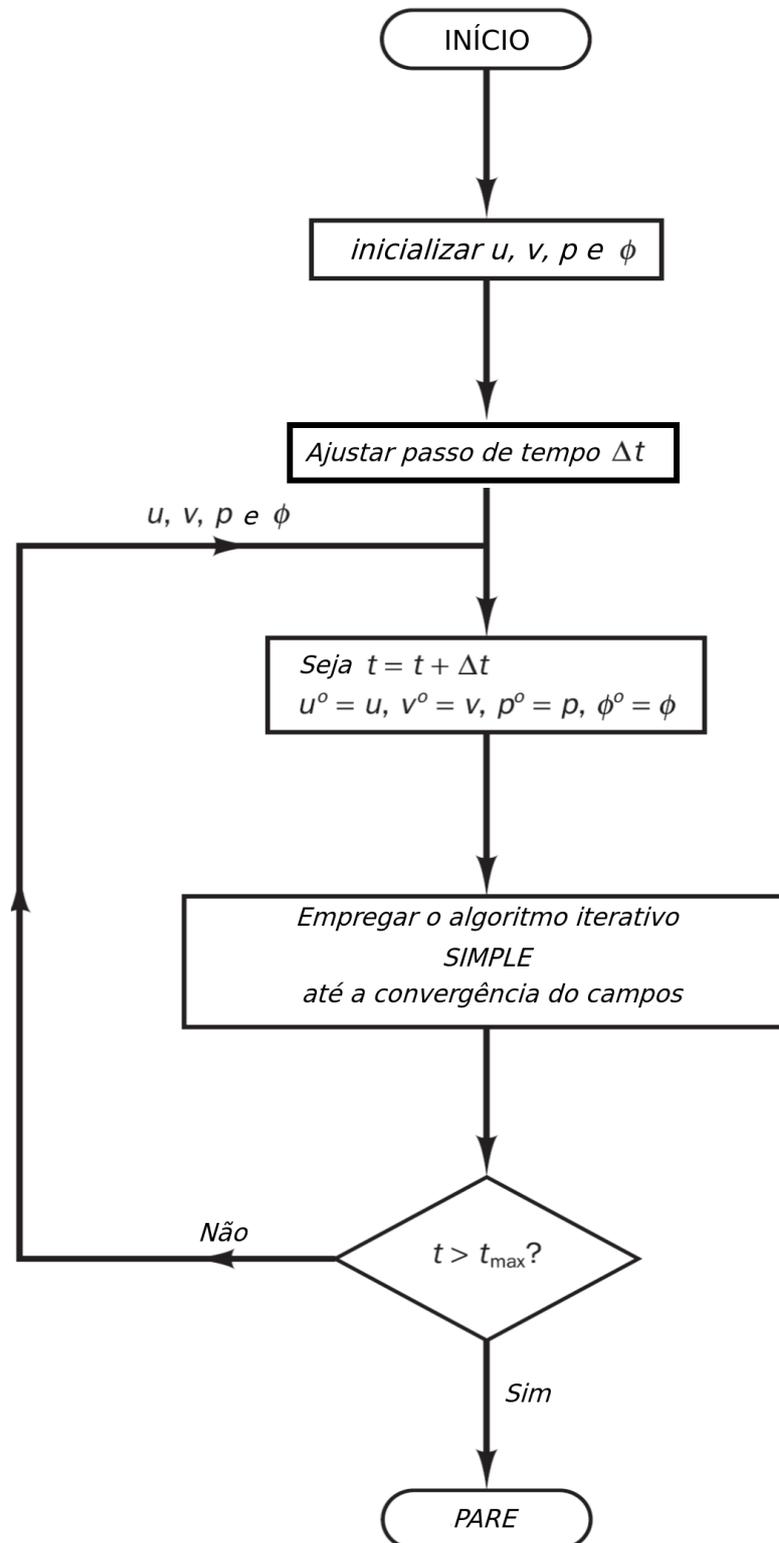


Figura 4.15: Algoritmo SIMPLE transiente.

4.7 Exemplos numéricos

Nesta seção apresentam-se alguns exemplos numéricos com o intuito de demonstrar a aplicação dos esquemas de discretização abordados nas seções anteriores e também de demonstrar as funcionalidades do algoritmo iterativo SIMPLE. Os exemplos apresentados foram reproduzidos através do desenvolvimento de códigos computacionais escritos com a linguagem de programação Python. O Python é uma linguagem de programação de alto nível cuja primeira versão foi publicada em 1991. O Python suporta vários paradigmas de programação, como a programação estruturada, a programação orientada a objetos e também alguns elementos da programação funcional. O Python também possui bibliotecas com diversos algoritmos e funções prontas para uso, como a biblioteca Numpy (com elementos e rotinas baseadas na Álgebra Linear), o Scipy (com tratamento de matrizes esparsas, solvers entre outros) e o Matplotlib (para manipulação de dados através da geração de gráficos).

4.7.1 Exemplo 1

O primeiro exemplo trata de um escoamento em regime estacionário descrito em Malalasekera [24]. A Figura 4.16 ilustra o problema.

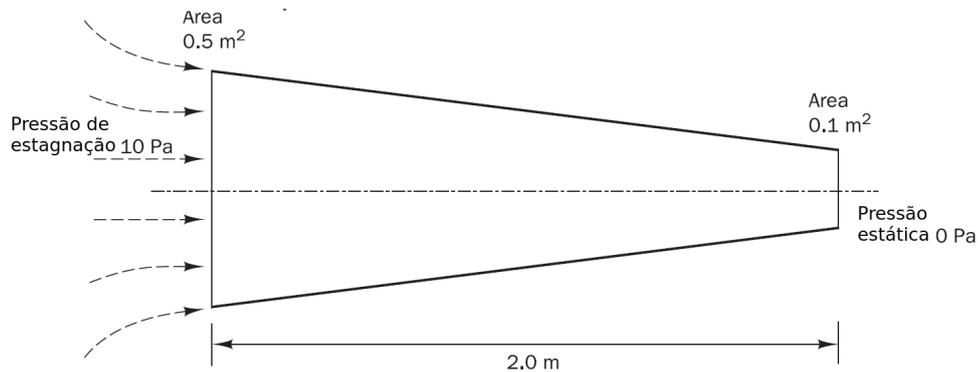


Figura 4.16: Geometria do problema.

As equações governantes para o estado estacionário, unidimensional e sem atrito através do duto ilustrado na Figura 4.16 são:

$$\frac{d}{dx}(\rho Au) = 0 \quad (\text{conservação da massa}) \quad (4.126)$$

$$\rho u A \frac{du}{dx} = -A \frac{dp}{dx} \quad (\text{conservação do movimento}) \quad (4.127)$$

No problema proposto, cinco pontos discretos (incluindo os contornos) são usados para a pressão enquanto quatro pontos discretos são usados para as velocidades. As velocidades estão localizadas nas faces dos VCs da pressão enquanto a pressão está armazenada nas faces dos VCs da velocidade (malha deslocada). O domínio discreto é ilustrado na Figura 4.17.

Os dados do problema são:

- Massa específica $\rho = 1,0 \text{ kg/m}^3$.
- Comprimento do duto: $l = 2,0 \text{ m}$ com espaçamento uniforme $\Delta x = l/4 = 0,5 \text{ m}$.
- Área na entrada: $A_A = 0,5 \text{ m}^2$; área na saída: $A_E = 0,1 \text{ m}^2$. A variação da área é uma função da distância a partir da entrada: $A(x) = -0,2x + 0,5$.
- Condições de contorno: pressão de estagnação dada na entrada: $p_0 = 10 \text{ Pa}$; pressão estática dada na saída: $p_E = 0 \text{ Pa}$.
- estimativa inicial do campo de velocidades: Arbitrando-se um fluxo de massa, $\dot{m}^* = 1,0 \text{ kg/s}$, calcula-se as velocidades por meio de $u = \dot{m}^*/(\rho A)$: $u_1 = 2,22222 \text{ m/s}$, $u_2 = 2,85714 \text{ m/s}$, $u_3 = 4,00000 \text{ m/s}$, $u_4 = 6,66666 \text{ m/s}$.
- estimativa inicial do campo de pressões: Assumindo variação linear da pressão entre os pontos A e E : $p_A^* = p_0 = 10,0 \text{ Pa}$, $p_B^* = 7,5 \text{ Pa}$, $p_C^* = 5,0 \text{ Pa}$, $p_D^* = 2,5 \text{ Pa}$, $p_E^* = 0,0 \text{ Pa}$.

Pode-se mostrar que o fluxo de massa exato deste problema é $\dot{m} = 0,44721 \text{ kg/s}$ e a pressão é dada por $p(x) = p_0 - 0,5\rho\dot{m}^2/\rho^2A(x)^2$

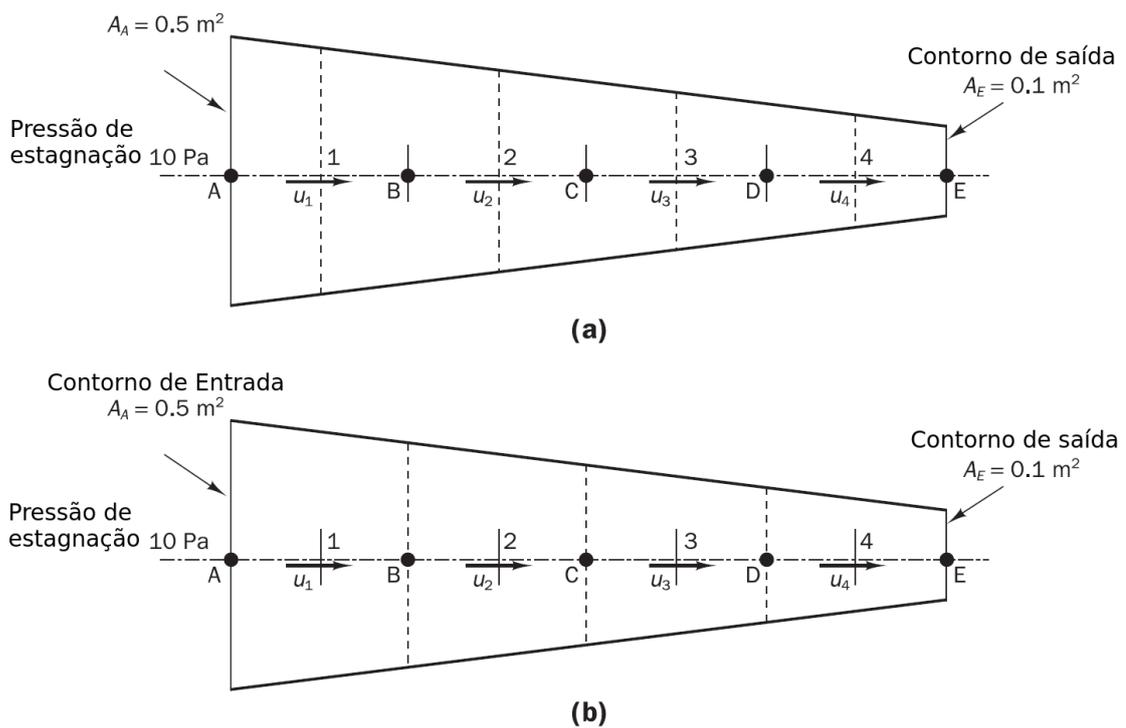


Figura 4.17: (a) VCs para a pressão; (b) VCs para a velocidade.

A solução numérica deste problema usando o código implementado em Python foi obtida aplicando-se os mesmos parâmetros de Malalasekera, ou seja, fatores de sobre-relaxação $\alpha_u = \alpha_p = 0,8$ para a velocidade e para a correção da pressão, respectivamente e uma tolerância de 10^{-5} leva a uma solução convergente com o algoritmo SIMPLE após 22 iterações (contra 19 iterações do autor), com valores ilustrados na tabelas a seguir.

Velocidade (m/s)

Ponto	Malalasekera	código Python	Exata
1	1.38265	1.38268333	0.99381
2	1.77775	1.77773571	1.27775
3	2.48885	2.48883	1.78885
4	4.14808	4.14804999	2.98142

Pressão (Pa)

Ponto	Malalasekera	código Python	Exata
A	9.22569	9.22571566	9.60000
B	9.00415	9.00418764	9.37500
C	8.25054	8.25060821	8.88889
D	6.19423	6.19427417	7.50000
E	0	0	0

Os resultados indicados na tabela mostram que há boa concordância entre os resultados obtidos por Malalasekera (Numérica) e os resultados obtidos pelo código implementado em Python. Além disso, as razoáveis diferenças entre ambas as soluções numéricas e a solução exata pode ser explicada pelo uso de poucos pontos para o cálculo das soluções.

As Figuras 4.18 e 4.19 ilustram, respectivamente, o campo de velocidade e o campo de pressão obtidos com o Python e as soluções analíticas correspondentes.

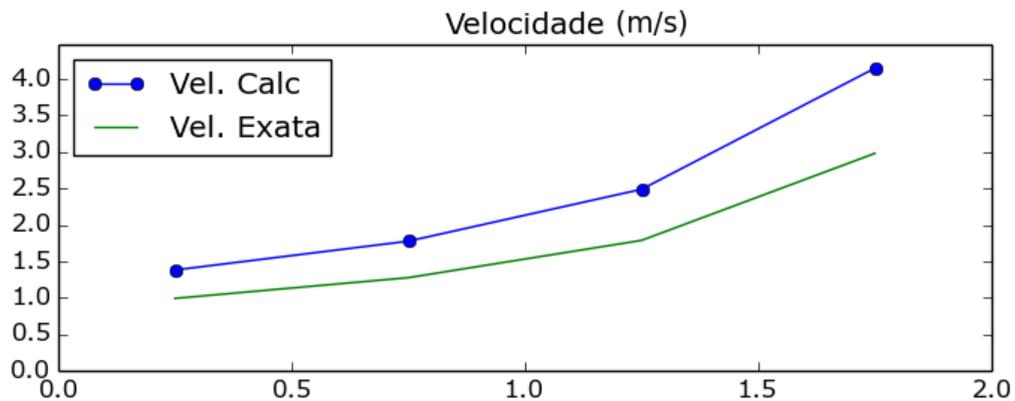


Figura 4.18: Campo de velocidade obtido com o código Python.

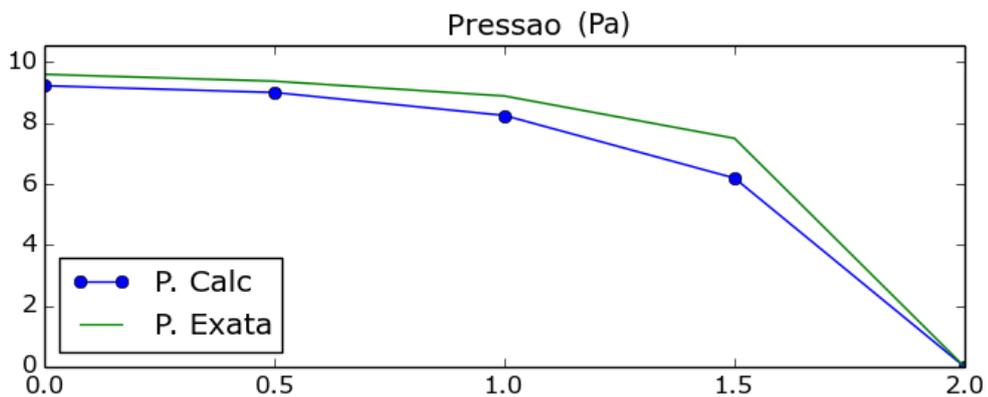


Figura 4.19: Campo de pressão obtido com o código Python.

Conforme indicado pelas tabelas e ilustrado pelas Figuras 4.18 e 4.19, devido ao emprego de poucos pontos na solução discreta, os resultados não aproximam muito bem da solução analítica.

As Figuras 4.20, 4.21 e 4.22 mostram o comportamento das soluções numéricas e das soluções analíticas conforme aumenta-se a quantidade de pontos discretos, nos casos 16, 32 e 64 VCs.

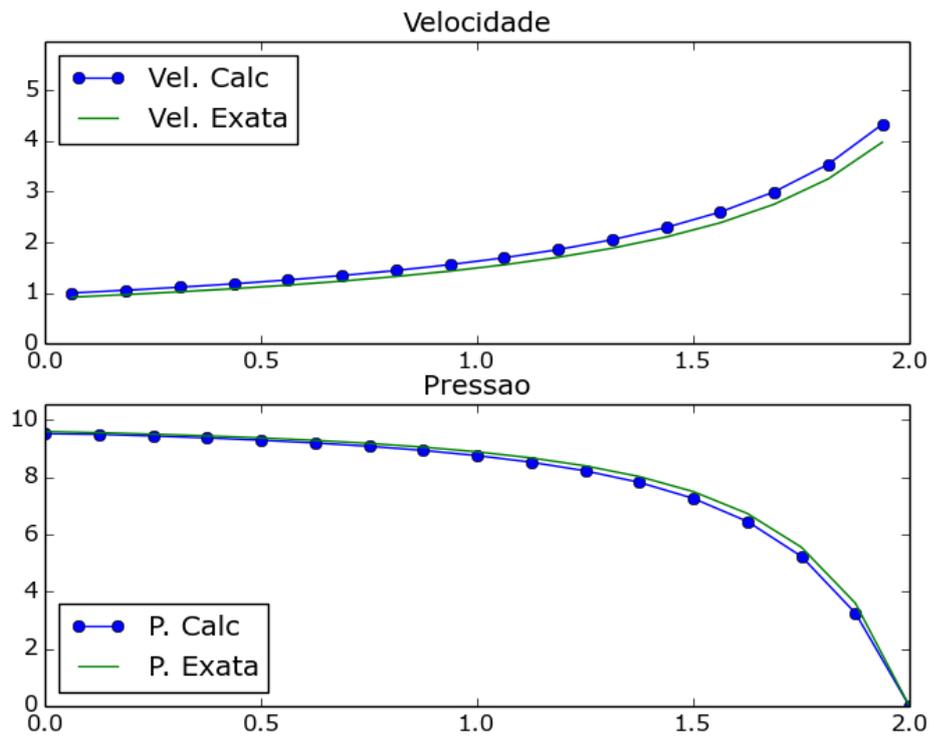


Figura 4.20: Soluções numéricas com o código Python e 16 VCs.

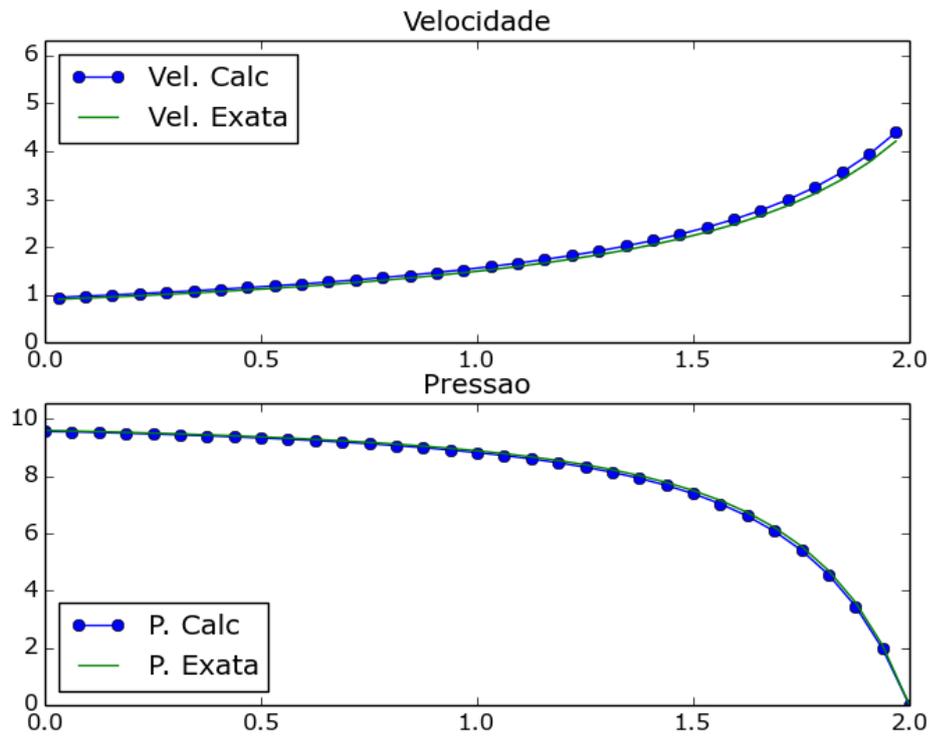


Figura 4.21: Soluções numéricas com o código Python e 32 VCs.

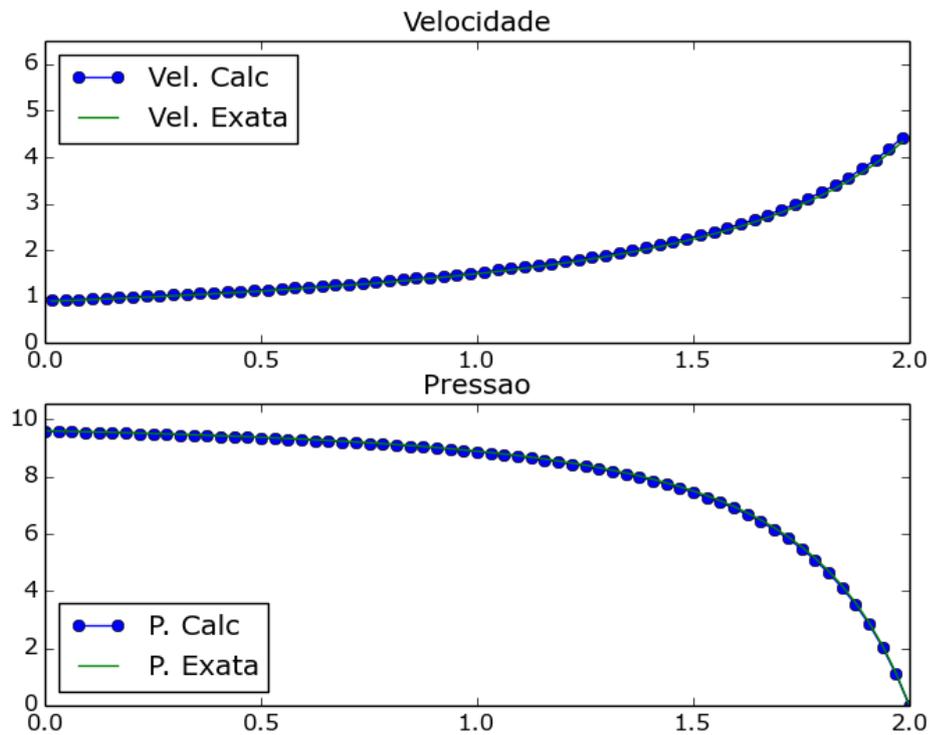


Figura 4.22: Soluções numéricas com o código Python e 64 VCs.

Como esperado, o aumento do número de pontos reflete em uma melhoria na qualidade da solução numérica, aproximando melhor a solução analítica.

4.7.2 Exemplo 2

O segundo exemplo numérico empregando o método dos volumes finitos e o algoritmo SIMPLE, consiste no chamado *lid-driven cavity flow* [25, 26, 27, 28, 29]. Este problema trata do movimento de um fluido dentro de uma cavidade retangular gerado por uma velocidade translacional de um dos lados enquanto os demais lados permanecem em repouso.

Neste exemplo são ilustrados resultados encontrados no trabalho de Goodrich [25]. As equações governantes para o problema são as equações de Navier-Stokes para fluidos Newtonianos incompressíveis e a equação de conservação da massa. A Figura 4.23 ilustra as condições de contorno para o problema estudado. A condição inicial é $u = v = 0$ em todo o domínio.

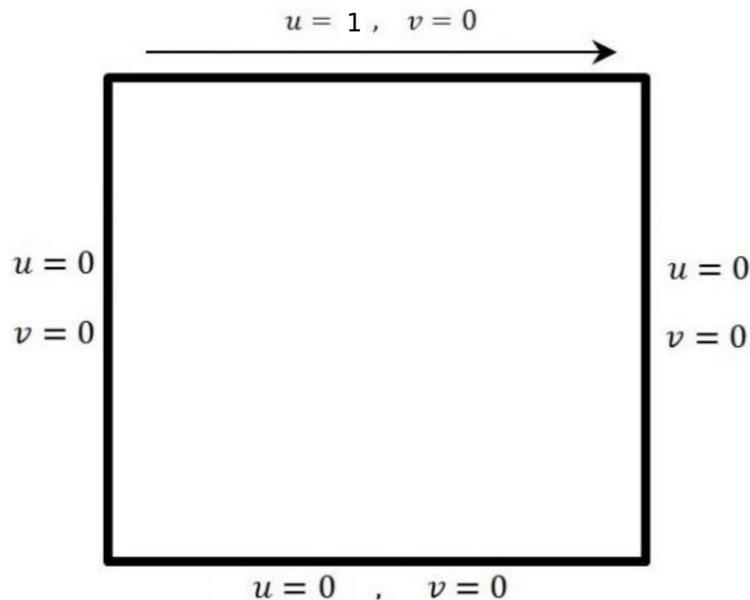


Figura 4.23: Condições de contorno para o problema da cavidade.

As equações de Navier-Stokes foram discretizadas com o esquema híbrido para os termos convectivos e com diferenças centrais para os termos difusivos; a discretização temporal é implícita. A malha empregada nas simulações é de dimensão 40×40 e a dimensão da cavidade é $l = 1 \text{ m}$.

O método de solução empregado em [25] para resolver as equações de Navier-Stokes

é baseado nas variáveis primitivas como incógnitas. Emprega um método implícito de Crank-Nicolson com diferenças centrais para as derivadas espaciais.

As Figuras de 4.24 até 4.29 mostram a evolução do campo de velocidades ao longo do tempo. Os instantes exibidos são $t = 0,1s$, $t = 1,0s$, $t = 2,0s$, $t = 4,0s$, $t = 8,0s$ e $t = 36,0s$. Os parâmetros do problema são tais que o número de Reynolds do problema é $Re = 400$.

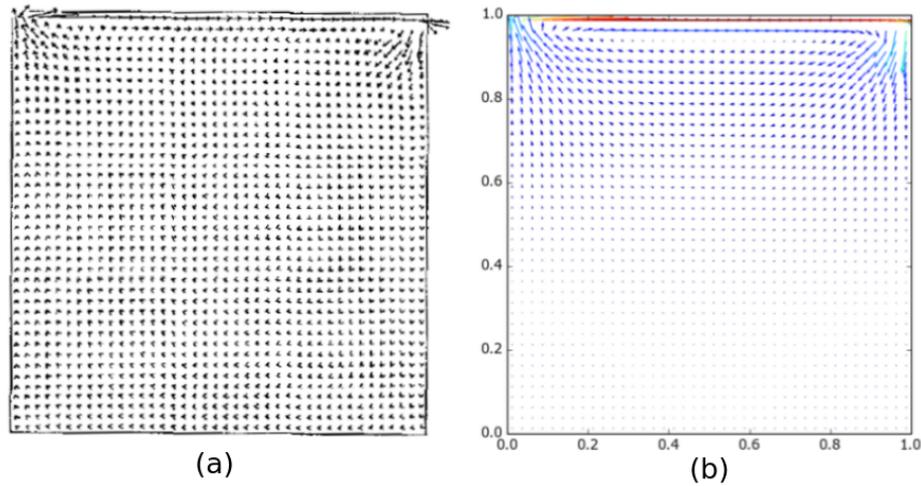


Figura 4.24: Campos de velocidade em $t = 0,1s$. (a) Goodrich; (b) Código Python.

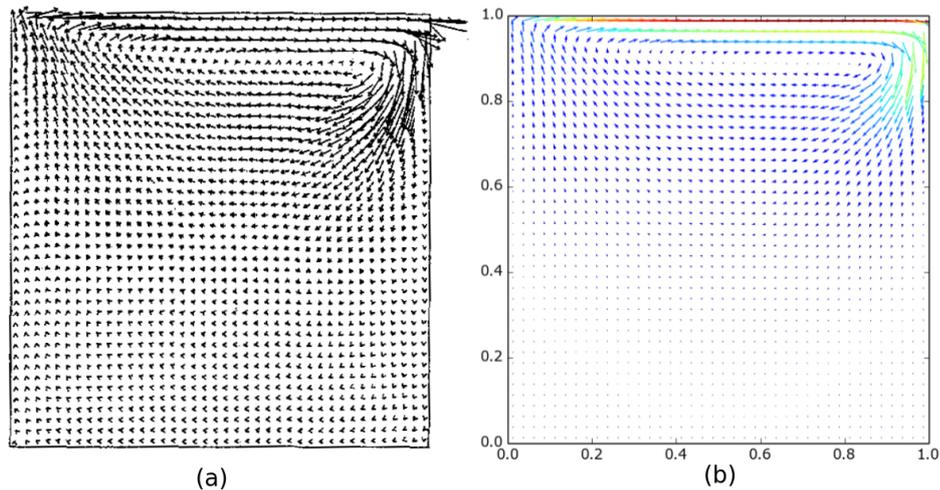


Figura 4.25: Campos de velocidade em $t = 1,0s$. (a) Goodrich; (b) Código Python.

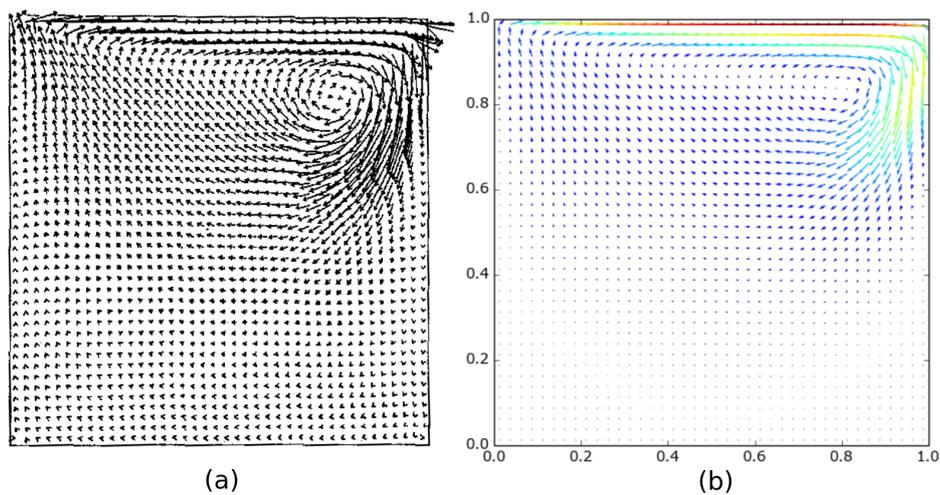


Figura 4.26: Campos de velocidade em $t = 2,0s$. (a) Goodrich; (b) Código Python.

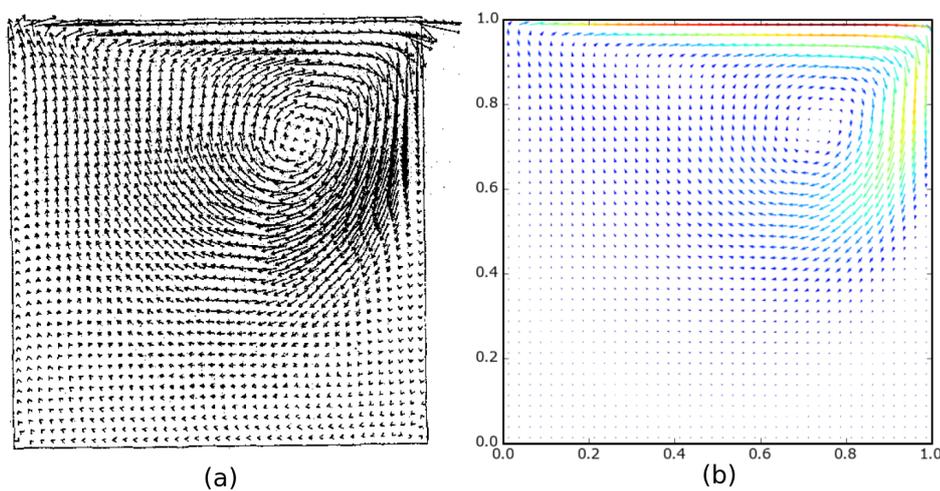


Figura 4.27: Campos de velocidade em $t = 4,0s$. (a) Goodrich; (b) Código Python.

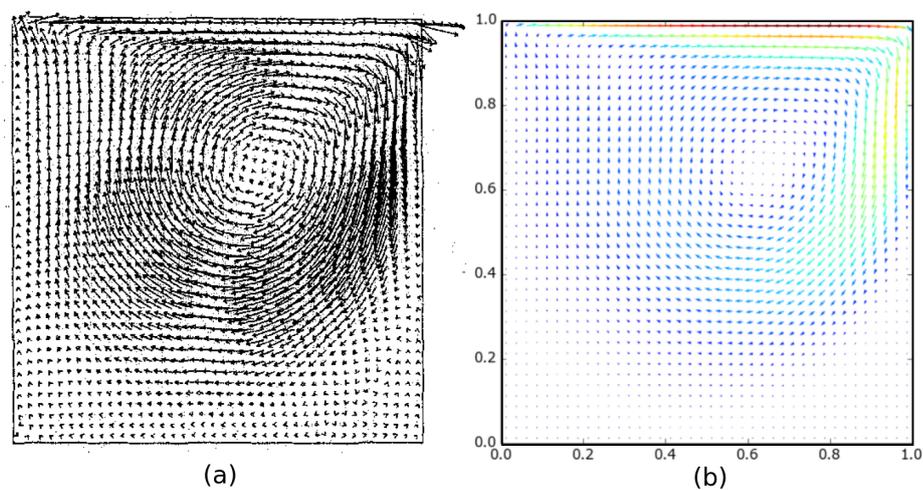


Figura 4.28: Campos de velocidade em $t = 8,0s$. (a) (a) Goodrich; (b) Código Python.

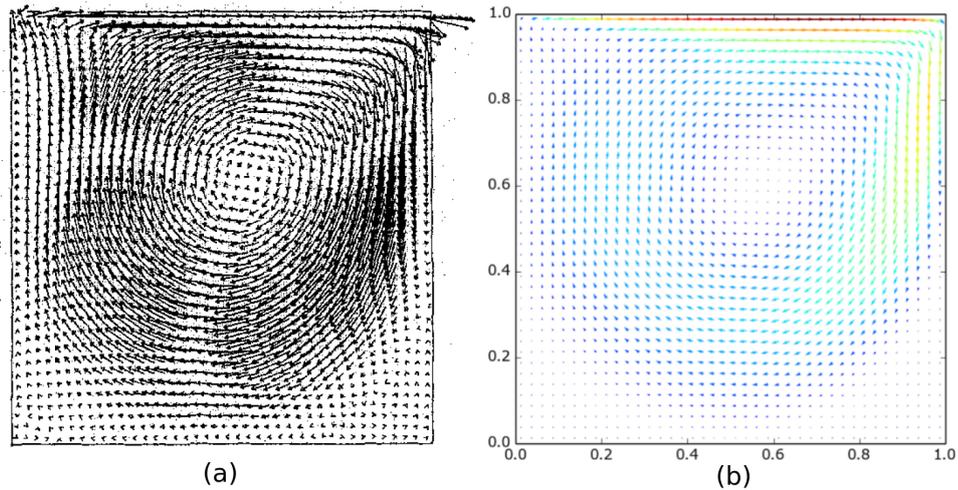


Figura 4.29: Campos de velocidade em $t = 36, 0s$. (a) Goodrich; (b) Código Python.

Como pode ser observado pelas Figuras 4.24 até 4.29, os resultados estão em boa concordância, o que permite verificar a validade do código implementado.

As Figuras 4.30 a 4.35 ilustram as linhas de corrente para os mesmos instantes de tempo dos campos de velocidade. Em (a) são os resultados obtidos por Soh e Goodrich e em (b) os resultados obtidos com a implementação em Python.

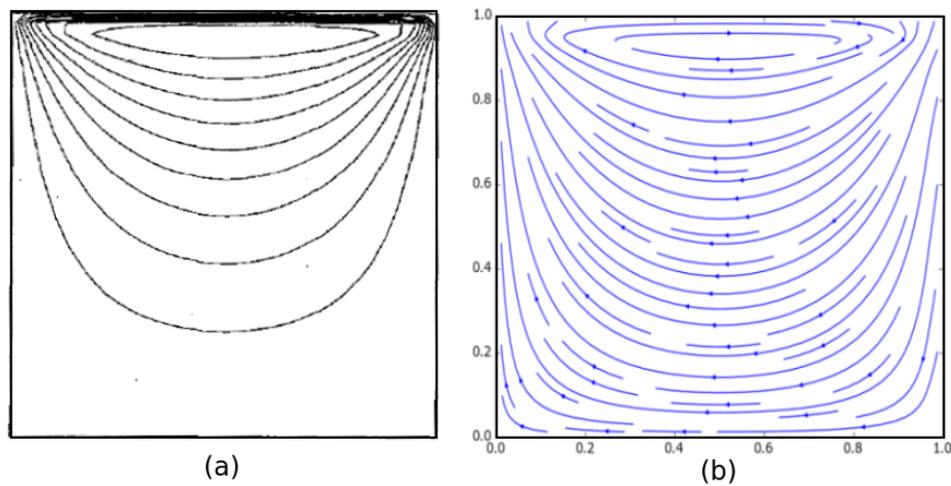


Figura 4.30: Linhas de corrente em $t = 0, 1s$. (a) Soh e Goodrich; (b) Python.

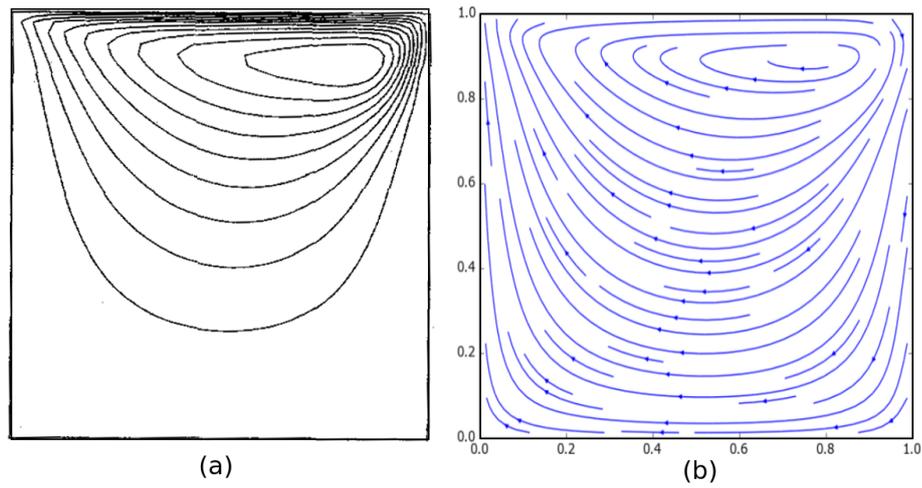


Figura 4.31: Linhas de corrente em $t = 1,0s$. (a) Goodrich; (b) Código Python.

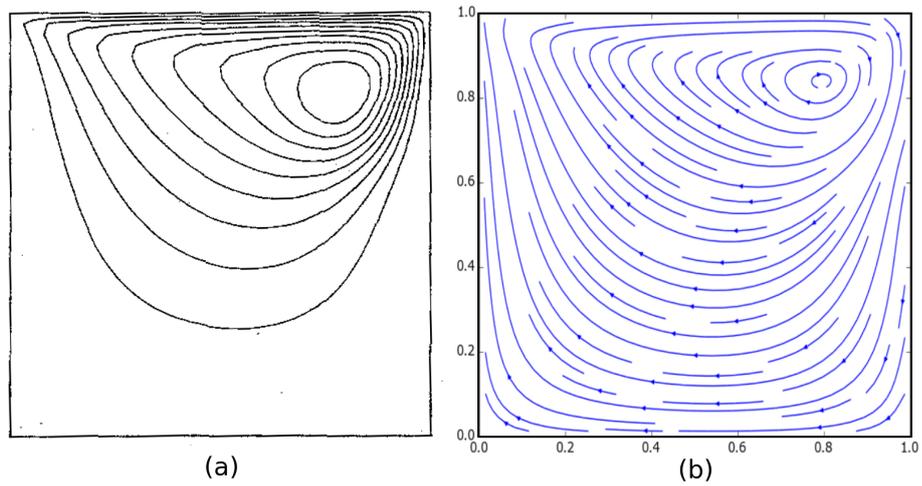


Figura 4.32: Linhas de corrente em $t = 2,0s$. (a) Goodrich; (b) Código Python.

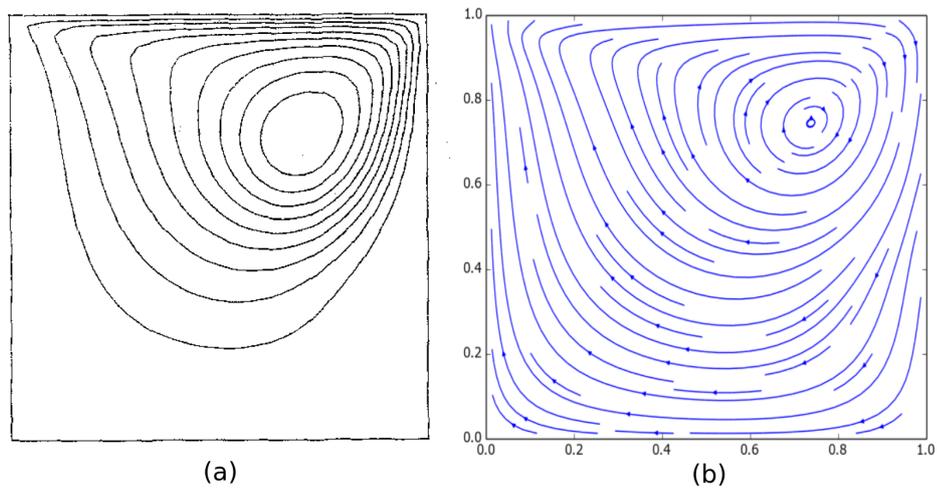


Figura 4.33: Linhas de corrente em $t = 4,0s$. (a) Goodrich; (b) Código Python.

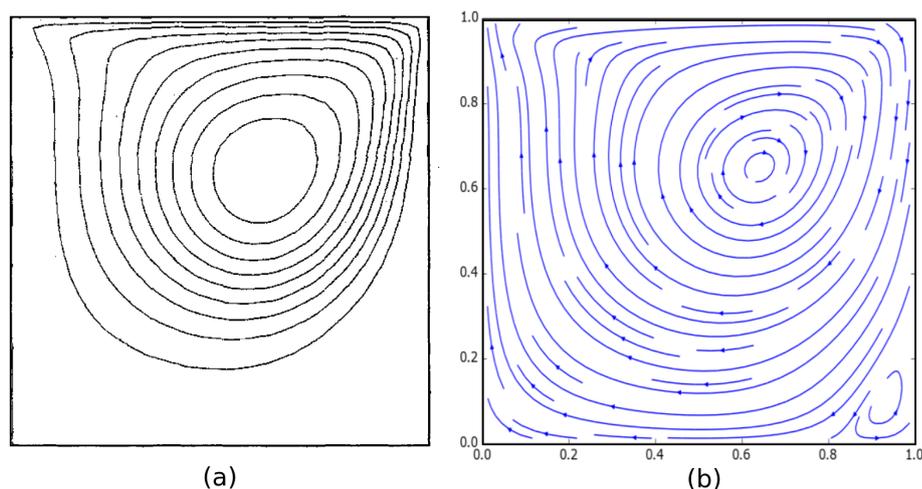


Figura 4.34: Linhas de corrente em $t = 8, 0s$. (a) Goodrich; (b) Código Python.

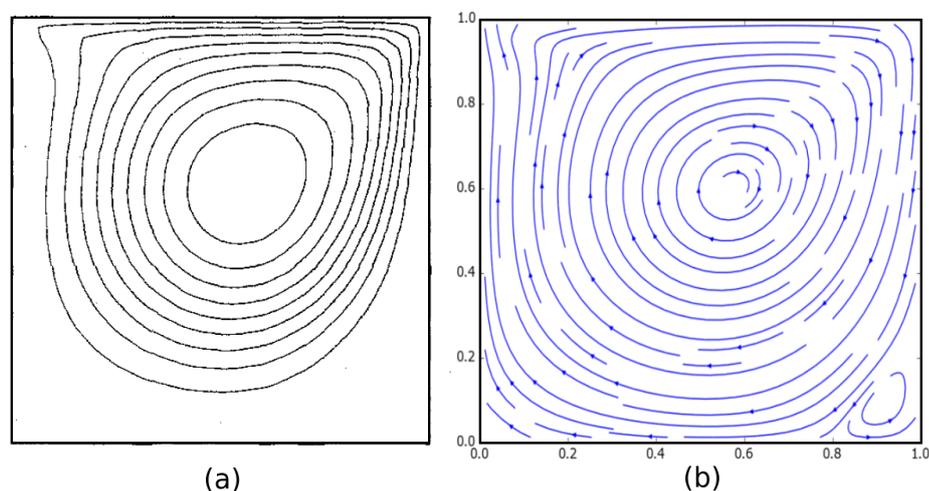


Figura 4.35: Linhas de corrente em $t = 36, 0s$. (a) Goodrich; (b) Código Python.

Como pode ser observado, as linhas de correntes obtidas com o Python reproduzem com fidelidade os mesmos resultados obtidos pelos autores.

Nos problemas de mudança de fase a serem abordados no próximo capítulo utiliza-se o algoritmo SIMPLE para solução das equações de Navier-Stokes para fluidos Newtonianos incompressíveis tal como aqui descrito, acrescido da resolução do problema de transferência de calor em termos da entalpia. As equações de Navier-Stokes são modificadas de acordo com a estratégia do método da entalpia/porosidade com o objetivo de acompanhar a evolução da frente de mudança de fase juntamente com o movimento do fluido devido a convecção natural.

5 O MÉTODO DA ENTALPIA-POROSIDADE

5.1 Introdução

Muitos trabalhos no estudo de problemas de mudança de fase são baseados apenas na condução de calor como o único mecanismo de transporte de calor no domínio do problema, sendo necessário a formulação do problema apenas em termos da equação da energia na forma da equação do calor [30]. Porém, os processos de fusão e solidificação são normalmente acompanhados por variações na densidade devido a gradientes de temperatura que induzem movimento de material durante o processo de mudança de fase que alteram significativamente o transporte de calor, necessitando a solução das equações do movimento além da equação da energia [2].

Grande parte dos materiais possuem densidades diferentes nos estados sólido e líquido [14], sendo em geral $\rho_L < \rho_S$, ou seja, a densidade no estado líquido é menor que a densidade no estado sólido. Isso significa que o material se expande em um processo de fusão e se contrai em um processo de solidificação [2]. Em processos de mudança de fase em recipientes fechados, é necessário acomodar de alguma forma essas variações de volume para evitar problemas como a formação de vazios, tensões residuais e deformações tanto do material solidificado quanto do recipiente que o contém [31]. Assim, além dos efeitos de expansão e contração de material, a variação da densidade (usualmente em função da temperatura) induz o efeito da convecção natural no líquido, acarretando o transporte de calor e matéria que deve então ser levado em conta na sua modelagem.

Esses problemas de mudança de fase mais complexos, onde efeitos antes desprezados por modelos como os problemas de Stefan, requerem além da aplicação da equação da energia, a aplicação das equações governantes de transporte: a equação da conservação da massa e as equações de Navier-Stokes.

Dessa forma um grande número de métodos numéricos pode ser encontrado na literatura para a resolução desses problemas podendo estes métodos serem subdivididos em dois grupos: métodos de malha fixa e métodos de malha adaptativa. Nos métodos de

malha adaptativa um conjunto de equações de conservação é aplicado separadamente em cada uma das fases. Condições de continuidade da temperatura e do fluxo de calor devem ser formuladas na interface sólido-líquido. Como a interface se desloca com o tempo, a malha computacional precisa ser adaptada a cada passo de tempo para acompanhar a forma e a posição da interface [32]. Nos métodos de malha fixa, como o adotado no presente trabalho, um único conjunto de equações de conservação é aplicado a todo o domínio do problema, tanto na fase sólida quanto na líquida, não havendo necessidade da formulação de condições na interface sólido-líquido, sendo estas incorporadas por meio de termos fonte nas equações governantes. A condição de que as velocidades computadas por meio das equações de movimento devem ser nulas na região sólida deve ser atendida. Algumas técnicas para impor esta condição podem ser encontradas em [15], [16], [17], [33], [34] e [35].

Dentre essas técnicas, para atender a condição de velocidade nula na região sólida, o método da entalpia-porosidade é um dos mais empregados. Neste método a interface ou a região que contém a interface (conhecida como zona *mushy*) é modelada como um meio pseudo-poroso, com a porosidade sendo definida como função de uma quantidade chamada fração líquida. Este método é implementado através da adição de termos fonte nas equações de conservação da quantidade de movimento, baseado na lei de Darcy e na equação de Carman-Kozeny [15], cuja vantagem é funcionar adequadamente tanto no caso de mudança de fase isotérmica (envolvendo materiais puros) quanto para o caso de mudança de fase ocorrendo dentro de uma faixa de temperaturas (envolvendo misturas ou ligas e dando origem a zona *mushy*), na qual coexistem partes solidificadas junto com a fase líquida.

Neste capítulo, apresenta-se o método da entalpia-porosidade e detalhes do funcionamento do algoritmo são discutidos. Resultados numéricos são apresentados e comparados com resultados numéricos encontrados na literatura.

5.2 Equações governantes

Para a formulação das equações utilizadas no processo de mudança de fase no método da entalpia-porosidade assume-se que os materiais no estado líquido se comportam como fluidos Newtonianos incompressíveis e que as propriedades termofísicas dos materiais

permanecem constantes dentro da faixa de temperaturas abordadas, com exceção da densidade. Considera-se a variação da densidade com a temperatura por meio da aproximação de Boussinesq ([22], [36]), ou seja, densidade constante em todos os termos das equações governantes exceto para um termo fonte de flutuabilidade adicionado à equação da conservação da quantidade de movimento relativa à componente vertical da velocidade (na direção da gravidade). Como os problemas abordados são tratados por meio de malhas fixas, o mesmo conjunto de equações governantes é utilizado em todo o domínio dos problemas. Com essas hipóteses, as equações diferenciais da conservação da massa (ou equação da continuidade), da conservação da quantidade de movimento e da conservação da energia podem ser escritas como:

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} u) - \nabla \cdot (\mu \nabla u) = -\frac{\partial p}{\partial x} + S_u \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} v) - \nabla \cdot (\mu \nabla v) = -\frac{\partial p}{\partial y} + S_v \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} h) - \nabla \cdot (\alpha \nabla h) = S_h \quad (5.4)$$

5.3 Termos fonte

No método da entalpia porosidade, o calor latente é levado em consideração na equação da energia atribuindo-se um valor nodal para o calor latente de acordo com a temperatura da célula. Durante a mudança de fase, o calor latente é ajustado para levar em conta a absorção ou liberação do calor latente por meio de um termo fonte na equação da energia.

A entalpia total de um material pode ser escrita como a soma da entalpia sensível com o conteúdo do calor latente. A entalpia sensível pode ser escrita como ([15])

$$h = \int_{T_{ref}}^T c(\tau) d\tau = c(T - T_{ref}) \quad (5.5)$$

considerando-se que o calor específico c é constante e que T_{ref} é a temperatura de referência. O conteúdo do calor latente ou calor latente total é definido como uma função da temperatura, $\Delta H = f(T)$ restrito ao intervalo $0 < \Delta H < L$. A forma do termo fonte S_h na equação (5.4), pode ser obtida substituindo-se a relação (5.5) na equação da energia

para a entalpia total desde que $H = h + \Delta H$.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} H) - \nabla \cdot (k \nabla T) = 0 \quad (5.6)$$

Após algumas operações chega-se a equação (5.4) obtendo-se o termo fonte S_h que é dado por:

$$S_h = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho \Delta H) - \nabla \cdot (\rho \vec{V} \Delta H) \quad (5.7)$$

O calor latente total tem valor igual a 0 quando o material é sólido a temperatura $T = T_m$ (a temperatura de fusão) no caso de mudança de fase isotérmica, ou quando a temperatura é $T = T_s$, temperatura na qual o material completa sua solidificação no caso de mudança de fase em uma faixa de temperaturas; o calor latente total tem valor igual a L (o calor latente de fusão) quando o material é líquido à temperatura $T = T_m$ no caso de mudança isotérmica ou $T = T_l$, temperatura na qual a solidificação se inicia, no caso de mudança não isotérmica.

Assim, o calor latente total pode ser calculado no caso de mudança de fase não isotérmica por

$$\Delta H = L \times f_L \quad (5.8)$$

onde f_L é uma quantidade definida como fração líquida da célula, representando um percentual do quanto da célula é ocupada pelo material no estado líquido que, no caso de mudança de fase não isotérmica é calculada por meio de uma relação com a temperatura. Entre diversos perfis possíveis, adota-se neste trabalho a relação linear

$$f_L = \begin{cases} 0, & \text{se } T < T_s \quad (\text{sólido}) \\ \frac{T - T_s}{T_l - T_s}, & \text{se } T_s \leq T \leq T_l \quad (\text{zona mushy}) \\ 1, & \text{se } T > T_s \quad (\text{líquido}) \end{cases} \quad (5.9)$$

Com isso, da relação (5.8) obtêm-se:

$$\begin{cases} \text{se } f_L = 0, & (\text{sólido}), \quad T \leq T_s \quad \text{ou} \quad T < T_m \quad (\Delta H = 0) \\ \text{se } 0 < f_L < 1, & (\text{zona mushy}), \quad T_s < T < T_l \quad (0 < \Delta H < L) \quad \text{ou} \quad T = T_m \\ \text{se } f_L = 1, & (\text{líquido}), \quad T \geq T_l \quad \text{ou} \quad T > T_m \quad (\Delta H = L) \end{cases}$$

Observa-se que o caso de mudança de fase isotérmica pode ser considerado um caso

particular da mudança não isotérmica, ou seja, quando $T_l = T_s = T_m$, levando a

$$f_L = \begin{cases} 0, & \text{se } T < T_m \quad (\text{sólido}) \Rightarrow \Delta H = 0 \\ 1, & \text{se } T > T_m \quad (\text{líquido}) \Rightarrow \Delta H = L \end{cases} \quad (5.10)$$

Quando $T = T_m$, tem-se $0 < \Delta H < L$ e esta região é definida como a interface sólido-líquido. Da relação (5.8) também pode-se obter a fração líquida por meio de

$$f_L = \frac{\Delta H}{L} \quad (5.11)$$

ou seja, dada uma distribuição de temperatura, pode-se obter a fração líquida diretamente da equação (5.11).

Como já descrito, nos métodos de malha fixa há necessidade de fazer com que as velocidades computadas pelas equações do movimento atendam a condição de serem nulas nas células computacionais que estejam na fase sólida. No método da entalpia-porosidade, as células computacionais da região de transição de fase (zona *mushy*), ou seja, quando $0 < \Delta H < L$, são modeladas como um meio pseudo-poroso, onde a porosidade f_L diminui de 1 para 0 quando ΔH diminui de L para 0 no caso da solidificação, enquanto que ocorre o contrário na fusão.

O modelo da zona *mushy* como um meio pseudo-poroso pode ser feito a partir da definição de termos fonte para as equações do movimento baseados na lei de Darcy para escoamentos em meios porosos e na equação de Karman-Kozeny. Assim, admite-se que o escoamento na zona *mushy* seja governado pela lei de Darcy:

$$\vec{V} = -\frac{K}{\mu} \nabla p \quad (5.12)$$

onde K é a permeabilidade, definida como uma função da porosidade f_L . A medida que a porosidade diminui, a permeabilidade e, conseqüentemente, as velocidades também diminuem até o valor limite de zero a medida que a região *mushy* se solidifica. A equação de Carman-Kozeny,

$$\nabla p = -C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3} \vec{V} \quad (5.13)$$

que pode ser derivada a partir da lei de Darcy, fornece um meio de escrever um termo fonte que tenha como efeito numérico fazer com que a zona *mushy* tenha comportamento similar

a um meio poroso. Assim, pode-se escrever os termos fonte das equações do movimento, S_u e S_v como

$$S_u = Au = -C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3 + q} u \quad \text{e} \quad S_v = Au + S_b = -C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3 + q} v + S_b \quad (5.14)$$

onde S_b é um termo de flutuabilidade (a ser definido) e o valor de A , é

$$A = -C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3 + q} \quad (5.15)$$

O valor de A varia de zero a um grande valor a medida que a fração líquida f_L varia de 1 (célula completamente líquida) a 0 (célula completamente sólida) e, na prática, seu efeito numérico resulta que na região líquida os valores dos termos fonte Au e Av são nulos e as velocidades são computadas normalmente. Na região *mushy* o valor de A aumenta de modo que os termos fonte começam a dominar os termos transiente, difusivo e convectivo, fazendo com que seu comportamento se aproxime da lei de Darcy. A medida que o valor da fração líquida se aproxima de zero os termos fontes dominam completamente os demais termos das equações fazendo com que as velocidades computadas se aproximem do valor limite de zero como deve ser nas fases sólidas. Na expressão de A , equação (5.15), C é chamada constante da região *mushy* cujo valor varia para cada aplicação e q é um valor pequeno a ser adotado cujo papel é evitar a divisão por zero no cálculo de A nesta expressão quando $f_L = 1$.

O termo S_b que compõe parte do termo fonte da equação da componente v da conservação da quantidade de movimento é conhecido como termo de flutuabilidade. É usado para se induzir convecção natural na região líquida do domínio. Assumindo-se que a aproximação de Boussinesq ([22]) seja válida, ou seja, que o valor da densidade seja constante em todos os termos das equações com exceção de um termo fonte na equação do momento, o termo de flutuabilidade S_b é dado por

$$S_b = \rho g \beta (h - h_{ref}) / c \quad (5.16)$$

onde g é a aceleração da gravidade e β é o coeficiente de expansão térmica do material submetido a mudança de fase. É importante destacar que a aproximação de Boussinesq permanece válida enquanto $\beta(h - h_{ref}) \ll 1$, ou seja, enquanto a diferença entre as

temperaturas dentro do domínio - implicando na variação da entalpia - deve ser pequena.

Em resumo, o conjunto de equações que compõe o método da entalpia-porosidade é

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (5.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} u) - \nabla \cdot (\mu \nabla u) = -\frac{\partial p}{\partial x} - C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3 + q} u \quad (5.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} v) - \nabla \cdot (\mu \nabla v) = -\frac{\partial p}{\partial y} - C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3 + q} v + \rho g \beta (h - h_{ref}) / c \quad (5.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} h) - \nabla \cdot (\alpha \nabla h) = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho \Delta H) - \nabla \cdot (\rho \vec{V} \Delta H) \quad (5.20)$$

5.4 Discretização e procedimentos de solução

O conjunto de equações dado por (5.1) a (5.4) (ou equivalentemente (5.17) a (5.20)) sem os termos fonte A_u , A_v , S_b e S_h são exatamente as mesmas equações de balanço formuladas e discretizadas nos capítulos anteriores. Assim, todos os procedimentos de discretização e algoritmos de solução como o SIMPLE formam um procedimento básico de solução das equações do método da entalpia porosidade. Atenção especial, porém, deve ser dada à solução da equação da energia devido a presença do termo fonte com o calor latente total.

A discretização das equações do movimento e da equação da energia permite escrever as seguintes equações algébricas:

$$a_e u_e = \sum a_{nb} u_{nb} + a_P^0 u_e^0 + (p_P - p_E) A_e + [S_u] \quad (5.21)$$

$$a_n u_n = \sum a_{nb} v_{nb} + a_P^0 v_P^0 + (p_P - p_N) A_n + [S_v] \quad (5.22)$$

$$a_P h_P = \sum a_{nb} h_{nb} + a_P^0 h_P^0 + [S_h] \quad (5.23)$$

onde os coeficientes a_{nb} formam combinações dos termos convectivos e difusivos discretizados e dependem dos esquemas de discretização usados, o superescrito '0' indica que os valores são do instante t enquanto que os demais termos sem superescrito indicam valores no instante $t + \Delta t$ e os termos entre [] representam a discretização dos termos fonte correspondentes.

Integração do termo Au sobre um VC da componente u da velocidade e sobre o

intervalo de t a $t + \Delta t$, tem-se

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} (Au) dV dt = \int_t^{t+\Delta t} [(Au_e) \Delta x \Delta y] dt = (Au_e) \Delta x \Delta y \Delta t \quad (5.24)$$

Logo, o valor de A é acrescido ao coeficiente central da equação da componente u . De modo semelhante, integrando-se o termo Av sobre um VC da componente v da velocidade e sobre o intervalo de t a $t + \Delta t$, tem-se

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} (Av) dV dt = \int_t^{t+\Delta t} [(Av_n) \Delta x \Delta y] dt = (Av_n) \Delta x \Delta y \Delta t \quad (5.25)$$

ou seja, o valor de A também é agregado ao coeficiente central da equação da componente v . Lembrando que a porosidade foi definida como a fração líquida do VC escalar, ou seja, $f_L = \Delta H/L$, para os VCs das velocidades a fração líquida pode ser estimada como uma média dos conteúdos dos calores latentes sobre os quais a componente da velocidade é localizada. Assim de acordo com as Figuras 4.11 e 4.12 tem-se

$$\Delta H_e = \frac{\Delta H_P + \Delta H_E}{2} \quad \text{e} \quad \Delta H_n = \frac{\Delta H_P + \Delta H_N}{2} \quad (5.26)$$

Dividindo-se esses valores pelo calor latente de fusão L as porosidades podem ser calculadas e com isso os valores de A em A_u e A_v .

Integração do termo S_b sobre um VC escalar e sobre o intervalo de t a $t + \Delta t$ fornece:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} (S_b) dV dt = \int_t^{t+\Delta t} [(S_b)_P \Delta x \Delta y] dt = ((S_b)_P) \Delta x \Delta y \Delta t \quad (5.27)$$

ou seja,

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} (S_b) dV dt = \frac{\rho g \beta (h_P - h_{ref})}{c} \Delta x \Delta y \Delta t \quad (5.28)$$

é a forma discreta do termo de flutuabilidade.

O termo fonte da equação da energia é dado pela equação (5.7) e é constituído de duas parcelas: um termo transiente e um termo convectivo. Integração do termo transiente

sobre um VC escalar e sobre o intervalo de t a $t + \Delta t$ fornece:

$$\int_{VC} \int_t^{t+\Delta t} \left(-\frac{\partial}{\partial t} (\rho \Delta H) \right) dt dV = a_P^0 (\Delta H_P^0 - \Delta H_P) \quad (5.29)$$

onde $a_P^0 = \rho \Delta V / \Delta t$. E a integração do termo convectivo sobre um VC escalar e sobre o intervalo de t a $t + \Delta t$, aplicando-se o esquema de discretização upwind fornece:

$$\begin{aligned} \int_{VC} \int_t^{t+\Delta t} (\nabla \cdot (\rho u \Delta H)) dt dV = & \Delta H_W |[F_w, 0]| - \Delta H_P |[-F_w, 0]| + \Delta H_S |[F_s, 0]| \\ & - \Delta H_P |[-F_s, 0]| - \Delta H_P |[F_e, 0]| - \Delta H_E |[-F_e, 0]| \\ & + \Delta H_P |[F_n, 0]| - \Delta H_N |[-F_n, 0]| \end{aligned} \quad (5.30)$$

Das expressões (5.29) e (5.30), fica claro que tanto a incógnita h quanto o termo fonte em ΔH possuem termos no instante para o qual a equação deve ser resolvida, ou seja, $t + \Delta t$. Este problema pode ser tratado fazendo-se a solução iterativa da equação (5.23): para obter o novo valor da entalpia h^{k+1} na atual iteração ($k + 1$), precisa-se de ΔH^{k+1} que por sua vez depende do valor da entalpia h^{k+1} ([37]).

A solução iterativa para h e ΔH procede como descrito a seguir:

- 1 - Toma-se ΔH^k como o campo ΔH existente no início da k - ésima iteração;
- 2 - Usando ΔH^k , calcula-se o termo fonte S_h por meio das expressões (5.29) e (5.30). Resolve-se a equação (5.23) para obter a entalpia sensível h^k ;
- 3 - Obter ΔH^{k+1} , o novo campo ΔH para a próxima iteração por meio da expressão [37]

$$\Delta H^{k+1} = \Delta H^k + \omega_{\Delta H} \frac{a_P}{a_P^0} \left[h^k - c \left(\frac{T_l - T_s}{L} \Delta H^k + T_s \right) \right] \quad (5.31)$$

impondo-se a seguinte restrição após o cálculo da expressão (5.31):

$$\Delta H^{k+1} = \begin{cases} L, & \text{se } \Delta H^{k+1} \geq L \\ 0, & \text{se } \Delta H^{k+1} \leq 0 \end{cases} \quad (5.32)$$

Então a entalpia h^{k+1} pode ser obtida a partir da equação (5.23) usando-se os valores conhecidos de ΔH^{k+1} .

O esquema geral de solução de um problema de mudança de fase por meio do método da entalpia-porosidade apresentado neste capítulo tem seus principais passos descritos a seguir.

- 1 - Inicialização dos campos de velocidade e temperatura por meio das condições iniciais do problema. Escolha de um campo de pressão para permitir a solução das equações do movimento.
- 2- Calcular os termos fonte S_u e S_v das equações do movimento:
 - calcular a fração líquida F_L (equação (5.9));
 - calcular o calor latente total ΔH (equação (5.26));
 - calcular o valor de A (equação (5.15)) usando (5.11);
 - calcular o termo de flutuabilidade S_b (equação (5.28)).
- 3 - Montar e resolver os sistemas de equações algébricas do movimento (equações (5.21) e (5.22)):
 - incluir o valor de A nas diagonais principais das matrizes;
 - resolver os sistemas e o acoplamento pressão velocidade (algoritmo SIMPLE);
 - aplica-se o SIMPLE até a convergência de u e v .
- 4 - Montagem e solução so sistema de equações da energia (processo iterativo):
 - calcular S_h com base na distribuição de ΔH conhecida;
 - resolver o sistema de equações da energia ((5.23));
 - atualizar ΔH para a próxima iteração ((5.31));
 - restringir ΔH em $0 \leq \Delta H \leq L$ por meio de (5.32);
 - repetir o passo 4 até a convergência de h e ΔH .
- 5 - Repetir todo o procedimento para cada passo de tempo.

Tomando como base o código em Python, cujos resultados foram apresentados no capítulo anterior, foi iniciada a implementação do esquema acima descrito. Tendo em vista que a referida implementação não foi finalizada até a conclusão do presente trabalho, no item que se segue apresentam-se alguns resultados obtidos através do software Fluent.

5.5 Exemplos numéricos

Apresenta-se nesta seção resultados numéricos de problemas de mudança de fase resolvidos com a aplicação do método da entalpia-porosidade. Os resultados foram obtidos empregando-se o pacote comercial *Ansys Fluent* e são comparados com resultados numéricos encontrados na literatura. O Ansys Fluent pode ser empregado na solução tanto de problemas de fusão quanto solidificação, usando uma formulação baseada no método da entalpia-porosidade.

5.5.1 Solidificação em Cavidade

O primeiro exemplo é um problema de solidificação de uma cavidade quadrada preenchida com um material inicialmente no estado líquido, descrito no trabalho de Voller e Prakash [15].

Descrição do problema: uma cavidade quadrada está preenchida com material em estado líquido, inicialmente à uma temperatura acima de T_l (temperatura na qual a formação do sólido se inicia). No instante $t = 0$ a temperatura no contorno dado por $x = 0$ é reduzida para um valor fixo abaixo da temperatura T_s (temperatura na qual a formação do sólido se completa). Os contornos definidos por $y = 0$ e $y = 1$ são isolados termicamente. A solidificação do material inicia-se imediatamente a partir desta superfície e uma zona *mushy* forma-se e avança para a direita ao longo do tempo. Neste caso, considera-se que a mudança de fase do material ocorre em uma faixa de temperaturas e não em uma temperatura fixa.

As propriedades do material e outros dados para a resolução do problema apresentados na Tabela 1 a seguir:

Tabela 1: Dados para o problema ([15])

Dado	Valor	Unidade
Temperatura inicial	$T_i = 0.5$	$^{\circ}\text{C}$
Temperatura em $x = 0$	$T_C = -0.5$	$^{\circ}\text{C}$
Temperatura em $x = 1$	$T_H = 0.5$	$^{\circ}\text{C}$
Temperatura referência	$T_{ref} = 0.5$	$^{\circ}\text{C}$
Dimensão da cavidade	$l = 1$	m
Densidade	$\rho = 1$	Kg/m^3
Calor específico	$c = 1$	J/KgC
Viscosidade	$\mu = 1$	Kg/ms
Condutividade térmica	$k = 0.001$	$\text{w}/\text{m}^{\circ}\text{C}$
Coefficiente de expansão	$\beta = 0.01$	K^{-1}
Calor latente	$L = 5$	J/Kg
Gravidade	$g = 1000$	m/s^2
Número de Rayleigh	$Ra = 10^4$	-
Número de Prandtl	$Pr = 10^3$	-
Número de Stefan	$Ste = 5$	-

Para este exemplo, adotou-se nas simulações com o Fluent, o algoritmo SIMPLE para tratamento do acoplamento pressão-velocidade; para a discretização dos termos convectivos nas equações da conservação da energia e da quantidade de movimento usou-se o esquema upwind; a formulação transiente é implícita, e utilizou-se ainda a opção PRESTO! para a interpolação do campo de pressões. Uma malha uniforme de tamanho 40×40 foi usada para obtenção dos resultados apresentados. O passo de tempo foi considerado fixo de valor $\Delta t = 10\text{s}$. Para a constante da zona *mushy* (equação (5.15)) foi adotado o valor $C = 1.6 \times 10^3$.

A Figura 5.1 são apresentadas os campos de velocidades para o instante $t = 1000\text{s}$.

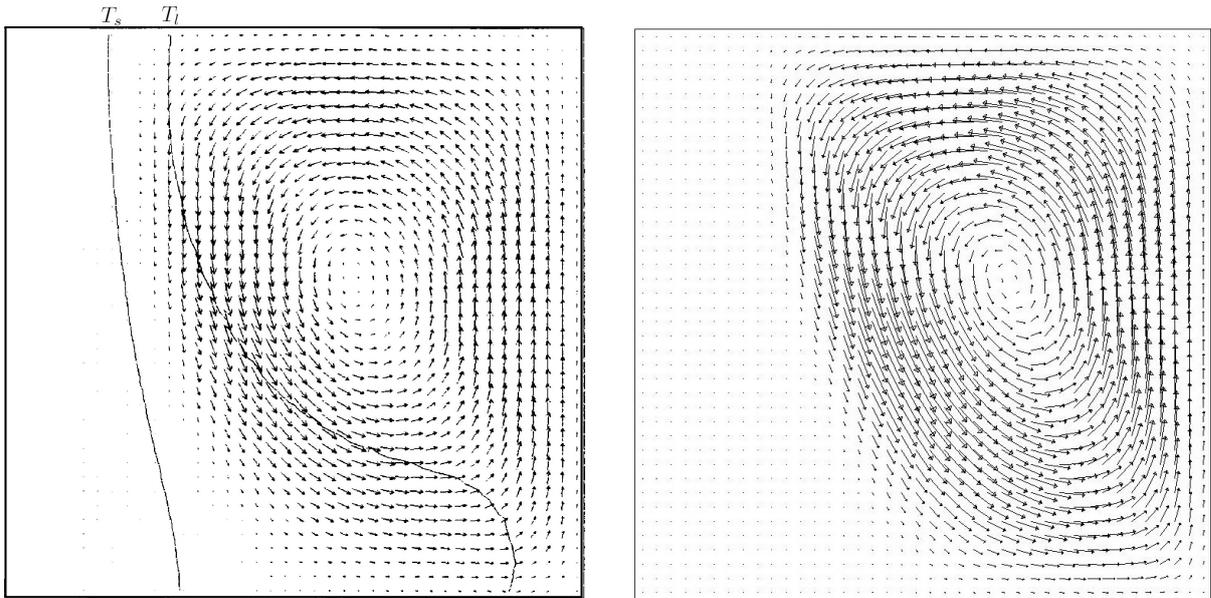


Figura 5.1: Campo de velocidades em $t = 1000s$. A esquerda - Voller et al. (1987), a direita - Fluent

Na Figura 5.1 obtida por Voller et al. (1987) observa-se, além do campo de velocidades, duas isotermas que definem a zona *mushy* do problema. Estas isotermas correspondem às temperaturas T_l e T_s . Neste problema tem-se $T_l = 0.1^\circ C$ e $T_s = -0.1^\circ C$. Observa-se boa concordância qualitativa entre os resultados.

Na Figura 5.2 são comparadas as isotermas obtidas para o instante $t = 1000s$. Observa-se boa concordância entre os resultados obtidos.

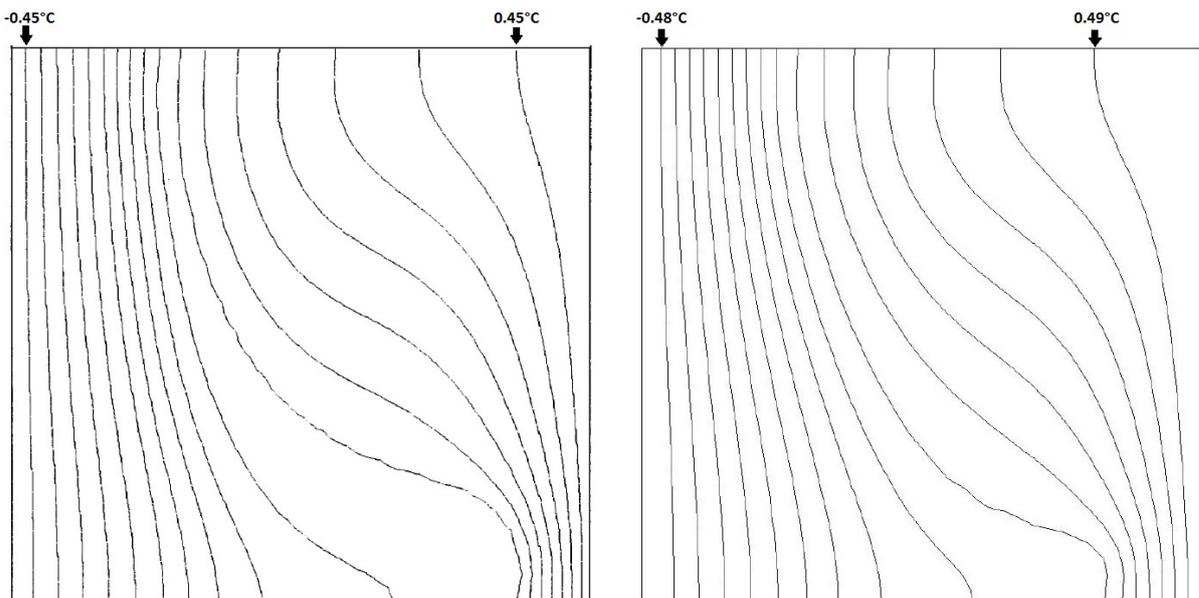


Figura 5.2: Isotermas em $t = 1000s$. A esquerda - Voller et al. (1987), a direita - Fluent

Observam-se grandes semelhanças entre as isotermas obtidas por Voller et al. (1987)

e pelo Fluent. Observa-se também que, devido ao termo convectivo, as isothermas na região líquida não são linhas retas, apresentando sinuosidades devido ao transporte de calor por convecção, enquanto que no sólido, onde não há movimento, as isothermas são mais homogêneas.

Na Figura 5.3 apresentam-se os contornos da fração líquida em $t = 1000s$.

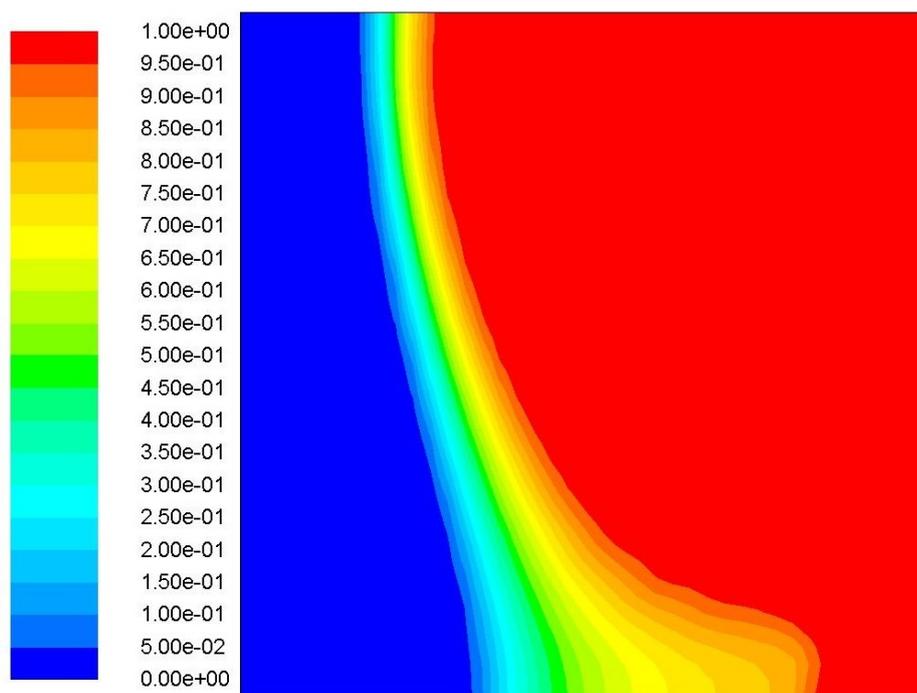


Figura 5.3: Contornos da fração líquida obtidos com o Fluent.

Nesta Figura identifica-se facilmente a região onde o material já se solidificou completamente ($f_L = 0$), a região que permanece ainda líquida ($f_L = 1$) e a região que está mudando de fase (zona *mushy*), com ($0 < f_L < 1$). Desse modo, sabe-se onde a região de transição de fase se encontra, mesmo que o algoritmo tenha a característica de não rastreá-la explicitamente.

As Figuras 5.4(a), 5.5(a), 5.6(a) e 5.7(a) obtidas em [15] e as Figuras 5.4(b), 5.5(b), 5.6(b) e 5.7(b) obtidas com o Fluent ilustram o desenvolvimento da zona *mushy* ao longo do tempo.

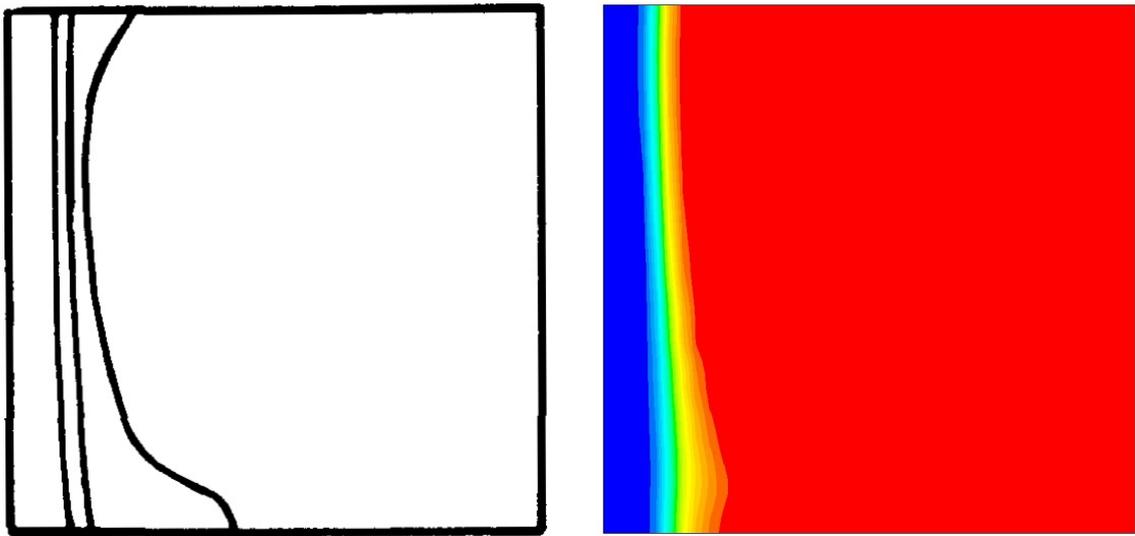


Figura 5.4: Zona *mushy* em $t = 100s$. A esquerda - Voller et al. (1987), a direita - Fluent.

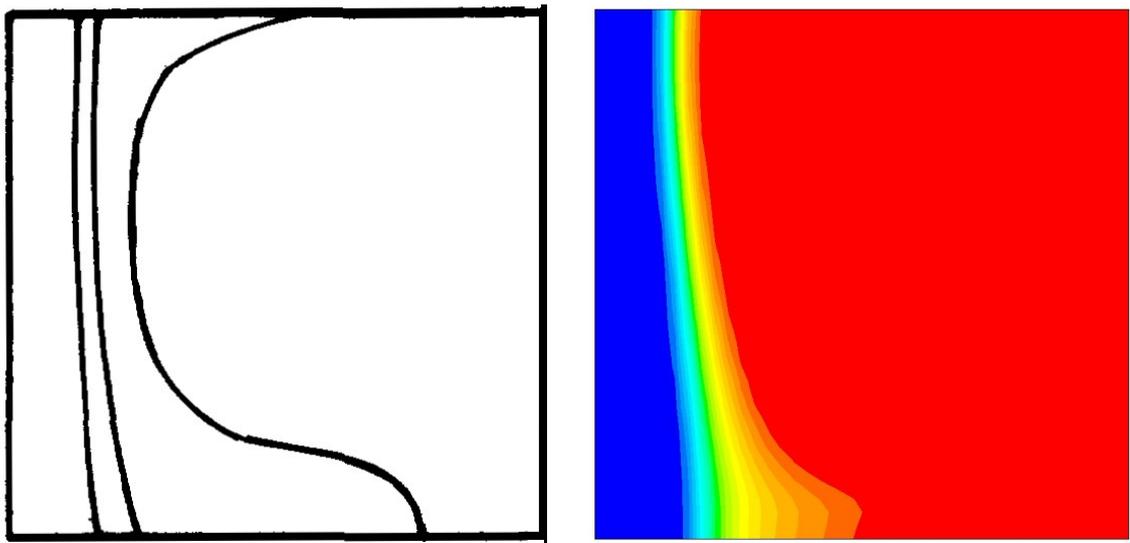


Figura 5.5: Zona *mushy* em $t = 250s$. A esquerda - Voller et al. (1987), a direita - Fluent.

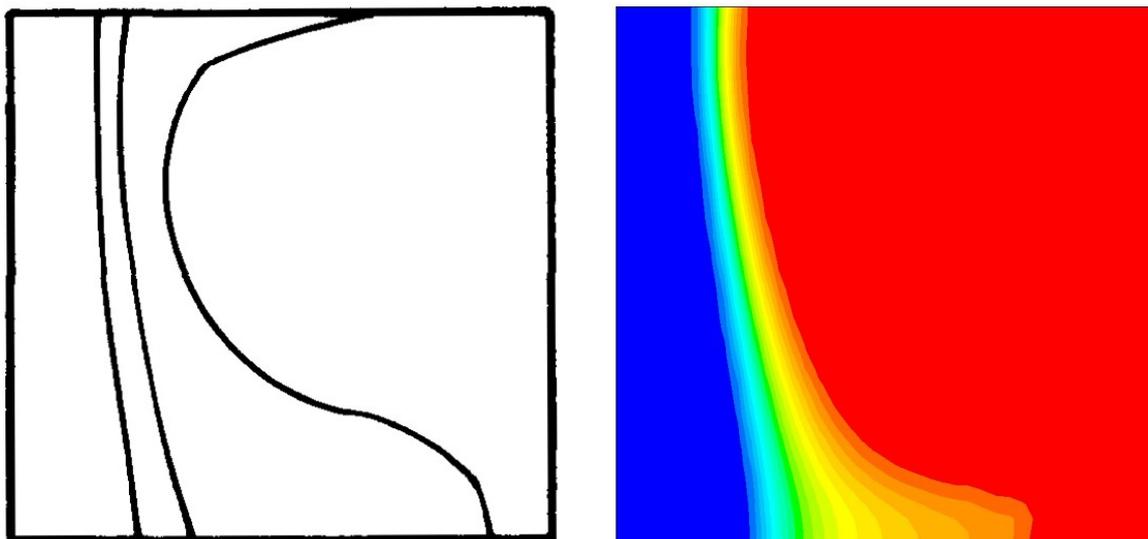


Figura 5.6: Zona *mushy* em $t = 500s$. A esquerda - Voller et al. (1987), a direita - Fluent.

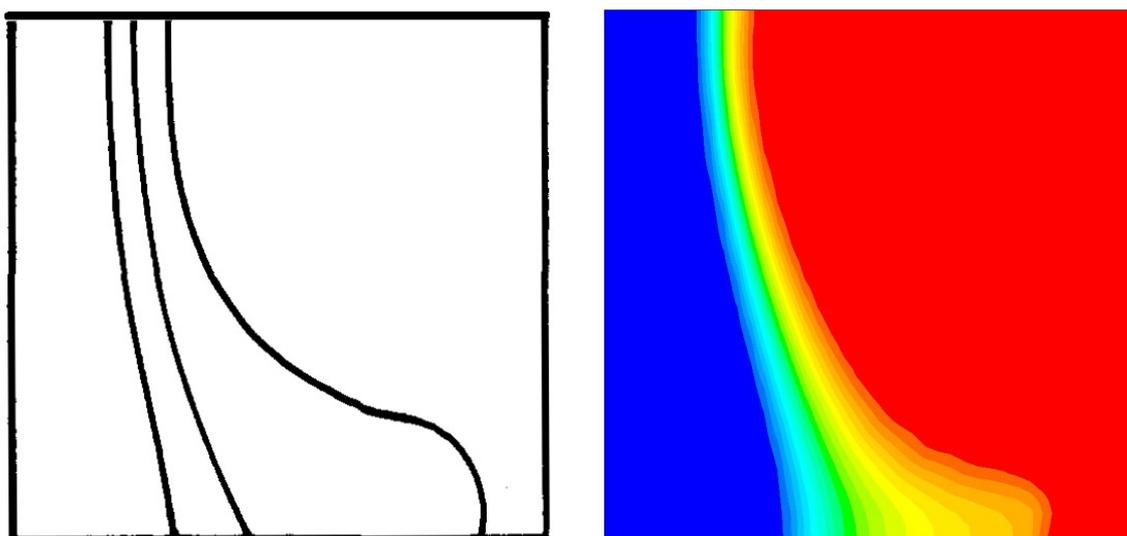


Figura 5.7: Zona *mushy* em $t = 1000s$. A esquerda - Voller et al. (1987), a direita - Fluent.

Observa-se que há uma discrepância entre os resultados obtidos por Voller et al. (1987) e os resultados obtidos com o Fluent, sendo as diferenças mais significativas nos instantes de tempo $t = 100s$, $t = 250s$ e $t = 500s$. Para o instante $t = 1000s$ observa-se boa concordância quanto a forma das zonas *mushy* obtidas em ambos os trabalhos.

É interessante ressaltar que neste problema Voller et al. (1987) trabalhou com um valor para a aceleração da gravidade bem fora da realidade o que pode ser justificado avaliando-se o número de Rayleigh para o problema. Para este exemplo, o número de

Rayleigh é:

$$Ra = \frac{\rho^2 g \beta c (T_H - T_{ref}) L^3}{\mu k} = 10^4 \quad (5.33)$$

Quando esse número fica abaixo de um determinado valor, os efeitos da convecção natural são reduzidos, com o processo de condução de calor sendo predominante. Como, um dos objetivos deste exemplo era demonstrar a capacidade do esquema desenvolvido para identificar a ocorrência e os efeitos da convecção natural em um problema de mudança de fase, uma vez fixadas as propriedades do material, foi necessário estipular um valor fora de padrão para a aceleração da gravidade, de modo que os efeitos da convecção natural pudessem ser melhores observados.

Para ilustrar a relação do número de Rayleigh (Ra) com a convecção natural, na Figura 5.8(a) mostra-se o comportamento da zona *mushy* em $t = 1000s$ com $g = 10m/s^2$ e na Figura 5.8(b) o comportamento com $g = 100m/s^2$, mantendo-se os demais dados do problema inalterados.

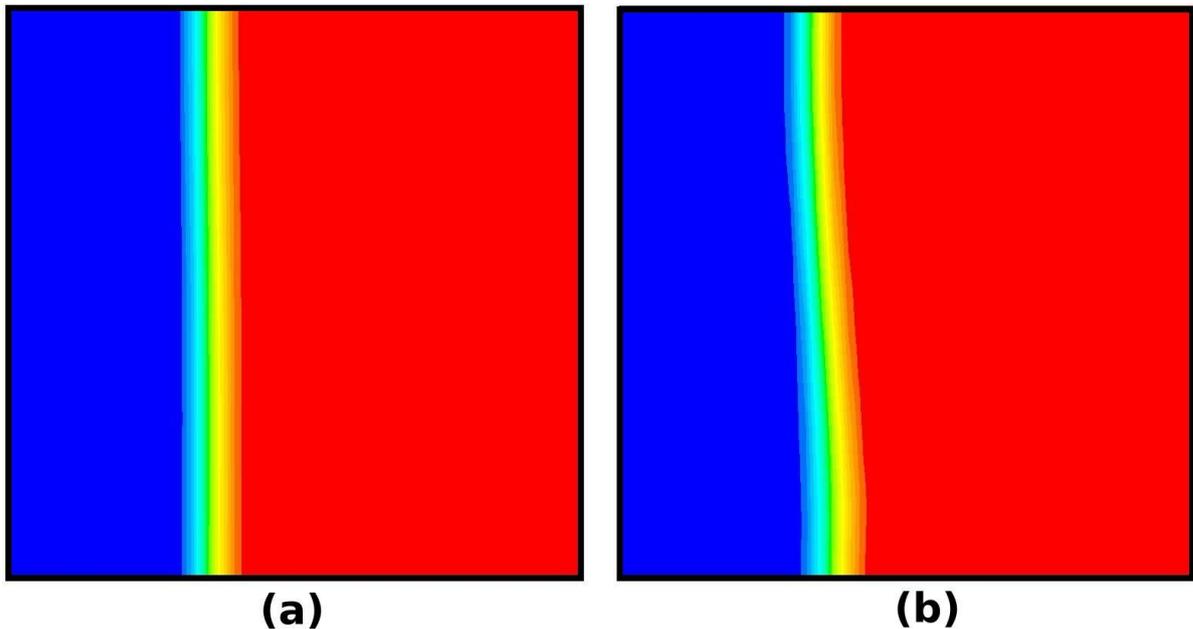


Figura 5.8: Efeitos da convecção natural para $g=10m/s^2$ (a) e $g=100m/s^2$ (b).

Para $g = 10m/s^2$ obtém-se $Ra = 10^2$ e observa-se que na simulação realizada com este dado praticamente os efeitos da convecção natural no líquido são imperceptíveis. Já para $g = 100m/s^2$, tem-se $Ra = 10^3$ e observa-se uma leve deformação da zona *mushy* devido a convecção natural.

5.5.2 Fundição de estanho

O segundo exemplo trata de um problema de derretimento de estanho em uma cavidade quadrada, estudado em [37].

Descrição do problema: o domínio do problema está preenchido com estanho no estado sólido inicialmente à temperatura de fusão $T = T_m$. Os contornos superior e inferior da cavidade são isolados termicamente enquanto o contorno direito é mantido à temperatura de fusão. No instante $t = 0$ o contorno esquerdo é elevado a uma temperatura $T = T_h$ maior que a temperatura de fusão $T = T_m$. O derretimento do material inicia-se imediatamente no contorno esquerdo. Efeitos da convecção natural podem ser observados na parte derretida do estanho devido a variações na densidade.

As propriedades do estanho e outros dados para o problema são listados na tabela a seguir:

Tabela 2: Dados do problema derretimento de estanho ([37])

Dado	Valor	Unidade
Condutividade térmica	$k = 60$	$w/m^{\circ}C$
Calor específico	$c = 200$	J/KgC
Coefficiente de expansão	$\beta = 2.67 \times 10^{-4}$	K^{-1}
Viscosidade	$\mu = 60 \times 10^{-4}$	Kg/ms
Densidade	$\rho = 7500$	Kg/m^3
Calor latente	$L = 6 \times 10^4$	J/Kg
Temperatura de fusão	$T_f = 231.84$	$^{\circ}C$
Gravidade	$g = 10$	m/s^2
Dimensão da cavidade	$l = 0.1$	m
Temperatura no contorno esquerdo	$T_h = 234.84$	$^{\circ}C$
Temperatura referência	$T_{ref} = 231.84$	$^{\circ}C$
Número de Rayleigh	$Ra = 2.5 \times 10^5$	-
Número de Prandtl	$Pr = 0.02$	-
Número de Stefan	$Ste = 0.01$	-

Neste problema a obtenção dos resultados com o uso do Fluent, foi realizada adotando-se o algoritmo SIMPLEC - uma variação do SIMPLE e o mesmo algoritmo adotado em

[37] - para o tratamento do acoplamento pressão velocidade. Os termos convectivos nas equações da energia e da conservação da quantidade de movimento foram aproximados pelo esquema upwind. A opção PRESTO! foi adotada para a interpolação do campo de pressões e a formulação transiente é implícita.

Os resultados foram obtidos para duas malhas regulares, de dimensões 100×100 e 200×200 . Usou-se um passo de tempo fixo e de valor $\Delta t = 1s$ em todas as simulações. Em todos os resultados, tanto neste trabalho quanto no trabalho [37], apenas parte do domínio computacional usado nas simulações é exibido nas Figuras. O contorno esquerdo de cada Figura corresponde à parede do domínio mantida à temperatura T_h enquanto que a região compreendida entre a região sólida e parede direita foi eliminada das imagens.

Na Figura 5.9(a), as quatro imagens exibem as linhas de corrente para os tempos $t = 250s$, $t = 400s$, $t = 600s$ e $t = 1000s$ obtidas em [37], enquanto que na Figura 5.9(b) é exibido as correspondentes linhas de corrente obtidas com o uso do Fluent, ambos os resultados são para a malha de 100×100 .

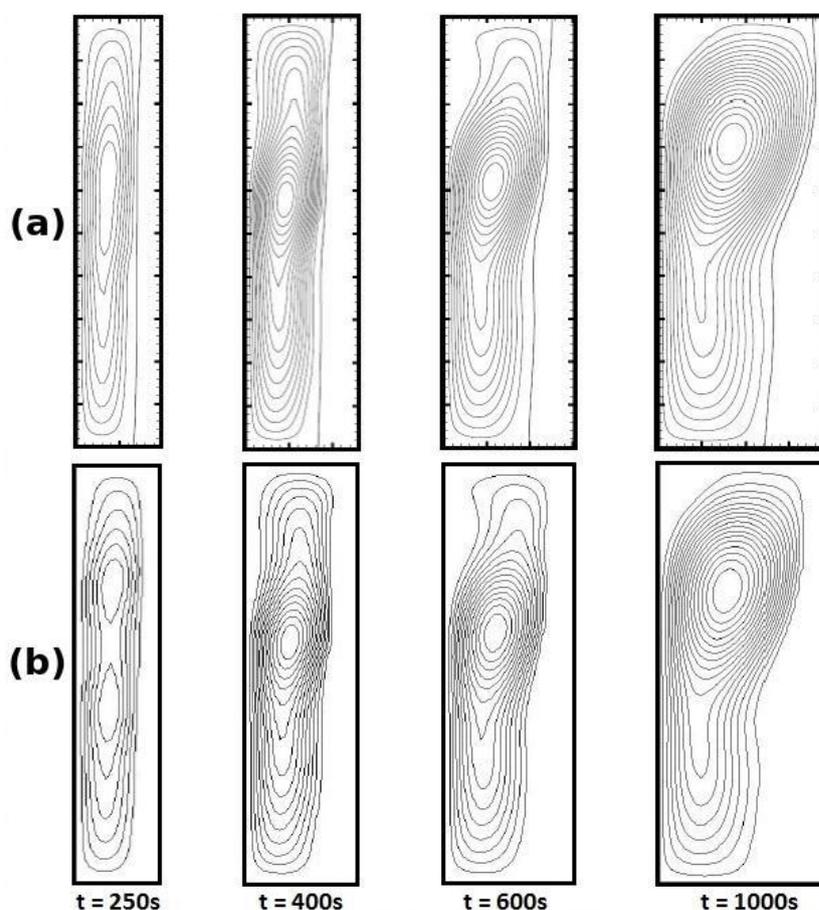


Figura 5.9: Linhas de corrente nos tempos $t = 250s$, $t = 400s$, $t = 600s$ e $t = 1000s$ em uma malha 100×100 .

Este caso corresponde aos resultados obtidos em [37] usando o esquema de discretização *upwind*. Avaliando-se qualitativamente as imagens, observa-se que para os tempos $t = 400s$, $t = 600s$ e $t = 1000s$ os resultados obtidos pelo Fluent reproduzem com fidelidade os obtidos por este autor. Já para o tempo de $t = 250s$ uma divergência entre os resultados pode ser notada. O resultado obtido com o Fluent exhibe dois padrões de vorticidade enquanto o resultado do autor exhibe apenas um padrão de vorticidade. O padrão obtido pelo Fluent neste caso tem maior similaridade com o padrão obtido em [37] quando utiliza-se o esquema de discretização híbrido.

Na Figura 5.10 são comparadas de modo similar as linhas de corrente empregando-se de uma malha de 200×200 .

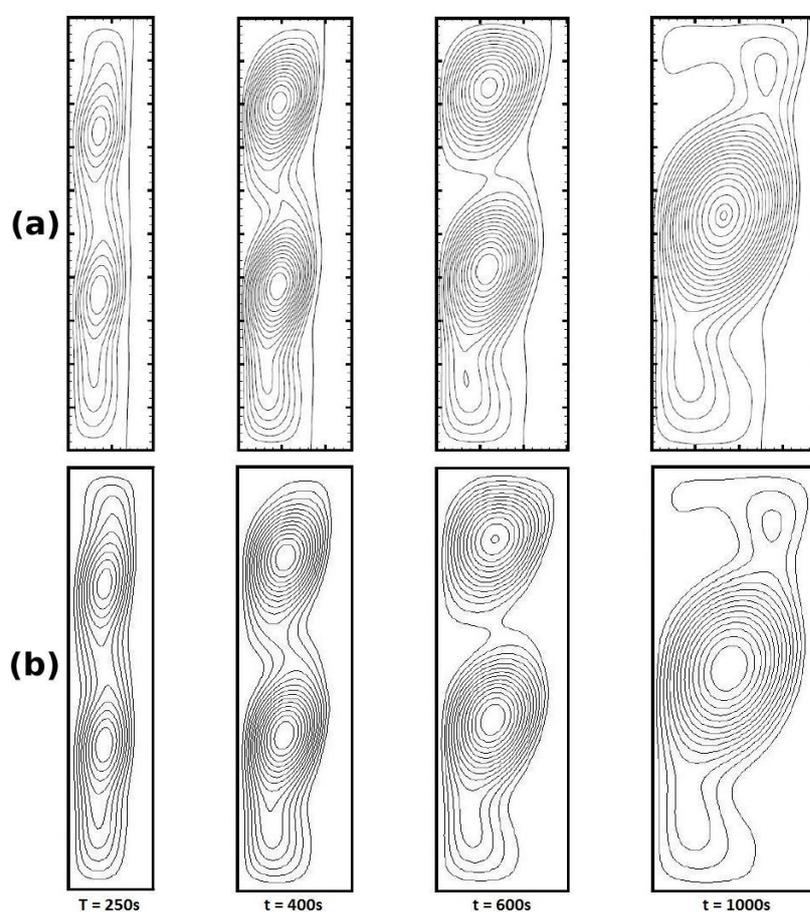


Figura 5.10: Linhas de corrente nos tempos $t = 250s$, $t = 400s$, $t = 600s$ e $t = 1000s$ em uma malha 200×200 .

Neste caso observa-se boa concordância entre os resultados obtidos pelo autor e os resultados obtidos com o Fluent nos quatro instantes de tempo considerados.

Comparando os resultados obtidos usando uma malha mais grosseira (100×100) e uma malha mais refinada (200×200) observa-se que no primeiro caso, com exceção no

instante $t = 250s$ com o Fluent, apenas um padrão de vorticidade é obtido em todos os instantes de tempo considerados. No caso da malha mais refinada, onde houve boa concordância entre todos os resultados obtidos, observa-se o com duas vorticidades para os três primeiros instantes de tempo enquanto que no instante $t = 1000s$ existe basicamente uma única vorticidade.

Em resumo, observa-se como um efeito combinado entre o refinamento da malha e o avanço ao longo do tempo em que, nos instantes iniciais, tendem a apresentar um número maior de padrões de vorticidade. A medida que o tempo avança, estes padrões tendem a se fundir, de modo a dar origem a um número menor de vórtices [37]. Quanto mais refinada a malha, melhor esses resultados qualitativos podem ser observados.

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho tratou-se de uma classe de problemas de fronteira livre conhecida como problemas de mudança de fase. Esta é uma classe de problemas que possui aplicações importantes em vários ramos da ciência tais como a engenharia, metalurgia e matemática. Em muitas aplicações dessas áreas é comum o desenvolvimento de efeitos deterioradores como a formação de vazios, trincas, e tensões residuais, sendo necessário estudar o fenômeno de mudança de fase de um estado para outro para entender e assim buscar métodos que possam prevenir ou pelo menos amenizar tais efeitos.

A classe de problemas de mudança de fase mais simples é conhecida como problemas de Stefan, que empregam diversas hipóteses simplificadoras em seus modelos e, por esta razão, modelam poucos problemas de interesses práticos. Problemas de Stefan possuem soluções analíticas apenas para alguns casos, primordialmente, com geometria unidimensional. Também podem ser formulados em duas ou três dimensões sendo que nestes casos, tratamentos numéricos são necessários devido à inexistência de soluções analíticas. Neste trabalho abordaram-se os chamados problemas de Stefan de uma ou duas fases, tendo suas soluções analíticas demonstradas. A necessidade de estudo dos problemas de Stefan reside no fato deles formarem a base sobre a qual modelos mais complexos de mudança de fase possam ser desenvolvidos.

Modelos mais complexos de mudança de fase não podem ser modelados somente com a aplicação da equação da energia, característica dos problemas de Stefan. Como na maioria dos fenômenos relacionados à transferência de calor existe movimento e transporte de matéria no material em estado líquido, é necessário estudar as equações básicas que governam os fenômenos de transporte, que incluem as equações de Navier-Stokes e da conservação da massa. Desta forma, visando o desenvolvimento de modelos mais complexos, foi apresentado um desenvolvimento dessas equações por meio de balanços realizados em volumes infinitesimais, resultando nas equações de conservação necessárias para a formulação desses modelos.

Como as equações de balanço não apresentam soluções analíticas em geometrias multidimensionais, faz-se necessário o estudo de técnicas numéricas de discretização. Neste trabalho abordou-se o método dos volumes finitos que, essencialmente, consiste

na integração de uma equação diferencial em volumes de controle para se escrever uma equação algébrica discreta equivalente à equação diferencial original. Empregase geralmente o esquema de diferenças centrais na discretização dos termos difusivos enquanto que para os termos convectivos existem inúmeras possibilidades de esquemas de discretização. Foram apresentados os esquemas central, *upwind*, híbrido, *power-law* e exponencial, sendo que existe inúmeros outros esquemas como o QUICK (*Quadratic Upwind differencing Scheme*) entre outros de ordem maior. Foi observado que a solução numérica das equações de Navier-Stokes apresentam dificuldades como o acoplamento pressão-velocidade e não linearidades. Estes problemas podem ser tratados por meio de algoritmos iterativos como o SIMPLE, SIMPLEC e SIMPLER e posicionado-se diferentes variáveis em diferentes pontos da malha computacional (malha *staggered*). Exemplos empregando-se o algoritmo SIMPLE e o arranjo *staggered* de variáveis foram implementados e apresentados com a linguagem de programação Python. A implementação foi bem sucedida para a solução de problemas unidimensionais e bidimensionais, reproduzindo-se resultados da literatura.

Um modelo de problema de mudança de fase mais complexo, que envolve além do problema de transferência de calor e de mudança de fase, a convecção natural no líquido foi estudado com o método da entalpia-porosidade. Neste método, pertencente aos métodos de malha fixa, a região de transição de fase (a zona *mushy*) ou a interface sólido-líquido é tratada como um meio pseudo-poroso, com a porosidade definida a partir da fração líquida. Este método permite que apenas um único conjunto de equações de conservação seja aplicado em todo o domínio computacional e não há necessidade de se rastrear explicitamente a região de transição de fase, porém necessitando-se fazer com que as velocidades computadas pelas equações de movimento na região sólida sejam zero. Isto é implementado por meio de termos fontes adicionados a estas equações. A equação da energia é formulada em termos da quantidade termodinâmica chamada entalpia, pois esta apresenta valores distintos na região de transição de fase que permite a caracterização adequada do estado físico da matéria, o que não é possível apenas analisando-se a temperatura. O método da entalpia-porosidade foi implementado por meio do pacote comercial Ansys-Fluent na solução de problemas de mudança de fase encontrados na literatura, reproduzindo os resultados com boas concordâncias.

Como previsões de trabalhos futuros nesta linha de pesquisa, pretende-se completar a

implementação do método da entalpia-porosidade usando a linguagem Python. Também espera-se estudar problemas com geometrias mais complexas que requeiram o emprego de malhas não estruturadas para uma boa cobertura do domínio. Outra possibilidade é o estudo dos problemas que podem ocorrer no material sólido devido a mudança de fase, tais como tensões residuais, formação de trincas e de vazios, que podem comprometer a integridade estrutural do material solidificado. Espera-se analisar como as condições de resfriamento de um material líquido leva a esses problemas, bem como simular como diferentes condições de resfriamento podem minimizar essas falhas.

REFERÊNCIAS

- [1] ANNAPRAGADA, S. R., SUN, D., GARIMELLA, S. V., “Analysis and suppression of base separation in the casting of a cylindrical ingot”, *Heat Transfer Engineering*, v. 29, n. 4, pp. 385–394, 2008.
- [2] ALEXIADES, V., SOLOMON, A. D., *Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes*. Hemisphere Publishing Corporation, 1993.
- [3] SOARES, A., BARRA, L., TOLEDO, E., “Estudo de aproximações numéricas para problemas de mudança de fase de materiais energéticos”, *XXXII Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering*, 2011.
- [4] FRIEDMAN, A., “The Stefan problem in several space variables”, *Transactions of the American Mathematical Society*, pp. 51–87, 1968.
- [5] SUN, D., ANNAPRAGADA, S. R., GARIMELLA, S. V., SINGH, S. K., “Analysis of gap formation in the casting of energetic materials”, *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, v. 51, n. 5, pp. 415–444, 2007.
- [6] JIJI, L. M., *Heat conduction*. Springer, 2006.
- [7] ATTHEY, D., “A finite difference scheme for melting problems”, *IMA Journal of Applied Mathematics*, v. 13, n. 3, pp. 353–366, 1974.
- [8] BONACINA, C., COMINI, G., FASANO, A., PRIMICERIO, M., “Numerical solution of phase-change problems”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 16, n. 10, pp. 1825–1832, 1973.
- [9] CAO, Y., FAGHRI, A., CHANG, W. S., “A numerical analysis of Stefan problems for generalized multi-dimensional phase-change structures using the enthalpy transforming model”, *International journal of heat and mass transfer*, v. 32, n. 7, pp. 1289–1298, 1989.
- [10] LAZARIDIS, A., “A numerical solution of the multidimensional solidification (or melting) problem”, *International journal of heat and mass transfer*, v. 13, n. 9, pp. 1459–1477, 1970.

- [11] HEINRICH, J., POIRIER, D., “The effect of volume change during directional solidification of binary alloys”, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, v. 12, n. 5, pp. 881, 2004.
- [12] ODONE, M. W. N., TOLEDO, E., BARRA, L. P., DA SILVA, C. E., “Um estudo numérico sobre o método da entalpia-porosidade na solução de problemas de mudança de fase”, *XXXIV Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering*, 2013.
- [13] CHIANG, K., TSAI, H., “Shrinkage-induced fluid flow and domain change in two-dimensional alloy solidification”, *International journal of heat and mass transfer*, v. 35, n. 7, pp. 1763–1770, 1992.
- [14] MCBRIDE, E., HEINRICH, J., POIRIER, D., “Numerical simulation of incompressible flow driven by density variations during phase change”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 31, pp. 787–800, 1999.
- [15] VOLLER, V. R., PRAKASH, C., “A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 30, n. 8, pp. 1709–1719, 1987.
- [16] BRENT, A., VOLLER, V., REID, K. T. J., “Enthalpy-Porosity technique for modeling convection-diffusion phase change: Application to the melting of a pure metal”, *Numerical Heat Transfer, Part A Applications*, v. 13, n. 3, pp. 297–318, 1988.
- [17] VOLLER, V., CROSS, M., MARKATOS, N., “An enthalpy method for convection/diffusion phase change”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 24, n. 1, pp. 271–284, 1987.
- [18] SUN, D., GARIMELLA, S. V., “Numerical and experimental investigation of solidification shrinkage”, *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, v. 52, n. 2, pp. 145–162, 2007.

- [19] SUN, D., GARIMELLA, S. V., SINGH, S., NAIK, N., “Numerical and experimental investigation of the melt casting of explosives”, *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, v. 30, n. 5, pp. 369–380, 2005.
- [20] ANSYS, I., *ANSYS FLuent User’s Guide*. ANSYS, Inc., 2013.
- [21] ANSYS, I., *ANSYS FLuent UDF Manual*. ANSYS, Inc., 2013.
- [22] FERZIGER, J. H., PERIC, M., *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 2002.
- [23] PATANKAR, S., *Numerical heat transfer and fluid flow*. CRC Press, 1980.
- [24] VERSTEEG, H. K., MALALASEKERA, W., *An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method (2nd edition)*. Pearson Education Limited, 2007.
- [25] W. Y. SOH, GOODRICH, J. W., “Unsteady Solution of Incompressible Navier-Stokes Equations”, *Journal of Computational Physics*, v. 79, pp. 113–134, 1988.
- [26] GHIA, U., GHIA, K. N., SHIN, C. T., “High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method”, *Journal of Computational Physics*, v. 48, pp. 387–411, 1982.
- [27] GATSKI, T. B., GROSCHE, C. E., ROSE, M. E., “A Numerical Study of the Two-Dimensional Navier-Stokes Equations in Vorticity-Velocity Variables”, *Journal of Computational Physics*, v. 48, pp. 1–22, 1982.
- [28] OMARI, R., “CFD simulations of Lid Driven Cavity Flow at moderate Reynolds number”, *European Scientific Journal*, v. 9, n. 15, 2013.
- [29] BRUNEAU, C.-H., SAAD, M., “The 2D lid-driven cavity problem revisited”, *Computers and Fluids*, v. 35, pp. 326–348, 2006.
- [30] CHIANG, K. C., TSAI, H. L., “Shrinkage-induced fluid flow and domain change in two-dimensional alloy solidification”, *Int. J. Heat Mass Transfer*, v. 7, pp. 1763–1770, 1992.

- [31] SUN, D., GARIMELLA, S. V., “Numerical and experimental investigation of solidification shrinkage”, *Numerical Heat Transfer, Part A*, v. 52, pp. 145–162, 2007.
- [32] RADY, M. A., MOHANTY, A. K., “Natural convection during melting and solidification of pure metals in a cavity”, *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, v. 29, n. 1, pp. 49–63, 1996.
- [33] MORGAN, K., “A numerical analysis of freezing and melting with convection”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 28, n. 3, pp. 275–284, 1981.
- [34] GARTLING, D., “Finite element analysis of convective heat transfer problems with change of phase”, 1978.
- [35] VOLLER, V., MARKATOS, N., CROSS, M., “Techniques for accounting for the moving interface in convection/diffusion phase change”, *Numerical Methods in Thermal Problems*, v. 4, pp. 595–609, 1985.
- [36] BEJAN, A., KRAUS, A. D., *Heat transfer handbook*. v. 1. John Wiley & Sons, 2003.
- [37] ALEXIADES, V., HANNOUN, N., MAI, T. Z., “Tin melting: effect of grid size and scheme on the numerical solution”. In: *Proc. 5th Mississippi State Conf. Differential Equations and Computational Simulations*, pp. 55–69, 2003.