

Géssica Lacerda Siqueira

**Solução do Problema de Mudança de Fase através do Método dos Elementos
Finitos**

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. Bernardo Martins Rocha

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

Juiz de Fora

2017

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

Siqueira, Géssica Lacerda.

Solução do problema de mudança de fase através do método dos elementos finitos / Géssica Lacerda Siqueira. -- 2017.

70 f. : il.

Orientador: Bernardo Martins Rocha

Coorientador: Luis Paulo da Silva Barra

Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de Juiz de Fora, Faculdade de Engenharia. Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional, 2017.

1. Transferência de calor com mudança de fase. 2. Método dos elementos finitos. 3. Método da capacidade efetiva. 4. Método da entalpia. I. Rocha, Bernardo Martins, orient. II. Barra, Luis Paulo da Silva, coorient. III. Título.

Géssica Lacerda Siqueira

**Solução do Problema de Mudança de Fase através do Método dos Elementos
Finitos**

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 13 de Julho de 2017.

BANCA EXAMINADORA



Prof. D.Sc. Bernardo Martins Rocha - Orientador
Universidade Federal de Juiz de Fora



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



Prof. D.Sc. Elson Magalhães Toledo
Universidade Federal de Juiz de Fora



Prof. D.Sc. José Carlos Lopes Ribeiro
Universidade Federal de Viçosa

*Dedico este trabalho ao meu filho
que está chegando.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Deus por todas as coisas boas que têm acontecido em minha vida. Agradeço aos pais maravilhosos que tenho por todo apoio, carinho e preocupação. Agradeço também ao meu noivo por estar sempre presente, me incentivando e alegrando meus dias. Ao PGMC onde tive o prazer de rever e conhecer pessoas incríveis. À todos os meus amigos e professores pela ajuda e companheirismo nessa caminhada muito das vezes um pouco sofrida. Também não poderia deixar de agradecer aos meus queridos orientadores Bernardo e Luis Paulo que não perderam a paciência e entusiasmo em me ajudar nessa empreitada. Agradeço por me orientarem durante todo o processo de desenvolvimento desta dissertação e por todo o conhecimento compartilhado, sem a ajuda de vocês não chegaria até aqui. À Capes pela bolsa de mestrado concedida e a Universidade Federal de Juiz de Fora pela oportunidade de adquirir novos conhecimentos.

RESUMO

Processos de transferência de calor com mudança de fase são de interesse em várias áreas da ciência, engenharia e aplicações industriais. Em processos de solidificação, por exemplo, a ocorrência de trincas e formações de vazios causados por uma redução na capacidade de resistir a esforços mecânicos geralmente são observados, e é de grande importância prever esses comportamentos para que possam ser evitados. Uma das formas de se estudar esses fenômenos e suas aplicações é através do uso de modelos matemáticos que possibilitam, através do uso de métodos de discretização temporal e espacial a realização de simulações computacionais. Dessa forma, este trabalho estudou e comparou diferentes formulações numéricas do método dos elementos finitos para problemas de transferência de calor com mudança de fase levando em consideração a condução como mecanismo de transferência de calor. Na metodologia usada, os processos de solidificação ou fusão foram tratados por meio de métodos baseados em malhas fixas. Diversos experimentos numéricos foram realizados para se analisar a adequabilidade dos métodos estudados e propostos neste trabalho e os resultados obtidos foram satisfatórios.

Palavras-chave: Transferência de calor com mudança de fase. Método dos elementos finitos. Método da capacidade efetiva. Método da entalpia.

ABSTRACT

Heat transfer processes with phase change are of great interest in several areas of science, engineering and industrial applications. In some of these applications, such as in solidification processes, the occurrence of cracks and void formation caused by a reduction in the ability of the material to resist mechanical loadings are generally observed, and it is of great importance to predict these behaviors so that they can be circumvented. One of the ways to study these phenomena and their applications is through the use of mathematical models and executing of computer simulations. Thus, this work studied and compared different numerical formulations of the finite element method for the heat transfer problems with phase change considering only conduction as the main mechanism of heat transfer. In the methodology used, the solidification or melting processes were treated by means of numerical methods based on fixed meshes. Several numerical experiments were performed to analyze the suitability of the methods studied and proposed in this work and the results were satisfactory.

Keywords: Heat transfer with phase change. Finite element method. Enthalpy method. Effective heat capacity method.

SUMÁRIO

Lista de abreviações e símbolos.....	13
1 Introdução.....	14
1.1 Motivação	14
1.2 Objetivos	17
1.3 Organização do Texto	18
2 Problemas de Mudança de Fase.....	19
2.1 Conceitos associados à problemas de mudança de fase	19
2.1.1 <i>Condução de Calor</i>	21
2.2 Modelagem de Transferência de Calor	24
2.3 Problema de Stefan	27
2.4 Soluções Analíticas dos Problemas de Stefan	28
2.4.1 <i>Problema de Stefan de uma fase</i>	29
2.4.2 <i>Problema de Stefan de duas fases</i>	30
3 Métodos Numéricos.....	32
3.1 Introdução	32
3.2 Método dos Elementos Finitos	33
3.3 Discretização no tempo	35
3.3.1 <i>Método-θ</i>	36
3.4 Método para solução do sistema não-linear	38
3.5 Formulações para o problema de mudança de fase	39
3.5.1 <i>Método da Capacidade Efetiva</i>	42
3.5.2 <i>Método da Entalpia</i>	43
3.5.3 <i>Integração descontínua</i>	44
4 Resultados.....	48
4.1 Implementação computacional	48
4.2 Problema 1D de solidificação	48
4.2.1 <i>Capacidade Efetiva</i>	50

4.2.2	<i>Capacidade Efetiva com Integração Descontínua</i>	52
4.2.3	<i>Entalpia</i>	52
4.2.4	<i>Frente de solidificação e erro numérico</i>	53
4.2.5	<i>Efeito do intervalo de mudança de fase</i>	56
4.3	Problema 1D de fusão	59
4.4	Problema 2D de solidificação	62
5	Conclusões	65
5.1	Conclusões	65
5.2	Trabalhos Futuros	66
	REFERÊNCIAS	67

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

1.1	Exemplo de derretimento de uma geleira	15
1.2	Processo de fundição contínua de aço (a) fotografia; (b) esquema; (Figuras extraída de [1]).	16
1.3	Representação esquemática de um sistema de gravação óptica Blu-ray (figura extraída de [2]).	17
2.1	Representação de uma região de transição de fase - Figura extraída de [3]. . .	21
2.2	Interface planar e morfologia esquemática de uma zona mushy - Figura extraída de [3].	21
2.3	Relação de estado $H = H(T)$ com c_L e c_S constantes.	23
2.4	Detalhamento do problema de mudança de fase.	27
3.1	Gráfico típico de H e c^* em função da temperatura.	42
3.2	Ilustração de um elemento finito com uma possível localização da frente de solidificação (figura adaptada de [4]).	43
3.3	Separação de um elemento em várias regiões distintas: (a) elemento com regiões sólida, <i>mushy</i> e líquida; (b) elemento com regiões <i>mushy</i> e líquida; (c) elemento com regiões sólida e <i>mushy</i> ; (d) elemento totalmente sólido; (e) elemento totalmente elemento <i>mushy</i> ; (f) elemento totalmente líquido. .	47
4.1	Domínio de solução para a análise de solidificação de uma placa semi-infinita. (Figura adaptada de [4])	49
4.2	Evolução da temperatura com o tempo no ponto $x = 1$ m.	51
4.3	Evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m usando o método da capacidade efetiva com integração descontínua.	52
4.4	Evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m usando o método da entalpia com a aproximação de Morgan <i>et al</i> [5].	53

4.5	Comparações da solução analítica e da solução numérica pelo método dos elementos finitos usando a formulação da capacidade efetiva com integração descontínua. (a) evolução da temperatura para o ponto $x = 1$ m; (b) distribuição de temperatura no tempo $t = 2$ s; (c) evolução da frente de solidificação ao longo do tempo.	54
4.6	Precisão do método da capacidade efetiva com uso de integração descontínua em termos da discretização do tempo. (a) evolução da temperatura em $x = 1$ m; (b) distribuição da temperatura em $t = 2$ s; (c) evolução da frente de solidificação.	56
4.7	Evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m usando o método da entalpia. . .	57
4.8	Evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m usando o método da capacidade efetiva com integração descontínua.	58
4.9	Erro relativo para diferentes intervalos de temperatura.	59
4.10	Evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m utilizando o método da capacidade efetiva.	61
4.11	Evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m utilizando o método da entalpia.	61
4.12	Evolução da distribuição de temperatura em diferentes instantes de tempo. . .	63
4.13	Simulação usando o Método da Capacidade Efetiva (MCE) sem o uso da integração descontínua.	64
4.14	Simulação usando o Método da Entalpia (ME).	64

LISTA DE TABELAS

3.1	Erro relativo cometido na integração de Gauss com diferentes números de pontos (n) para uma função descontínua.	45
4.1	Dados do problema de solidificação unidimensional	49
4.2	Erro Relativo para diferentes intervalos de temperatura utilizando o método da entalpia (ME) e o método da capacidade efetiva com uso da integração descontínua (MCE ID).	58
4.3	Dados do problema de fusão unidimensional	60
4.4	Dados do problema de solidificação bidimensional	62

Lista de abreviações e símbolos

ME	Método da entalpia
MCE	Método da capacidade efetiva
MCE ID	Método da capacidade efetiva usando a técnica de integração descontínua
MEF	Método dos elementos finitos
MVF	Método dos volumes finitos
EDP	Equação diferencial parcial
EDO	Equação diferencial ordinária
PVI	Problema de valor inicial
SI	Sistema internacional de medidas
S	Região do elemento finito no estado sólido
L	Região do elemento finito no estado líquido
M	Região do elemento finito situado na zona <i>mushy</i>
ΔT	Intervalo de temperatura onde ocorre mudança de fase do material
Δt	Tamanho do passo de tempo
h	Espaçamento

1 Introdução

O interesse em estudar problemas que envolvem processos de transferência de calor com mudança de fase são de grande importância em diversas áreas tais como na metalurgia, engenharia e em várias aplicações industriais.

Neste trabalho abordam-se os processos de fusão, que é a transformação do material sólido para o líquido; e solidificação, que é a transformação do material líquido para o sólido.

Problemas que envolvem processos de transferência de calor com mudança de fase são conhecidos como problemas de fronteira móvel. Nestes casos uma parte do contorno do problema é “livre” e sua posição e forma ao longo do tempo devem ser determinados como parte da solução do problema. Fisicamente, tal fronteira separa as fases líquida e sólida do material e por isso é denominada de *frente de solidificação/fusão* [6].

As soluções analíticas disponíveis para esses problemas tratam casos muito simples de condução unidirecional de calor e são de pouca aplicação prática. Entretanto, elas fornecem um ponto de partida para a verificação no desenvolvimento de modelos computacionais e soluções de problemas mais complexos envolvendo mudança de fase. Esses problemas são conhecidos como problema de Stefan [6].

Há três formas de transferência de calor em um material. São eles: condução, convecção e radiação [7]. Será considerado neste trabalho, por questões de simplicidade e foco na mudança de fase, apenas a transferência de calor por condução. A abordagem numérica para a solução das equações diferenciais será através do método dos elementos finitos [8] para discretização espacial e método das diferenças finitas para discretização temporal.

1.1 Motivação

O processo de mudança de fase mais comum é sem dúvida o derretimento do gelo e a solidificação da água. Cerca de 70% da superfície terrestre é coberta de água, que pode ser encontrada em três estados, ou fases: líquido, que é o que vemos em lagos, rios e oceanos; sólido, que é o gelo ou a neve; gás, que é o vapor de água. Em [9]

é examinado o derretimento do gelo através do modelo de Stefan, que é um problema clássico de transferência de calor com mudança de fase. A Figura 1.1 ilustra um exemplo de derretimento do gelo.



Figura 1.1: Exemplo de derretimento de uma geleira

Além disso, a modelagem de problemas que envolvem mudança de fase é utilizada em muitos problemas com diferentes materiais em várias áreas da engenharia e ciência, como em diversos processos industriais. Algumas aplicações práticas associadas à mudança de fase sólido/líquido incluem o congelamento de produtos alimentares na indústria alimentícia [10]; instalações de armazenamento de energia térmica por meio de materiais de mudança de fase; crescimento de cristais [11].

Destaca-se entre essas aplicações os processos metalúrgicos, tais como lingotamento, fundição, soldagem, purificação de metais e especificamente a solidificação de materiais energéticos [12].

Na simulação numérica de um problema dessa natureza para a indústria de fundição, por exemplo, é importante ter o conhecimento da localização das fases líquida e sólida durante o esfriamento do metal vazado. Com base nessas informações pode-se perceber a possibilidade de formação de vazios e porosidades [13], micro-segregação e outros defeitos. Com esse conhecimento, podem ser propostos ajustes na forma do molde ou podem ser utilizadas outras estratégias como o uso de arrefecedores ou alimentadores afim de melhorar a qualidade das peças vazadas. Dessa forma evita-se um número maior de peças

rejeitadas.

Quando se trata de materiais energéticos tem-se uma situação extrema. Este nome é dado aos materiais explosivos sólidos que são utilizados para a propulsão de granadas. Nos processos de fabricação destas munições a ocorrência de vazios pode levar a detonação do projétil no momento de seu lançamento. Desse modo, é muito importante ter uma correta compreensão e simulação computacional afim de prever esses comportamentos para que possam ser evitados a sua detonação prematura.

A fundição contínua é um processo no qual o aço líquido flui continuamente através de recipientes sendo gradualmente resfriado, conformado e cortado em forma de barras, passando posteriormente pelo processo de laminação (veja a Figura 1.2(a)). Esse processo permite reduzir a produção de resíduos de metal e a qualidade do produto final é maior [1]. Na Figura 1.2(b) mostra-se o diagrama do processo de vazamento contínuo em que o aço derretido é derramado de recipiente em recipiente e depois conformado através de um molde de cobre por uma série de rolos.

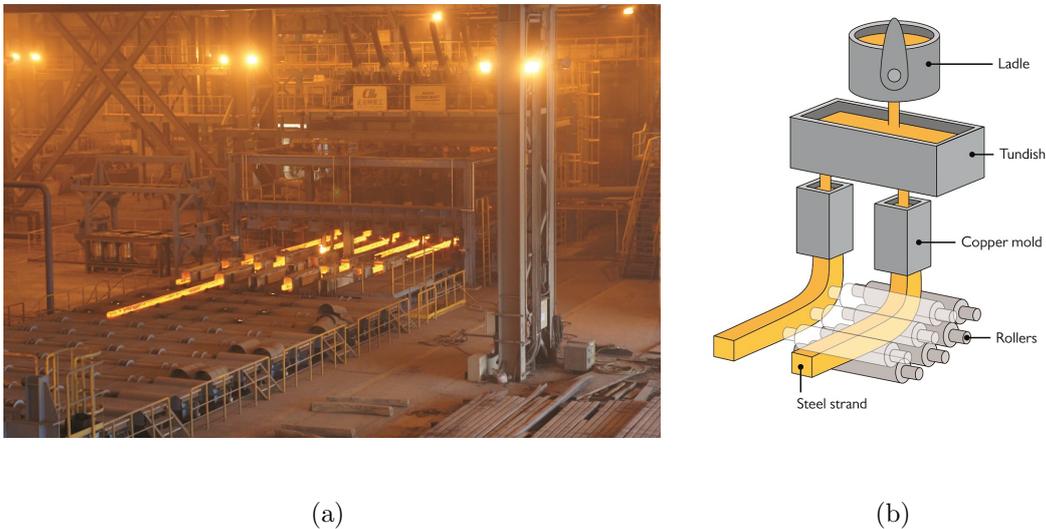


Figura 1.2: Processo de fundição contínua de aço (a) fotografia; (b) esquema; (Figuras extraída de [1]).

Nesse contexto também destaca-se a aplicação de processos de transferência de calor com mudança de fase em dispositivos de gravação de mídias tais como discos de Blu-Ray [14]. Blu-Ray é um formato de disco ótico (similar ao CD e DVD) para vídeo e áudio de alta definição e com grande capacidade para armazenamento. A Figura 1.3 mostra uma representação esquemática de um sistema de gravação óptica de disco Blu-Ray, que

consiste no derretimento do material de mudança de fase que após um tempo muito curto se solidifica em um estado amorfo representando fisicamente um bit escrito.

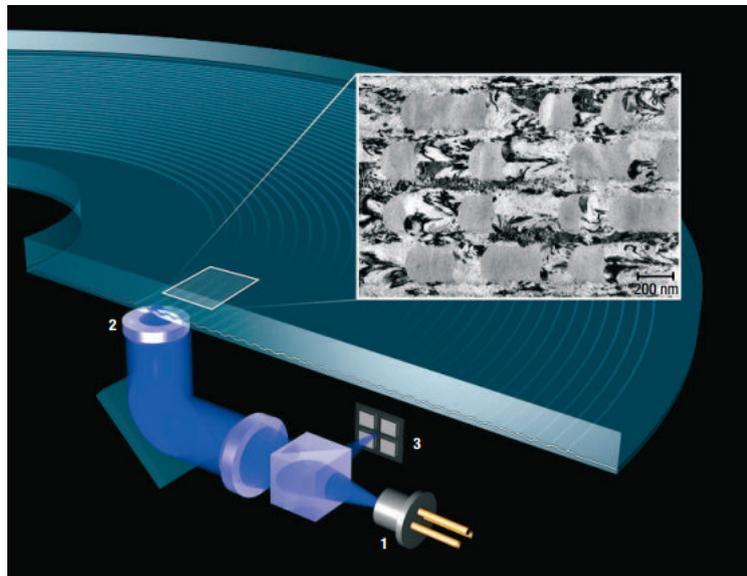


Figura 1.3: Representação esquemática de um sistema de gravação óptica Blu-ray (figura extraída de [2]).

Como visto, existem diversos exemplos de aplicação de problemas de transferência de calor que envolvem mudança de fase e, portanto, contribuem no interesse de se fazer um estudo para melhor compreensão dos fenômenos envolvidos e entendimento dos métodos numéricos associados para sua simulação computacional.

1.2 Objetivos

Este trabalho tem como principal objetivo estudar e comparar diferentes formulações numéricas do método dos elementos finitos para problemas de transferência de calor com mudança de fase levando em consideração apenas a condução como mecanismo dessa transferência.

Desta forma, neste trabalho serão revisadas algumas formulações clássicas para o problema de mudança de fase levantando suas características e, sobretudo, as suas dificuldades do ponto de vista numérico, tendo em vista a futura formulação de novos métodos ou utilização de outras técnicas.

Para atingir o objetivo fundamental, o presente trabalho evoluiu de acordo com a concretização do seguinte conjunto de objetivos específicos:

- Utilização do método dos elementos finitos na discretização espacial da equação da condução de calor e outros métodos para a discretização no tempo;
- Utilização do método de Newton para solução do sistema não-linear do problema de calor com mudança de fase;
- Modelagem do fenômeno da mudança de fase e da liberação/incorporação do calor latente que a acompanha utilizando os métodos baseados em malha fixa;
- Modificação na integração espacial do método da capacidade efetiva para evitar erros numéricos presentes nesse método.
- Realização de experimentos numéricos, comparações dos métodos e comparações com soluções analíticas e dados da literatura.

1.3 Organização do Texto

Este texto está organizado em 5 capítulos. Após uma breve introdução e motivação sobre o problema de mudança de fase, no Capítulo 2 são apresentados os conceitos básicos relacionados à esse problema, bem como a modelagem de transferência de calor por condução e a formulação do Problema de Stefan e sua solução analítica para um caso particular. Em seguida, no Capítulo 3 são apresentados a aplicação do método dos elementos finitos para a discretização espacial do problema da condução de calor em regime transiente, seguindo uma segunda discretização agora relativa ao tempo adotando-se para a integração temporal uma formulação pelo método de Euler implícito. Ainda nesse capítulo são apresentados o método de Newton usado para a solução do sistema não-linear e as formulações para o problema de mudança de fase baseado em malhas fixas, incluindo uma modificação baseada na integração numérica do método da capacidade efetiva. O Capítulo 4 é dedicado a apresentar os resultados numéricos obtidos com a utilização dos métodos discutidos no capítulo anterior que foram implementados neste trabalho. Por fim, no Capítulo 5 as conclusões finais, limitações e perspectivas de trabalhos futuros são apresentados.

2 Problemas de Mudança de Fase

Este capítulo é dividido em quatro seções. Na primeira seção são apresentados os conceitos básicos referentes aos problemas de mudança de fase incluindo com mais detalhe a transferência de calor por condução. Na segunda seção, é apresentado a modelagem de transferência de calor por condução bem como a equação diferencial parcial que a descreve e condições de contorno e inicial para uma completa formulação do problema de transferência de calor. Por fim, na terceira e quarta seções são apresentados o clássico Problema de Stefan e sua solução analítica para um caso particular, respectivamente.

2.1 Conceitos associados à 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 e seus átomos estão mais próximos um do outro, enquanto que em um líquido as moléculas podem “escapar” dessas posições de equilíbrio causando uma distância maior entre seus átomos. A grandeza física relacionada ao grau de agitação dessas moléculas é denominada temperatura. A temperatura pode ser medida em diversas escalas sendo as mais comuns em Kelvin (K), graus Celsius ($^{\circ}C$) ou graus Fahrenheit ($^{\circ}F$).

Alguns materiais quando submetidos a variações de temperatura (aquecimento ou resfriamento), são capazes de mudarem de fase, isto é, passam do estado sólido para o estado líquido e vice-versa. Nesse caso, a mudança de fase do material pode ocorrer a uma temperatura constante ou em uma determinada faixa de temperatura.

A mudança de fase é caracterizada pela transferência de calor entre os materiais, ou seja, é preciso haver uma transferência de energia suficiente para torná-lo sólido ou líquido. A quantidade necessária de energia que uma determinada quantidade de um material precisa receber ou ceder para mudar de fase é denominada calor latente e será aqui representada pela letra L , cuja unidade de medida no Sistema Internacional de unidades (SI) é $[J/kg]$.

Foram citados acima três formas de transferência de calor: condução, convecção e radiação. A condução pode ser definida como sendo a transferência de energia de uma região de alta temperatura para outra de temperatura mais baixa dentro de um meio ou entre meios diferentes em contato direto; não há fluxo ou transferência de massa no material. Ao se aquecer, por exemplo, a extremidade A de uma barra metálica enquanto a outra extremidade, B, é mantida a uma temperatura menor, existe uma transmissão desse calor da extremidade A (de maior temperatura) em direção à extremidade B (de menor temperatura). Esse fluxo de energia que ocorre em um meio material é denominado condução.

Em um fluido, como um gás ou um líquido, o calor pode ser transferido através do fluxo de partículas, ou seja, ocorre devido ao movimento do próprio fluido [3]. Esse processo é chamado convecção. Um exemplo corriqueiro seria o resfriamento de um ambiente através da utilização de um aparelho de ar-condicionado.

A transmissão por radiação transporta a energia térmica por ondas eletromagnéticas, por exemplo, o calor do Sol que nos atinge. Percebe-se que não há substância no espaço para conduzir esse calor. O calor é apenas uma forma de radiação eletromagnética.

A transição de uma fase do material para outra devido à absorção ou liberação de calor ocorre em uma certa temperatura ou como dito anteriormente, ocorre em uma faixa de temperatura. A essa temperatura T_m se dá o nome de temperatura de fusão/solidificação ou simplesmente temperatura de mudança de fase. Sob pressão fixa, a temperatura T_m pode ser um valor fixo ou uma função de outras variáveis termodinâmicas. Interface ou frente de fusão/solidificação é o nome que se dá para a região de transição de fase onde ambas as fases sólida e líquida coexistem.

Para a maioria dos materiais puros, materiais constituídos de uma única substância, a interface corresponde a uma curva isotérmica com espessura desprezível. Quando a mudança de fase ocorre em um intervalo de temperatura, característica de materiais compostos ou que sofrem super-resfriamento, essa faixa de temperatura fica compreendida entre as temperaturas conhecidas como *liquidus* e *solidus* [5]. A temperatura *liquidus* é a menor temperatura correspondente à fase totalmente líquida e a temperatura *solidus* é a maior temperatura correspondente à fase totalmente sólida. O material situado nesse intervalo está parcialmente líquido e parcialmente sólido se assemelhando a um meio poroso e nesse caso a região de mudança de fase pode ter uma espessura aparente e é

chamada de *zona mushy*.

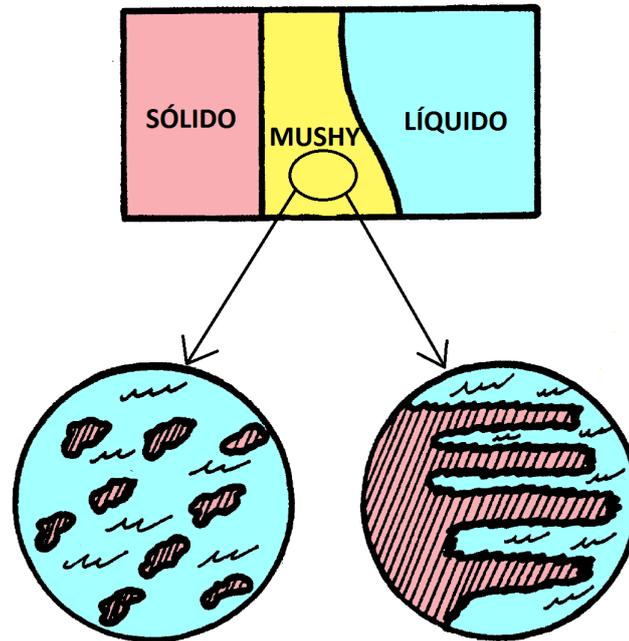


Figura 2.1: Representação de uma região de transição de fase - Figura extraída de [3].

Observam-se na Figura 2.1 três regiões distintas: a região sólida, a região líquida e a *zona mushy*, onde o material está mudando de fase. A microestrutura da *zona mushy* pode ter formas bem complexas e variadas. Na figura a seguir é ilustrado algumas formas que a zona mushy pode apresentar, incluindo o caso de uma fronteira planar.

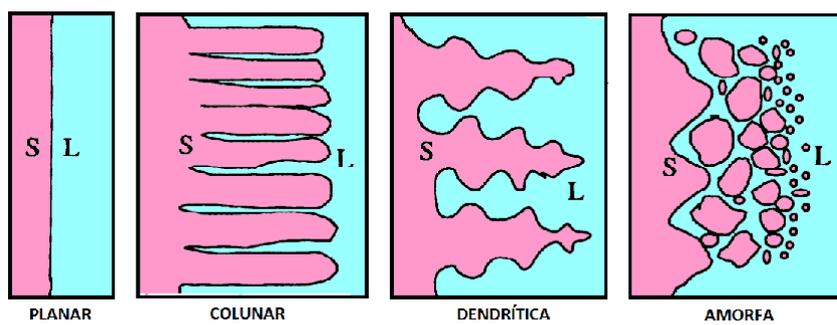


Figura 2.2: Interface planar e morfologia esquemática de uma zona mushy - Figura extraída de [3].

2.1.1 Condução de Calor

A transferência de calor por condução (ou difusão) é a transferência de energia térmica dentro de um meio ou entre meios diferentes em contato direto. A temperatura, calor

(energia térmica) e fluxo de calor são quantidades fundamentais relacionadas à condução de calor através de um material. O calor flui das temperaturas mais altas para as temperaturas mais baixas.

A energia térmica, também chamada de entalpia é o calor absorvido por um material sob pressão constante. Denota-se por H a entalpia por unidade de massa (J/kg). Para um material puro sob pressão constante, quando não há variação de volume, a entalpia representa a energia total e o calor absorvido (ou liberado) está relacionado com o aumento da temperatura através de

$$dH = c dT, \quad (2.1)$$

onde $c(T)$ é o calor específico, medido em $J/kg^\circ C$, o qual representa a quantidade de energia (ou de calor) que é necessário fornecer (ou remover) a $1kg$ de material para elevar (ou reduzir) sua temperatura em $1^\circ C$.

Isto é, o calor específico é uma propriedade do material, é um valor sempre positivo e pode depender da temperatura [6]. O calor que acompanha uma variação de temperatura dado por (2.1) é chamado calor sensível (ou entalpia sensível) que difere do calor latente de mudança de fase pelo fato de que calor latente é a energia absorvida (ou liberada) à temperatura constante (T_m , temperatura de mudança de fase). Da equação (2.1) o calor sensível (entalpia sensível) por unidade de massa de material à temperatura T é então dado 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 o material é sólido ($T < T_m$). Se $T = T_m$ o material pode ser tanto sólido ou líquido, sendo identificado pela energia (entalpia) disponível; Se líquido à T_m então contém calor latente L por unidade de massa, enquanto que sólido à T_m não possui calor latente. Se fixar a escala de energia escolhendo $H = 0$ para sólido à 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:

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

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

$$H = \begin{cases} H^L(T) := L + c_L(T - T_m), & \text{para } T > T_m \text{ (líquido)} \\ H^S(T) := 0 + c_S(T - T_m), & \text{para } T < T_m \text{ (sólido)} \end{cases} \quad (2.4)$$

Portanto, as fases sólida ou líquida podem ser caracterizadas tanto pela temperatura quanto pela entalpia como

$$\begin{aligned} \text{sólido} &\iff T < T_m \iff H < 0, \\ \text{líquido} &\iff T > T_m \iff H > L. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Em $T = T_m$ a entalpia leva um salto de magnitude L . Se $H = 0$ o material é sólido e se $H = L$ o material é líquido. A região onde

$$T = T_m \text{ e } 0 < H < L \quad (2.6)$$

é chamada de *zona mushy*, região que contém as fases líquida e sólida simultaneamente. Na Figura 2.3 mostra-se o gráfico que ajuda a exemplificar bem o exposto sobre a descontinuidade da temperatura em T_m e sua relação com a entalpia do material.

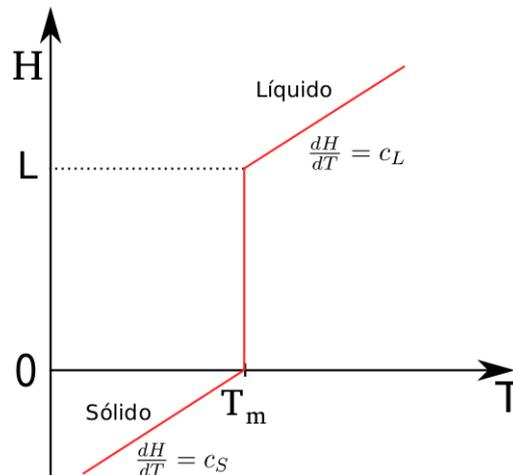


Figura 2.3: Relação de estado $H = H(T)$ com c_L e c_S constantes.

Além das quantidades temperatura e calor (energia térmica), o fluxo de calor também está relacionado com a transmissão de energia por condução em um material. O fluxo de calor pode ser definido como a quantidade de calor que atravessa uma unidade de área por unidade de tempo [6]. É uma quantidade vetorial cuja unidade de medida é dada em

$J/ms = W/m$, e sua dependência com a temperatura se dá pela *Lei de Fourier* (que foi proposta em 1822 [15]), a qual é dada por:

$$\mathbf{q} = -k\nabla T \quad (2.7)$$

onde k é o tensor de condutividade térmica do material, a qual é medida em $J/ms^{\circ}C$ ou W/mK e $\nabla(\cdot)$ é o operador gradiente dado por $\left(\frac{\partial(\cdot)}{\partial x}, \frac{\partial(\cdot)}{\partial y}, \frac{\partial(\cdot)}{\partial z}\right)$.

2.2 Modelagem de Transferência de Calor

Sabe-se, quando uma substância é aquecida, a temperatura aumenta e o calor (que é um tipo de energia) sempre tende a fluir de uma região de alta temperatura para uma região com temperatura mais baixa. Habitualmente há três métodos básicos pela qual a transferência de calor pode ocorrer: por condução, por convecção ou por radiação como descrito anteriormente.

A distribuição de temperatura num meio pode ocorrer devido ao efeito combinado destas três formas de transferência de calor. Em um problema de determinação da distribuição de temperaturas em sólidos, por exemplo, pode-se ter esses três modos de transmissão de calor, onde a transmissão por condução processa-se em seu interior e a transmissão por convecção e por radiação surgem como condições de contorno do problema [15].

Apresenta-se nesta seção a modelagem matemática de transferência de calor por condução. As principais quantidades relacionadas à condução de calor através de um material são, temperatura, calor (energia térmica) e fluxo do calor. A temperatura está relacionada ao movimento das moléculas de um material, calor absorvido por um material sob pressão constante é chamado entalpia (energia térmica) e fluxo de calor é uma quantidade de calor que atravessa uma unidade de área por unidade de tempo dado pela lei de Fourier acima definido em (2.7).

A lei da conservação da energia escrita em termos da entalpia é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \nabla \cdot \mathbf{q} = F \quad (2.8)$$

onde F (em J/m^3s) é uma fonte volumétrica de calor (se $F > 0$) ou um sumidouro (se

$F < 0$), ρ é a massa específica do material (kg/m^3), \mathbf{q} é o fluxo de calor e $\nabla \cdot (\cdot)$ é o operador divergente dado por $\left(\frac{\partial(\cdot)}{\partial x} + \frac{\partial(\cdot)}{\partial y} + \frac{\partial(\cdot)}{\partial z}\right)$.

A partir da lei da conservação de energia (2.8) e assumindo ρ constante e condução de calor isotrópica, isto é, para qualquer direção as propriedades do material não mudam, também expressando H e \mathbf{q} em termos da temperatura pelas relações (2.1) e (2.7), obtém-se a equação da condução de calor:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + F \quad (2.9)$$

Esta equação expressa a conservação de calor por meio de condução isotrópica do material de acordo com a Lei de Fourier. Trata-se de uma equação diferencial parcial que descreve o comportamento da temperatura $T(\mathbf{x}, t)$ na posição \mathbf{x} no instante de tempo t válida para cada posição \mathbf{x} da região ocupada pelo material de condutividade térmica k , massa específica ρ e calor específico c .

Para determinar o campo de temperatura num domínio Ω é necessário resolver a equação diferencial parcial (2.9) sujeita a condições de contorno e condições iniciais apropriadas. As condições de contorno podem ser, temperaturas prescritas em uma parte Γ_T do contorno

$$T = \bar{T} \text{ em } \Gamma_T, \quad (2.10)$$

fluxo de calor prescrito \bar{q} em uma outra parte Γ_q do contorno

$$q = \bar{q} \text{ em } \Gamma_q, \quad (2.11)$$

transmissão de calor por convecção de uma parte Γ_c do contorno à temperatura T para o fluido que está próximo à temperatura ambiente T_∞

$$q = h_c(T - T_\infty) \text{ em } \Gamma_c, \quad (2.12)$$

onde h_c é o coeficiente de transmissão de calor por convecção, e também do tipo transmissão de calor por radiação entre uma parte do contorno Γ_r à temperatura T e a superfície envolvente à temperatura T_a dada por

$$q = \beta \varepsilon (T^4 - T_a^4) = \beta \varepsilon (T^2 + T_a^2)(T + T_a)(T - T_a) = h_r(T - T_a) \text{ em } \Gamma_r, \quad (2.13)$$

onde β é a constante de Stefan-Boltzmann, ε é a emissividade e h_r é o coeficiente de transmissão de calor por radiação. No caso onde a transferência de calor no contorno se processar simultaneamente por convecção e por radiação e em particular se for $T_\infty = T_a$, pode-se escrever

$$q = h_c(T - T_\infty) + h_r(T - T_a) = h_{cr}(T - T_\infty) \quad (2.14)$$

onde $h_{cr} = h_c + h_r$ é o coeficiente de transmissão de calor por convecção e (ou) por radiação.

Neste trabalho será considerado transmissão de calor por condução com temperaturas prescritas em Γ_T , fluxo prescrito em Γ_q e considerando k constante. Dessa forma, a equação (2.9) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T + F, \quad (2.15)$$

que em conjunto com as condições iniciais e de contorno formulam um problema de condução de calor envolvendo mudança de fase do material. Em (2.15), $\nabla^2(\cdot)$ é o operador laplaciano dado por $\left(\frac{\partial^2(\cdot)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial z^2} \right)$.

O modelo matemático da classe de problemas de mudança de fase mais simples que envolvem um mínimo de efeitos físicos necessários para sua formulação são conhecidos como Problema de Stefan. A característica principal destes problemas de mudança de fase é que além da distribuição de temperaturas, a forma e a localização da interface são desconhecidas, precisando ser resolvidas como parte da solução do problema.

Soluções analíticas para esses problemas são encontradas em casos limitados, envolvendo geometria semi-infinita e unidimensional; propriedades físicas do material consideradas constantes em cada fase; temperatura de mudança de fase também 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. Mais detalhes a respeito desse tipo de problemas de mudança de fase, chamados Problema de Stefan, podem ser encontrados em [3, 6].

2.3 Problema de Stefan

Apresenta-se nesta seção a formulação do modelo matemático da classe de problemas de mudança de fase mais simples. Estes modelos são conhecidos como Problemas de Stefan [3, 6] e são caracterizados por considerar apenas a condução como principal mecanismo de transferência de calor. Nos processos de mudança de fase para esse tipo de problema, a região de transição de fase consiste de uma interface sólido-líquido bem definida de espessura nula que separa as fases sólida e líquida. Além das condições de contorno tradicionais, é necessário impor condições na interface sólido-líquido.

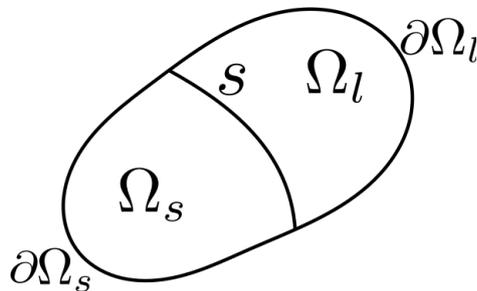


Figura 2.4: Detalhamento do problema de mudança de fase.

Na Figura (2.4) observam-se esquematicamente uma região em transição de fase, onde as fases sólida e líquida estão separadas por uma curva denotada por s representando a interface. Também nessa figura Ω_s e $\partial\Omega_s$ representam, respectivamente, o volume ocupado e a fronteira externa do material em estado sólido, e Ω_l e $\partial\Omega_l$ representam, respectivamente, o volume ocupado e a fronteira externa do material em estado líquido.

Deve-se, portanto, resolver a equação do calor (2.15) em cada uma das fases. No sólido, as propriedades serão denotadas por c_s e k_s e no líquido serão denotadas por c_L e k_L . A condição a respeito da localização da interface é conhecida como condição de Stefan e definida a seguir:

$$\rho L \frac{\partial s}{\partial t} = k_L \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_{x=s} + k_s \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_{x=s} \quad (2.16)$$

onde s representa a posição da interface, $\frac{\partial s}{\partial t}$ a velocidade da interface ao longo do tempo, $\frac{\partial T}{\partial n}$ em $x = s$ representa a derivada parcial da temperatura quando se aproxima da interface seja pela esquerda ou pela direita. A relação (2.16) expressa que a diferença entre o fluxo de calor entre a fase sólida e a fase líquida é proporcional à velocidade da interface.

Dessa forma, a formulação matemática do processo de mudança de fase chamado Problema de Stefan pode ser definido por:

Seja uma região de domínio Ω , inicialmente sólido à temperatura $T_{inicial} < T_m$, que é fundida impondo uma temperatura $T_h > T_m$ em $\partial\Omega_D$, enquanto que em $\partial\Omega$ é mantido isolado. Assume-se que as propriedades termofísicas ρ , c_L , k_L , c_S e k_S são constantes e conhecidas, e a interface sólido-líquido bem definida ocorrendo em $\mathbf{x} = s(t)$.

Formalmente, o problema de Stefan é descrito da seguinte maneira:

Encontrar a temperatura $T(\mathbf{x}, t)$, em Ω e $t > 0$, e a posição da interface $s(t)$, para $t > 0$, satisfazendo:

Equações diferenciais:

$$\rho c_L \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k_L \nabla T), \quad \text{em } \Omega_L, \quad t > 0 \quad (\text{região líquida}) \quad (2.17)$$

$$\rho c_S \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k_S \nabla T), \quad \text{em } \Omega_S, \quad t > 0 \quad (\text{região sólida}) \quad (2.18)$$

Condições de interface:

$$T_l = T_s = T_m, \quad \text{em } \mathbf{x} = s \quad \text{e} \quad t > 0 \quad (2.19)$$

$$\rho L \frac{\partial s}{\partial t} = k_L \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_{x=s} + k_S \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_{x=s} \quad \text{para } t > 0 \quad (2.20)$$

Condições iniciais:

$$s(0) = \mathbf{0}, \quad (2.21)$$

$$T(\mathbf{x}, 0) = T_{inicial} < T_m \quad \text{em } \Omega \quad (\text{material inicialmente sólido}) \quad (2.22)$$

Condições de contorno:

$$T(\mathbf{x}, t) = T_h > T_m, \quad \text{em } \mathbf{x} \in \partial\Omega_D \quad \text{e} \quad t > 0 \quad (2.23)$$

$$k \nabla T \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{para } t > 0 \quad \text{em } \partial\Omega \quad (\text{contorno adiabático}) \quad (2.24)$$

2.4 Soluções Analíticas dos Problemas de Stefan

Nesta seção serão apresentados a formulação e solução analítica de dois casos simples de problemas de mudança de fase unidimensionais: o problema de Stefan de uma fase e o

de duas fases. No problema de Stefan de uma fase 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 mudança de fase T_m . Já no problema de Stefan de duas fases ambas as fases, sólida e líquida participam efetivamente do processo. Embora exista formulação do Problema de Stefan para casos em duas ou três dimensões, soluções analíticas não estão disponíveis [6].

2.4.1 Problema de Stefan de uma fase

O problema de Stefan unidimensional de uma fase é o mais simples modelo de problema de mudança de fase que apresenta solução analítica. Como uma das fases é mantida à temperatura T_m , elimina-se a necessidade de formular uma equação de condução de calor para esta fase. O problema então 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).

Para o problema de fusão e considerando as propriedades físicas ρ , c_L , k_L e L constantes, o modelo matemático corresponde a :

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

$$\rho c_L \frac{\partial T}{\partial t} = k_L \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad \text{para } 0 < x < s(t), \quad t > 0; \quad (2.25)$$

$$T(s(t), t) = T_m \quad \text{para } t \geq 0; \quad (2.26)$$

$$\rho L \frac{\partial s}{\partial t} = -k_L \frac{\partial T(s(t)^-, t)}{\partial x} \quad \text{para } t > 0; \quad (2.27)$$

$$s(0) = 0 \quad (\text{material inicialmente completamente sólido}); \quad (2.28)$$

$$T(0, t) = T_h > T_m \quad \text{para } t > 0. \quad (2.29)$$

O processo de solução é baseado na solução de similaridade de Neumann envolvendo a função erro [3, 6], mas aqui não será mostrado detalhadamente. Solução de similaridade no contexto de equações diferenciais parciais (EDPs) é uma solução que é obtida a partir de sua transformação em uma equação diferencial ordinária (EDO), através de uma mudança de variável, onde a nova variável independente é uma relação entre as originais. Dessa forma a solução analítica para o problema de Stefan de uma fase é apresentado a seguir da seguinte maneira:

A posição da interface é dada pela equação:

$$s(t) = 2\lambda\sqrt{k_L t}. \quad (2.30)$$

O valor de λ é calculado pela seguinte equação não-linear:

$$\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) = \frac{c_L(T_m - T_h)}{L\sqrt{\pi}}. \quad (2.31)$$

Neste trabalho o método de Newton-Raphson foi usado para determinar o valor de λ .

Por fim, determina-se a temperatura da fase líquida através da equação a seguir:

$$T_L(x, t) = T_h - (T_h - T_m) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{k_L t}}\right)}{\operatorname{erf}(\lambda)}. \quad (2.32)$$

Da equação (2.31), define-se a razão entre a entalpia sensível e o calor latente de fusão L como o número de Stefan:

$$Ste = \frac{c(T_h - T_m)}{L} \quad (2.33)$$

O número de Stefan é um número adimensional e permite caracterizar um problema de transferência de calor com mudança de fase. Valores grandes de Ste indicam um aumento na velocidade do processo de transferência de calor tornando o problema mais difícil de ser resolvido numericamente. Já para valores pequenos de Ste indicam que o processo é mais lento, sendo mais fácil capturar informações da mudança de fase e, portanto, o problema pode ser mais fácil de ser resolvido numericamente.

A seguir será apresentado o Problema de Stefan de duas fases e sua solução analítica agora para um problema de solidificação.

2.4.2 Problema de Stefan de duas fases

No problema de Stefan de duas fases ambas as fases participam efetivamente do processo, com suas temperaturas variando, sendo necessário utilizar a equação de condução para cada uma delas. Considerando as propriedades físicas ρ , c_L , k_L , c_S , k_S e L constantes e considerando agora o caso da solidificação, o material é então inicialmente líquido, mas sua temperatura inicial deve ser um valor $T_c > T_m$. O modelo matemático que descreve o problema de solidificação pode ser formulado da seguinte forma:

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

$$\rho c_L \frac{\partial T}{\partial t} = k_L \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad \text{para } s(t) < x, \quad t > 0; \quad (2.34)$$

$$\rho c_S T_t = k_S \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad \text{para } 0 < x < s(t), \quad t > 0; \quad (2.35)$$

$$T(s(t), t) = T_m \quad \text{para } t \geq 0; \quad (2.36)$$

$$\rho L \frac{\partial s}{\partial t} = -k_S \frac{\partial T(s(t)^-, t)}{\partial x} + k_L \frac{\partial T(s(t)^+, t)}{\partial x} \quad \text{para } t > 0; \quad (2.37)$$

$$T(x, 0) = T_c > T_m, \quad s(0) = 0 \quad x > 0 \quad (2.38)$$

$$T(0, t) = T_h < T_m, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} T(x, t) = T_c \quad \text{para } t > 0, \quad (2.39)$$

onde a condição (2.37) é chamada de condição de Stefan.

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 [6]. A solução analítica para o problema de Stefan de duas fases é então dada por [6] da seguinte forma:

Posição da interface dada pela equação:

$$s(t) = 2\lambda\sqrt{k_S t}. \quad (2.40)$$

A temperatura da fase sólida onde $0 < x < s(t)$, e $t > 0$ é:

$$T_S(x, t) = T_h - (T_h - T_m) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{k_S t}}\right)}{\operatorname{erf}(\lambda)}. \quad (2.41)$$

A temperatura da fase líquida para $x > s(t)$, e $t > 0$ é dado por:

$$T_L(x, t) = T_c - (T_c - T_m) \frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{k_L t}}\right)}{\operatorname{erfc}(\lambda\sqrt{k_S/k_L})}, \quad (2.42)$$

onde $\operatorname{erfc}(x)$ é a função erro complementar, definida por $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$. Ainda, nas equações (2.41) e (2.42), λ é a solução da seguinte equação transcendental

$$\frac{c_S(T_m - T_h)}{e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda)} - \frac{c_L(T_c - T_m)}{\nu^{\frac{1}{2}} e^{\nu\lambda^2} \operatorname{erfc}(\nu^{\frac{1}{2}}\lambda)} = L\lambda\sqrt{\pi}, \quad (2.43)$$

com $\nu = \frac{k_S}{k_L}$.

3 Métodos Numéricos

Nesse capítulo os métodos numéricos utilizados para resolver o problema de transferência de calor com mudança de fase serão apresentados. Em particular, serão apresentados o método dos elementos finitos para discretização espacial e suas modificações para o problema de mudança de fase, métodos para discretização no tempo e o método de Newton para solução de sistemas de equações não-lineares.

3.1 Introdução

Foram vistas várias aplicações que envolvem processos de transferência de calor com mudança de fase e de forma similar diversos métodos numéricos têm sido utilizados para a solução em problemas desse tipo [16].

Em [17], utilizou-se o método dos elementos finitos na discretização espacial em um problema de condução de calor transiente enquanto algumas formulações explícitas para a discretização temporal foram estudadas e comparadas. Nesse trabalho Thomas *et al.* [17] resolveram o problema utilizando elementos finitos triangulares e compararam diferentes formulações para a solução do problema do ponto de vista da precisão numérica e desempenho computacional.

Dalhuijsen *et al.* [18] realizaram um estudo comparativo utilizando o método dos elementos finitos com diferentes aproximações para a formulação baseada na entalpia e diferentes métodos de integração no tempo. Outros trabalhos que utilizaram o método dos elementos finitos para o problema de mudança de fase também podem ser encontrados em [19, 20, 21].

Por outro lado em outros estudos como aqueles realizados por Voller *et al.* [22] e Odone *et al.* [3], uma formulação baseada na entalpia e no método dos volumes finitos (MVF) foi utilizada para o problema de mudança de fase. Entretanto, ressalta-se que nesses trabalhos considerou-se também a transferência de calor por convecção e, portanto, foram utilizados métodos específicos para o tratamento do termo convectivo como, por exemplo, o algoritmo SIMPLE [23].

Neste trabalho, utiliza-se o método dos elementos finitos em um problema de

transferência de calor com mudança de fase em regime transiente utilizando-se elementos quadrilaterais isoparamétricos bilineares.

3.2 Método dos Elementos Finitos

O Método dos Elementos Finitos (MEF) é uma das técnicas utilizadas na solução de problemas térmicos, e possui certas vantagens em relação à outras como diferenças finitas [15], tais como a representação de geometrias e condições de contorno complexas, a utilização de funções de forma (funções de aproximação) mais simples. Além disso o método possui uma forma sistemática que o torna atrativo para implementação em computador.

A aplicação do Método dos Elementos Finitos para a equação da condução de calor definida logo abaixo está bem documentada em alguns textos [15] e, por esta razão, aqui será feito apenas uma breve descrição da formulação e sua discretização espacial por elementos finitos para o problema em regime transiente.

A equação da energia relacionando o comportamento térmico de um material é dada por:

$$\rho c^* \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + F \quad (3.1)$$

onde c^* é o calor específico dependente da temperatura que será detalhado mais adiante, k a condutividade térmica do material, F o vetor fonte ou sumidouro de calor, T a temperatura e t o tempo.

O campo de temperatura que satisfaz a equação acima também deve satisfazer a condição inicial e as condições de contorno consideradas neste trabalho:

- Condição de contorno essencial $T = \bar{T}$ em Γ_T , em que a temperatura \bar{T} é prescrita na parte Γ_T do contorno (Condição de Dirichlet);
- Condição de contorno natural $q = \bar{q} = 0$ ($\frac{\partial T}{\partial n} = 0$) em Γ_q , onde n é a normal externa ao contorno. O fluxo $\frac{\partial T}{\partial n}$ é nulo, sendo uma superfície perfeitamente isolada. (Condição de Neumann).

O primeiro passo na discretização espacial pelo MEF é a formulação variacional, também conhecida como formulação fraca, da equação diferencial (3.1). Esta formulação é obtida ao se multiplicar ambos os lados a equação por uma função teste $v = v(\mathbf{x}, t)$,

considerada nula no contorno Γ_T , e integrar em todo o domínio Ω usando a fórmula de Green. A função teste v pertence ao seguinte espaço:

$$V_0 = \{v : \|v\| + \|\nabla v\| < \infty, v|_{\Gamma_T} = 0\}, \quad (3.2)$$

onde a norma é dada por:

$$\|v\| = \sqrt{\int_{\Omega} v^2 d\Omega} \quad (3.3)$$

Dessa forma, a formulação variacional da equação (3.1) consiste em: *encontrar T tal que para cada $t \in [0, t_f]$, com t_f sendo o tempo final, satisfaz:*

$$\int_{\Omega} \rho c^* \frac{\partial T}{\partial t} v d\Omega = - \int_{\Omega} (k \nabla T)(\nabla v) d\Omega + \int_{\Omega} F v d\Omega, \quad \forall v \in V_0. \quad (3.4)$$

A solução da equação (3.4) é obtida discretizando-se inicialmente o espaço, dando lugar a um sistema de equações diferenciais ordinárias na variável temporal, que com as condições iniciais descrevem um Problema de Valor Inicial (PVI), que posteriormente deve ser integrado no tempo.

Para tanto, o domínio Ω é dividido em um número finito de subdomínios não sobrepostos, aos quais se dá o nome de elementos Ω_e tal que $\bigcup_{e=1}^m \Omega_e = \Omega$, onde m é o número de elementos. A função desconhecida, no caso a temperatura T , é então aproximada, no interior de cada elemento, em termos das temperaturas nodais, T_j , em qualquer instante de tempo t , de acordo com:

$$T(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^n \varphi_j(\mathbf{x}) T_j(t), \quad (3.5)$$

e a derivada

$$\frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \sum_{j=1}^n \varphi_j(\mathbf{x}) \frac{dT_j(t)}{dt} = \sum_{j=1}^n \varphi_j(\mathbf{x}) \dot{T}_j(t), \quad (3.6)$$

onde n é o número de nós do elemento e φ_j é a função de forma associada ao nó j , ou seja, é uma função definida por partes que tem valor 1 (um) no nó j e 0 (zero) nos demais.

No método de Galerkin [8, 15], escolhe-se para a função teste v as próprias funções de forma φ_j , usadas para a aproximação da temperatura. Dessa forma tem-se:

$$\int_{\Omega} \rho c^* \frac{\partial T}{\partial t} \varphi_i d\Omega = - \int_{\Omega} (k \nabla T)(\nabla \varphi_i) d\Omega + \int_{\Omega} F \varphi_i d\Omega. \quad (3.7)$$

para $i = 1, \dots, n$.

Substituindo (3.5) e (3.6) em (3.7), tem-se o seguinte sistema de equações diferenciais:

$$\int_{\Omega} F \varphi_i \, d\Omega = \sum_{j=1}^n \dot{T}_j(t) \int_{\Omega} \rho c^* \varphi_j \varphi_i \, d\Omega + \sum_{j=1}^n T_j(t) \int_{\Omega} (k \nabla \varphi_j) (\nabla \varphi_i) \, d\Omega. \quad (3.8)$$

para $i = 1, \dots, n$.

De forma matricial tem-se:

$$M\dot{T} + AT = F(t) \quad (3.9)$$

onde os coeficientes da matriz de massa, M , são dados por:

$$M_{ij} = \int_{\Omega} \rho c^* \varphi_i \varphi_j \, d\Omega, \quad (3.10)$$

os coeficientes da matriz de rigidez, A , dados por:

$$A_{ij} = \int_{\Omega} (k \nabla \varphi_i) (\nabla \varphi_j) \, d\Omega, \quad (3.11)$$

e os coeficientes do vetor de carga (fluxos nodais) por:

$$F_i = \int_{\Omega} F \varphi_i \, d\Omega. \quad (3.12)$$

Neste trabalho utilizou-se de elementos finitos isoparamétricos bilineares. O conceito de isoparamétrico significa que as coordenadas de um ponto genérico do elemento são obtidas por interpolação das suas coordenadas nodais, utilizando-se para as funções de interpolação as mesmas funções de forma usadas na aproximação da temperatura T (3.5). A definição das funções de base do elemento quadrilateral bilinear em um sistema local de coordenadas, assim como outros detalhes técnicos do MEF podem ser encontrados na literatura especializada [8].

3.3 Discretização no tempo

O problema semi-discreto definido pela equação (3.9) representam um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs) de primeira ordem e sua discretização é feita pelo método

das diferenças finitas [4]. O método das diferenças finitas é o nome genérico dado a métodos que envolvem a aproximação de derivadas espaciais. Existem disponíveis na literatura diversos esquemas de solução para a equação (3.9), como os métodos de Euler explícito, implícito e Crank-Nicolson. Nesse sentido, um dos esquemas mais utilizados, devido à sua flexibilidade, é o método- θ [24], no qual o parâmetro θ permite escolher entre os esquemas de Euler explícito (estabilidade limitada pelo passo de tempo), Euler implícito (incondicionalmente estável) e outros como será mostrado a seguir.

Ressalta-se aqui também que nesse contexto do problema de mudança de fase é comum encontrar na literatura trabalhos que usam outros esquemas para discretização no tempo como a família de métodos de dois passos conhecida como esquema Dupont II [18] ou o esquema de Lees [25]. Entretanto, nesse trabalho o escopo foi limitado ao uso do método- θ descrito a seguir.

3.3.1 Método- θ

Antes de prosseguir, ressalta-se que o sistema de EDOs dado pela equação (3.9) é um sistema não-linear. Nesse caso, o sistema pode ser melhor interpretado da seguinte forma geral:

$$M(T)\dot{T} + A(T)T = F(t), \quad (3.13)$$

onde evidencia-se o fato de que a matriz de massa M depende da temperatura, devido à presença do coeficiente c^* , e também que a matriz de rigidez também poderia depender da temperatura através do coeficiente de condutividade térmica k . Entretanto, essa última dependência não foi considerada nesse trabalho.

O esquema de integração temporal adotado no presente trabalho é conhecido como método- θ , conforme descrito em [18], o qual consiste em uma família de métodos de um passo que representam uma aproximação para a equação (3.9).

O esquema de discretização temporal para a equação (3.13) é da seguinte forma:

$$M^{n+\theta}(T^{n+1} - T^n)/\Delta t + A^{n+\theta}(\theta T^{n+1} + (1 - \theta)T^n) = F^{n+\theta}, \quad (3.14)$$

onde $\theta \in [0, 1]$ é um parâmetro que permite obter vários esquemas diferentes de integração no tempo. Aqui, $M^{n+\theta}$ e $A^{n+\theta}$ representam as matrizes M e A avaliadas no instante de tempo $t_{n+\theta} = \theta t_{n+1} + (1 - \theta)t_n$, isto é, em um instante entre t_n e t_{n+1} .

Desta forma pelo método- θ pode-se escrever:

$$(M^{n+\theta} + \theta\Delta t A^{n+\theta})T^{n+1} = (M^{n+\theta} - (1 - \theta)\Delta t A^{n+\theta})T^n + \Delta t F^{n+\theta}. \quad (3.15)$$

onde os valores mais usuais para θ e os correspondentes métodos são [4, 24]:

- $\theta = 0$ (Euler Explícito);
- $\theta = \frac{1}{2}$ (Crank-Nicolson);
- $\theta = \frac{2}{3}$ (Galerkin);
- $\theta = 1$ (Euler Implícito).

Todos, exceto o primeiro (Euler explícito), dos esquemas acima são implícitos, isto é, eles exigem a solução de um sistema de equações lineares.

A utilização do método de Euler explícito exige uma restrição no tamanho do passo de tempo e no tamanho do espaçamento para se obter convergência da solução de um problema, por isso a classificação de método de condicionalmente estável.

Por outro lado, os métodos implícitos usuais são geralmente incondicionalmente estáveis, isto é, não há restrição quanto ao passo de tempo e do espaçamento da malha. Dessa forma é possível usar passos de tempo maiores sem comprometer a estabilidade da solução e, assim, estes métodos gastam menos tempo para atingir uma solução com a precisão desejada em algum problema. Porém, o custo computacional desses métodos por passo de tempo aumenta devido a necessidade de resolver um sistema de equações. Além disso, destaca-se que no presente caso, como as propriedades do material dependem da temperatura, esse sistema de equações é não-linear.

Os resultados que serão apresentados no Capítulo 4 foram obtidos utilizando-se o esquema de Euler implícito ($\theta = 1$) para integração no tempo, o que irá implicar na necessidade de se resolver um sistema de equações não-lineares a cada passo de tempo.

Geralmente, o uso da técnica de condensação (*lumping*) da matriz de massa M reduz gastos computacionais quando o método de Euler explícito é utilizado [8]. Em particular, nesse contexto de problemas de mudança de fase, alguns trabalhos [18, 26] utilizaram esse processo que consiste em substituir a matriz M por uma matriz diagonal M^D que possui as somas das linhas de M em cada diagonal. Assim, as entradas diagonais M_{ii}^D são dadas por:

$$M_{ii}^D = \sum_{j=1}^n M_{ij} \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.16)$$

Em [18] o uso de condensação da matriz de massa forneceu em melhores resultados quando combinado com as técnicas de integração no tempo de Lees e Dupont II. Entretanto, Dalhuijsen *et al.* [18] reportaram que o uso da técnica de *lumping* da matriz de massa combinado com o método de Euler implícito resulta em poucas diferenças quando comparado com a versão da matriz de massa consistente (sem utilizar a técnica de condensação).

Em experimentos iniciais desse trabalho não foi observada nenhuma melhoria significativa nos resultados quando a matriz de massa foi condensada e, portanto, essa técnica não foi explorada em profundidade e nem comparada nos métodos aqui abordados.

3.4 Método para solução do sistema não-linear

Embora existam vários esquemas disponíveis, neste trabalho adotou-se o método- θ com a escolha $\theta = 1$ [4], isto é, um esquema implícito que requer a solução de um sistema de equações. Como dito anteriormente, esse sistema de equações é não-linear, já que a propriedade térmica c^* do material depende da temperatura. Portanto, como o sistema de equações dada por (3.9) é não-linear a sua solução requer um processo iterativo. Adotou-se neste trabalho um procedimento baseado no método de Newton-Raphson [15].

Para aplicar o método de Newton-Raphson na equação (3.15), que deve ser resolvida a cada passo de tempo, primeiramente define-se o resíduo R da seguinte forma:

$$R^{n+1} = (M^{n+\theta} + \theta\Delta t A^{n+\theta})T^{n+1} - [(M^{n+\theta} - (1 - \theta)\Delta t A^{n+\theta})T^n + \Delta t F^{n+\theta}], \quad (3.17)$$

A formulação iterativa para resolver o sistema de equações não-linear (3.17) é da seguinte forma:

$$\begin{cases} J_{j-1}^{n+1} \Delta T_j^{n+1} &= -R_{j-1}^{n+1}, \\ T_j^{n+1} &= T_{j-1}^{n+1} + \Delta T_j^{n+1}, \quad j = 1, \dots, n_{iter}, \end{cases} \quad (3.18)$$

onde j denota o passo do algoritmo do método de Newton, n_{iter} o seu número de iterações e $n + 1$ o instante de tempo atual. A matriz J é conhecida como matriz Jacobiana J e é dada por:

$$J_j^{n+1} = \frac{\partial R_j^{n+1}}{\partial T_{n+1}} \approx M^{n+\theta} + \theta\Delta t A^{n+\theta}, \quad (3.19)$$

em que ignoram-se as contribuições das propriedades térmicas que dependem da

temperatura [19]. Para iniciar as iterações considera-se que $J_0^{n+1} = J^n$ e $T_0^{n+1} = T^n$. Então, calcula-se o incremento de temperatura da seguinte forma:

$$\Delta T_j^{n+1} = - (J_{j-1}^{n+1})^{-1} R_j^{n+1}. \quad (3.20)$$

O procedimento iterativo continua, resolvendo-se o sistema (3.20) para ΔT_j^{n+1} , em cada novo passo do processo iterativo, até que a solução convirja. Quanto ao critério de convergência adotado, optou-se por [19]:

$$\frac{\|R_j^{n+1}\|}{\|K_j^{n+1}T_j^{n+1}\|} < \varepsilon, \quad (3.21)$$

onde ε é a tolerância exigida, $\|\cdot\|$ é a norma euclidiana, ΔT_j^{n+1} é a alteração ao campo de temperaturas na iteração j e T_j^{n+1} é a temperatura atual.

Também é destacado que uma vez utilizado elementos isoparamétricos para calcular as integrais em (3.10), (3.11) e (3.12) empregam-se as fórmulas da quadratura Gaussiana em que as propriedades do material são calculadas em cada ponto de Gauss em função da temperatura nesses pontos.

Na literatura encontram-se modificações e melhorias adotadas juntamente com o método de Newton para resolver o sistema de equações não-lineares e até mesmo métodos alternativos. Em [27] o método de Newton baseado em busca linear foi aplicado para o problema de mudança de fase, enquanto em [24] o método de Picard é descrito. Mais formulações e discussões sobre o sistema não-linear desse problema podem ser encontradas em [28].

3.5 Formulações para o problema de mudança de fase

A análise de processos de condução de calor envolvendo mudança de fase é importante para muitas aplicações práticas como vimos anteriormente. Devido a isto são encontrados na literatura um grande número de métodos numéricos para a resolução da equação da condução de calor (2.9). Os métodos numéricos encontrados podem ser divididos em dois grandes grupos: métodos de malha fixa [18, 29] e métodos de malha móvel [30, 31, 32].

Nos métodos de malha móvel um conjunto de equações de conservação é aplicado separadamente a cada uma das regiões de fases sólida e líquida; devem ser aplicadas

condições de continuidade da temperatura e do fluxo do calor à interface entre as regiões; a malha computacional deve ser modificada em ambas as fases a cada instante de tempo para rastrear corretamente a localização da interface. Nesses métodos a equação da energia (calor) normalmente é formulada em termos da temperatura.

Nos métodos de malha fixa, por outro lado, o conjunto de equações de conservação é empregado em todo o domínio computacional, ou seja, é usado a mesma equação em ambas as fases sólida e líquida e não são necessários condições de interface.

Neste trabalho utilizou-se os métodos de malha fixa. Destacam-se três tipos de métodos na literatura:

- Método Direto (Método da Capacidade Efetiva);
- Método da Entalpia;
- Método da Fonte de Calor.

No Método Direto ou Método da Capacidade Efetiva, o tratamento da liberação ou incorporação do calor latente é feito diretamente na definição do calor específico c do material [18], o qual é artificialmente aumentado sobre o intervalo em que ocorre mudança de fase. No Método da Entalpia define-se o calor específico em termos da entalpia H do material, que é uma função mais suave do que a do calor específico [29], ou seja, a entalpia é uma função linear por partes e o calor específico é uma função descontínua. Por fim, no Método da Fonte de Calor [26] o problema acima referido é associado à parcela que corresponde a geração de energia interna de calor, também conhecido como *termo fonte de calor*, na equação de condução de calor quando este é levado em consideração em um problema.

Nos métodos de malha fixa, a posição da interface geralmente está em uma localização desconhecida entre os nós do elemento do domínio do problema e a evolução do calor latente é tratada em termos do calor específico dependente da temperatura. Por esta razão é introduzida uma nova variável: a entalpia H , a qual pode ser calculada como a soma do conteúdo do calor sensível e calor latente.

Para um problema isotérmico, ou seja, quando a mudança de fase ocorre em uma temperatura fixa T_m , a entalpia pode ser definida como segue [4]:

$$H = \begin{cases} \int_{T_{ref}}^T c_s(T) dT, & \text{para } T < T_m \\ \int_{T_{ref}}^{T_m} c_s(T) dT + L + \int_{T_m}^T c_l(T) dT, & \text{para } T \geq T_m \end{cases} \quad (3.22)$$

onde T_{ref} é a temperatura de referência [6], T_m é a temperatura de mudança de fase, c_s e c_l são, respectivamente, os calores específicos da fase sólida e líquida e L é o calor latente.

Para o caso onde a mudança de fase do material ocorre em um intervalo de temperaturas $\Delta T = T_l - T_s$, a entalpia pode ser definida por:

$$H = \begin{cases} \int_{T_{ref}}^T c_s(T) dT, & \text{para } T < T_s \\ \int_{T_{ref}}^{T_s} c_s(T) dT + \int_{T_s}^T \left(\frac{dL}{dT} + c_f(T)\right) dT, & \text{para } T_s \leq T \leq T_l \\ \int_{T_{ref}}^{T_s} c_s(T) dT + L + \int_{T_s}^{T_l} c_f(T) dT + \int_{T_l}^T c_l(T) dT, & \text{para } T \geq T_l \end{cases} \quad (3.23)$$

onde T_s e T_l são, respectivamente, as temperaturas *solidus* e *liquidus* e c_f é o calor específico no intervalo de temperaturas $T_s \leq T \leq T_l$.

Com a anterior definição da entalpia e não considerando fontes ou sumidouros de calor, a equação da condução de calor pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\rho \frac{\partial H}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (3.24)$$

Lembrando que o calor específico se relaciona com a entalpia através da definição (2.1) como:

$$c^* = \frac{dH}{dT} \quad (3.25)$$

e ainda que a entalpia é apenas função da temperatura

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{dH}{dT} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.26)$$

a equação (3.24) pode ser escrita na forma mais usual por:

$$\rho c^* \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (3.27)$$

e, dessa forma, pode-se resolver o problema da liberação (ou incorporação) do calor latente pela correta definição do calor específico. Encontram-se na literatura algumas formas de aproximação do calor específico usado na equação (3.27), sendo possível definir o *Método da Capacidade Efetiva* e o *Método da Entalpia* que serão descritos nas seções seguintes.

3.5.1 Método da Capacidade Efetiva

No Método da Capacidade Efetiva, o calor específico pode ser calculado diretamente a partir das equações (3.23). Assim considerando-se que a liberação (ou incorporação) de calor latente ocorre de maneira uniforme ao longo do intervalo de mudança de fase $T_s \leq T \leq T_l$, ou seja

$$\frac{dL}{dT} = \frac{L}{T - T_s},$$

e considerando que o calor específico das fases sólida, líquida e mushy são constantes, o calor específico c^* é dado por:

$$c^* = \begin{cases} c_s, & \text{para } T < T_s \\ c_f + \frac{L}{T_l - T_s}, & \text{para } T_s \leq T \leq T_l \\ c_l, & \text{para } T \geq T_l. \end{cases} \quad (3.28)$$

A Figura 3.1 mostra a variação típica do calor específico c^* e da entalpia H em função da temperatura.

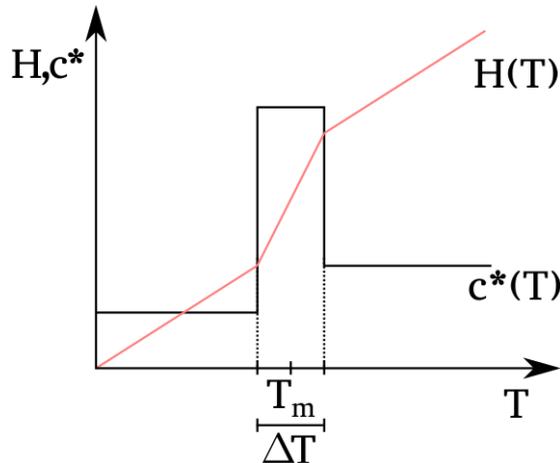


Figura 3.1: Gráfico típico de H e c^* em função da temperatura.

Pode-se ver que este cálculo direto do calor específico necessita manter um intervalo de temperaturas para a evolução do calor latente, caso contrário, a capacidade de calor efetiva c^* torna-se infinito. Este método portanto pode não modelar com precisão uma mudança de fase isotérmica devido a necessidade de um intervalo de temperaturas.

O principal problema no contexto da modelagem numérica é que a informação do calor latente situado na zona de mudança de fase pode estar contido em um estreito intervalo de temperatura, entre pontos de integração ou entre os nós do elemento durante um

único passo de tempo e ser perdido (ver Figura 3.2). Isto impõe restrições no tamanho do passo de tempo e do espaçamento na análise numérica. Também podem ocorrer oscilações numéricas devido ao comportamento do calor específico ao redor do intervalo de mudança de fase se assemelhar à função delta de Dirac [18] e isto dificulta a convergência da solução [5].

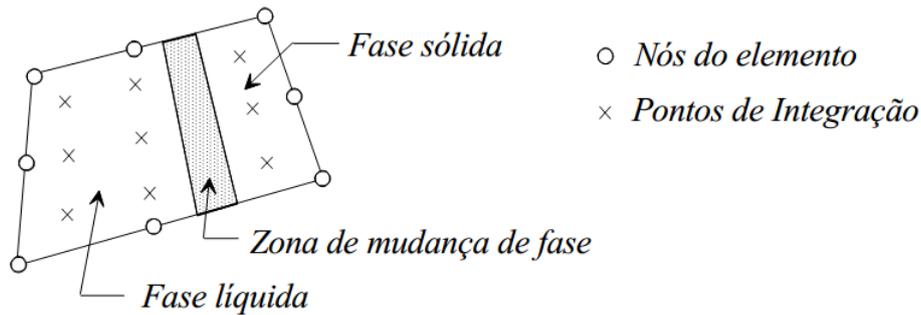


Figura 3.2: Ilustração de um elemento finito com uma possível localização da frente de solidificação (figura adaptada de [4]).

3.5.2 Método da Entalpia

O Método da Entalpia consiste em representar o calor específico c^* em (3.24) de forma mais suave fazendo o uso da entalpia, como pode ser observado na Figura (3.1). Alguns autores [4, 5, 18, 24, 33] afirmam que esse recurso evita erros numéricos que acontecem quando se usa o Método da Capacidade Efetiva acima descrito.

Podem ser encontradas na literatura várias técnicas para a determinação do calor específico, por exemplo em [5]. Assim, interpolando a entalpia no interior dos elementos finitos utilizando as mesmas funções de forma para aproximar a temperatura T :

$$H(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^n H_i(t) \varphi_i(\mathbf{x}), \quad (3.29)$$

na qual φ_i são as funções de forma (as mesmas utilizadas para aproximar a temperatura), H_i os valores nodais da entalpia e n o número de nós do elemento, alguns métodos foram propostos [5] para a obtenção do calor específico, tais como:

$$c^* = \frac{1}{3} \left[\frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial T} + \frac{\partial H}{\partial y} \frac{\partial H}{\partial T} + \frac{\partial H}{\partial z} \frac{\partial H}{\partial T} \right], \quad (3.30)$$

ou a forma de Del Giudice *et al.* [34] dada por

$$c^* = \left[\frac{\left(\frac{\partial H}{\partial x}\right) \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial H}{\partial y}\right) \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right) + \left(\frac{\partial H}{\partial z}\right) \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)}{\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)^2} \right], \quad (3.31)$$

ou a forma de Morgan e Lemmon [29] dada por

$$c^* = \left[\frac{\left(\frac{\partial H}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial H}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial H}{\partial z}\right)^2}{\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)^2} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.32)$$

Nota-se que em partes do domínio em que o campo de temperaturas é uniforme, situação muito frequente no início do processo transitório, nenhum dos métodos acima é aplicável, sendo necessário, nestes casos, recorrer ao cálculo direto do calor específico dado pela equação (3.28). Além disso, considera-se neste trabalho o uso do calor específico dado pela equação (3.32).

3.5.3 Integração descontínua

Aqui será apresentado uma modificação do método da capacidade efetiva com o objetivo de contornar alguns de seus problemas numéricos como o erro cometido durante a integração numérica do termo da matriz de massa que envolve o coeficiente c^* dado pela expressão (3.28), que é uma função descontínua. Antes, um simples experimento que demonstra o uso da quadratura de Gauss em funções do tipo (3.28) será apresentado a fim de motivar o método.

A integração numérica de uma função descontínua similar àquela do coeficiente c^* do método da capacidade efetiva foi analisada com o método de Gauss para diferentes números de pontos. O estudo considerou os mesmos parâmetros de um problema que será apresentado posteriormente (ver Seção 4.2) e utilizou diferentes intervalos de mudança de fase ΔT . Entretanto, aqui não se considerou as contribuições da matriz de massa, apenas a integração de uma função tipo aquela dada pela equação (3.28).

A Tabela 3.1 apresenta o erro relativo cometido na integração de uma função do tipo c^* dada por (3.28) para diferentes números de pontos de integração. Observa-se claramente que em vários casos o erro cometido é inaceitável e em apenas alguns poucos casos para $\Delta T = 3^\circ\text{C}$ o erro é pequeno. Ainda assim, nesse caso se o interesse é em um problema

de mudança de fase isotérmico a escolha de um intervalo de temperatura artificial como $\Delta T = 3^\circ\text{C}$ pode resultar em um distanciamento da solução do problema.

n	erro relativo		
	$\Delta T = 0.5$	$\Delta T = 1$	$\Delta T = 3$
1	0.9336	0.9336	0.9336
2	3.7343	1.4004	0.2334
3	0.9336	0.3631	0.2853
4	0.9336	0.9336	0.2334
5	1.3006	0.1835	0.0985
6	7.5041	0.0916	0.2334
7	0.9336	0.6104	0.0105
8	0.5308	0.3176	0.1898
9	0.2829	0.3253	0.0407

Tabela 3.1: Erro relativo cometido na integração de Gauss com diferentes números de pontos (n) para uma função descontínua.

Tendo em vista a discussão anterior, uma modificação baseada na integração numérica do método da capacidade efetiva será discutida.

Relembra-se que um problema numérico que pode ocorrer quando se usa o calor específico, definido na equação (3.28) é que durante um processo de solidificação/fusão o calor latente liberado/incorporado que está na zona de mudança de fase pode estar situado no interior do elemento entre pontos de integração. Nessa situação a contribuição do elemento para os termos da matriz de massa, que contém o calor específico será perdido, já que como se pode verificar na Figura 3.2, o calor específico nos pontos de integração possui valores correspondentes à fase sólida e a fase líquida, mesmo que no interior do elemento esteja ocorrendo mudança de fase.

Em razão disso, a ideia de usar integração descontínua no método da capacidade efetiva é fazer a separação das regiões sólida, líquida e zona *mushy* no elemento para que a informação do calor latente não seja perdida na região de mudança de fase como mencionado acima.

Neste trabalho, o desenvolvimento da integração descontínua será para um problema de solidificação e refere-se a um domínio unidimensional. Em outros trabalhos diferentes

técnicas para se realizar uma integração numérica descontínua como, por exemplo, em elementos triangulares foram apresentadas [21, 33, 35].

O primeiro passo é dedicado à separação ou identificação das regiões sólida, líquida e/ou *mushy* no elemento através da determinação da posição da interface. Tendo em vista que na região de mudança de fase, onde se encontra a interface, existem as temperaturas T_s , T_m e T_l que são temperatura *solidus*, temperatura de mudança de fase e temperatura *liquidus*, respectivamente, a posição de cada uma dessas temperaturas no elemento é feita da seguinte forma:

$$\xi_s^* = 2 \frac{T_s - T_j}{T_{j+1} - T_j} - 1, \quad x_s^* = \frac{\xi_s^* + 1.0}{2} (x_{j+1} - x_j) + x_j, \quad (3.33)$$

$$\xi_m^* = 2 \frac{T_m - T_j}{T_{j+1} - T_j} - 1, \quad x_m^* = \frac{\xi_m^* + 1.0}{2} (x_{j+1} - x_j) + x_j, \quad (3.34)$$

$$\xi_l^* = 2 \frac{T_l - T_j}{T_{j+1} - T_j} - 1, \quad x_l^* = \frac{\xi_l^* + 1.0}{2} (x_{j+1} - x_j) + x_j. \quad (3.35)$$

onde T_j e T_{j+1} são as temperaturas nos nós da esquerda e direita do elemento; ξ_s^* , ξ_m^* e ξ_l^* são as posições, no sistema de coordenadas do elemento de referência, da temperatura *solidus*, temperatura de mudança de fase e temperatura *liquidus*, respectivamente, enquanto que no sistema de coordenadas globais do elemento as posições são dadas por x_s^* , x_m^* e x_l^* .

As seis possíveis regiões que foram identificadas em um elemento estão registradas na Figura 3.3, a qual representa por S a região sólida, por M a região de mudança de fase (região *mushy*) e por L a região líquida.

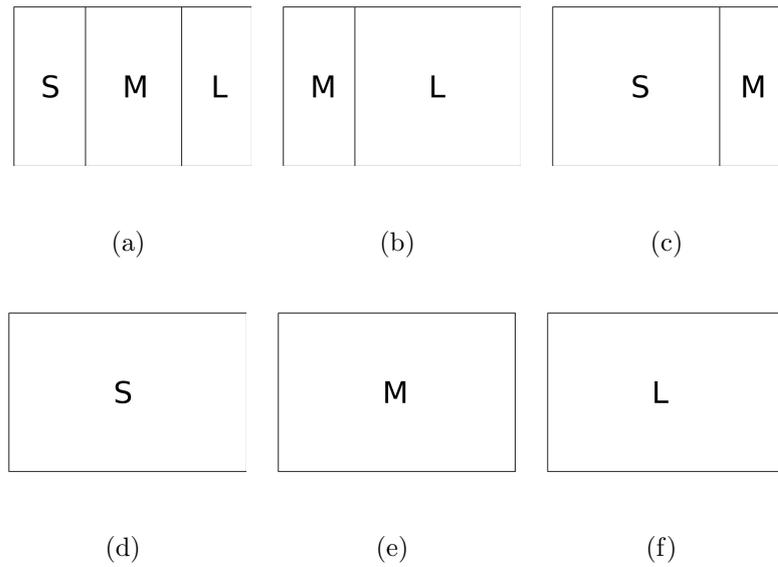


Figura 3.3: Separação de um elemento em várias regiões distintas: (a) elemento com regiões sólida, *mushy* e líquida; (b) elemento com regiões *mushy* e líquida; (c) elemento com regiões sólida e *mushy*; (d) elemento totalmente sólido; (e) elemento totalmente elemento *mushy*; (f) elemento totalmente líquido.

Após identificar cada região no elemento, o segundo passo a ser feito é integrar de forma adequada cada uma delas usando o procedimento da quadratura de Gauss (padrão) e, por fim, somar a contribuição de cada região para que seja feito o cálculo completo da matriz de massa (3.10) do elemento.

Aplicando a técnica da quadratura de Gauss, a integral de qualquer função Z no elemento Ω_e pode ser calculado da seguinte forma:

$$\int_{\Omega_e} Z(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_p} Z(\mathbf{x}(\xi)) \det \mathbf{J} \, d\xi = \sum_{i=1}^w Z_i [\det \mathbf{J}] W_i \quad (3.36)$$

onde w é o número de pontos de Gauss, Z_i e W_i , $i = 1, \dots, w$ são os valores do integrando e os pesos nesses pontos, e $\det \mathbf{J}$ é o determinante do Jacobiano obtido através da relação do sistema de coordenadas de referência em Ω_e para o sistema de coordenadas principal em Ω_p .

4 Resultados

Nesse capítulo os detalhes da implementação e dos experimentos computacionais realizados neste trabalho serão descritos. Os diversos experimentos computacionais foram realizados com o objetivo de se comparar a eficácia e precisão de cada uma das formulações de elementos finitos para o tratamento de problemas de mudança de fase.

4.1 Implementação computacional

Os experimentos numéricos realizados neste trabalho foram baseados em uma implementação computacional dos métodos numéricos descritos anteriormente utilizando a linguagem de programação Python [36] com suporte para computação científica (processamento de vetores e matrizes) através das bibliotecas NumPy [37] e SciPy [38]. Para a solução numérica de sistemas de equações lineares foi utilizada a implementação da fatoração LU disponível na biblioteca NumPy e para encontrar raízes de equações não-lineares, como no cálculo λ definido na equação (2.31) foi utilizada as funções do pacote `optimize` da biblioteca SciPy.

4.2 Problema 1D de solidificação

Este problema considera a solidificação de uma placa semi-infinita, inicialmente na fase líquida com uma temperatura inicial T_0 superior à temperatura de mudança de fase, isto é, $T_0 > T_m$. O domínio de solução para análise da solidificação ocorre em um retângulo com comprimento de 4 metros e de altura 0.05 metros, que foi considerado como um domínio unidimensional finito $\Omega = [0, 4]$, conforme ilustra a Figura 4.1. Nota-se que o elemento finito na direção y possui altura equivalente a 0.05 metros.

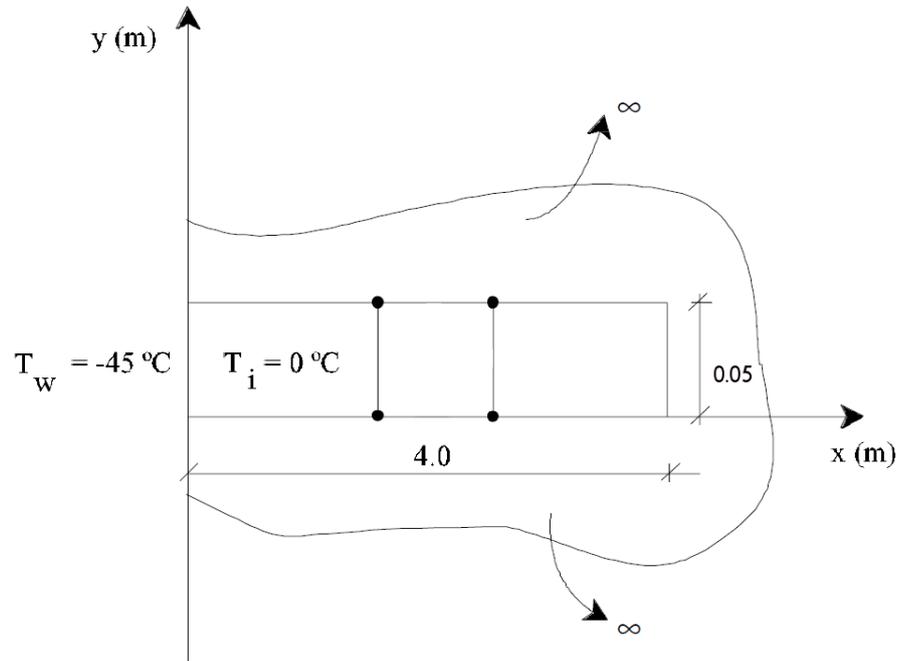


Figura 4.1: Domínio de solução para a análise de solidificação de uma placa semi-infinita. (Figura adaptada de [4])

No instante de tempo inicial a temperatura no extremo esquerdo da placa é reduzida bruscamente e mantida constante em $T_w = -45^\circ\text{C}$ durante toda a simulação. Considera-se também que o coeficiente de condutividade térmica, o calor específico e a massa específica de ambas as fases, líquida e sólida, são iguais e constantes [5], como descrito na Tabela (4.2) a seguir.

Tabela 4.1: Dados do problema de solidificação unidimensional

Dados	Valor	Unidade
Condutividade térmica	$k_s = k_l = 1.08$	$\text{W}/\text{m}^\circ\text{C}$
Massa específica	$\rho_s = \rho_l = 1.0$	kg/m^3
Calor específico	$c_s = c_l = 1.0$	$\text{J}/\text{kg}^\circ\text{C}$
Calor latente	$L = 70.26$	J/kg
Temperatura inicial	$T_0 = 0.0$	$^\circ\text{C}$
Temperatura na fronteira	$T_w = -45$	$^\circ\text{C}$
Temperatura de mudança de fase	$T_m = -1.0$	$^\circ\text{C}$

A solução analítica para esse problema pode ser obtida de acordo com a formulação

descrita anteriormente na Seção 2.4.2. Os estudos aqui realizados utilizaram a solução analítica com $\lambda = 0.506465$ [4] e considerou como referência um ponto localizado em $x = 1$ m.

Experimentos computacionais foram realizados utilizando-se o método de Euler implícito, enquanto que para a solução do sistema de equações não-lineares o método de Newton modificado, como descrito anteriormente, foi utilizado com uma tolerância de 10^{-3} para o critério de parada. Diferentes discretizações do domínio espacial foram consideradas, entretanto, nos experimentos descritos a seguir uma malha computacional de 48 elementos de mesma dimensão, ou seja, $h = 0.083$ m foi utilizada. Os parâmetros tais como o tamanho do passo de tempo Δt e o intervalo de temperatura onde ocorre a mudança de fase ΔT são dados por 0.001 segundos e 0.5°C , respectivamente.

Para esse problema o número de Stefan é dado por

$$Ste = \frac{c(T_m - T_w)}{L} = \frac{1.0(-1.0 - (-45))}{70.26} \simeq 0.63,$$

que como discutido anteriormente, devido à razão entre o calor específico e latente, representa um desafio aos métodos numéricos já que ocorre mudança de fase.

A seguir os resultados obtidos com os diferentes métodos considerados neste trabalho são apresentados.

4.2.1 Capacidade Efetiva

O Método da Capacidade Efetiva (MCE) faz uso do cálculo direto do calor específico e, portanto, é preciso considerar um intervalo de temperatura onde se supõe ocorrer a mudança de fase. Lembrando que esse intervalo de temperaturas não deve ser de grande dimensão para evitar que a simulação numérica se afaste muito do problema de solidificação original, mas também não deve ser pequeno demais para evitar que erros numéricos ocorram.

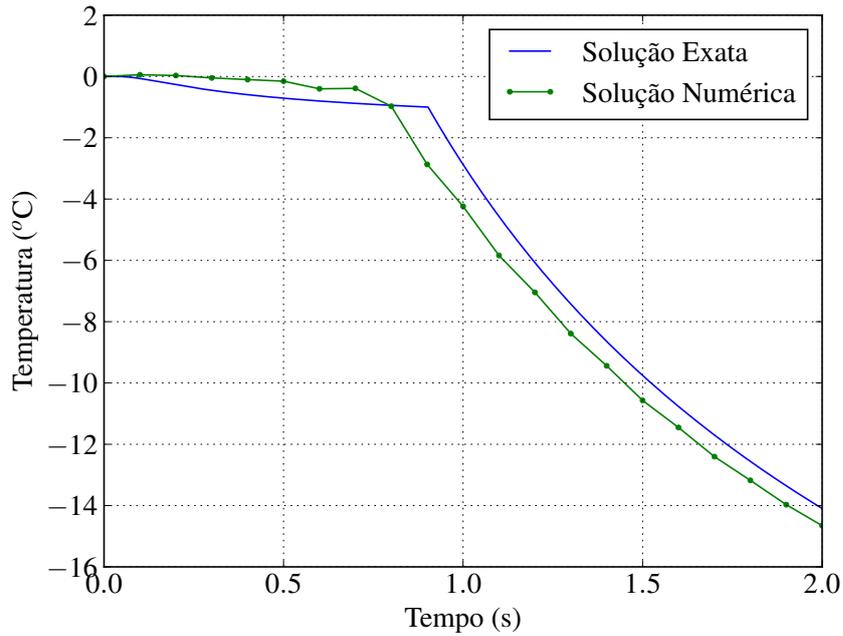


Figura 4.2: Evolução da temperatura com o tempo no ponto $x = 1$ m.

A Figura 4.2 apresenta o resultado obtido no problema de solidificação com o método da capacidade efetiva. Observa-se que a evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m não corresponde satisfatoriamente com a solução exata. Pode-se perceber que no tempo $t = 0.7$ s aproximadamente a mudança de fase na solução numérica ocorre antecipadamente em relação à solução analítica, que ocorre em $t = 0.9$ segundos, aproximadamente. Ressalta-se que embora diferentes intervalos de mudança de fase ΔT , diferentes passos de tempo e espaçamentos, ou diferentes números de pontos de integração de Gauss tenham sido testados, nenhuma combinação obteve uma solução razoavelmente satisfatória neste caso.

Esse comportamento do MCE nesse problema teste foi reportado em [5] e também foi observado neste trabalho. A grande dificuldade do método em encontrar uma solução apropriada neste problema de mudança de fase isotérmico é devido ao uso do intervalo de temperatura de mudança de fase artificial. Do ponto de vista numérico, a informação sobre o calor latente pode estar contida em uma pequena faixa de temperaturas e a mesma pode não ser capturada corretamente se a mudança de temperatura em um passo de tempo passar pelo intervalo de mudança de fase [18].

A seguir são apresentados os resultados com dois métodos que contornam os problemas enfrentados pelo MCE na solução deste problema.

4.2.2 Capacidade Efetiva com Integração Descontínua

A Figura 4.3 apresenta a evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m quando o método da capacidade efetiva é utilizado fazendo uso da integração descontínua discutida na Seção 3.5.3.

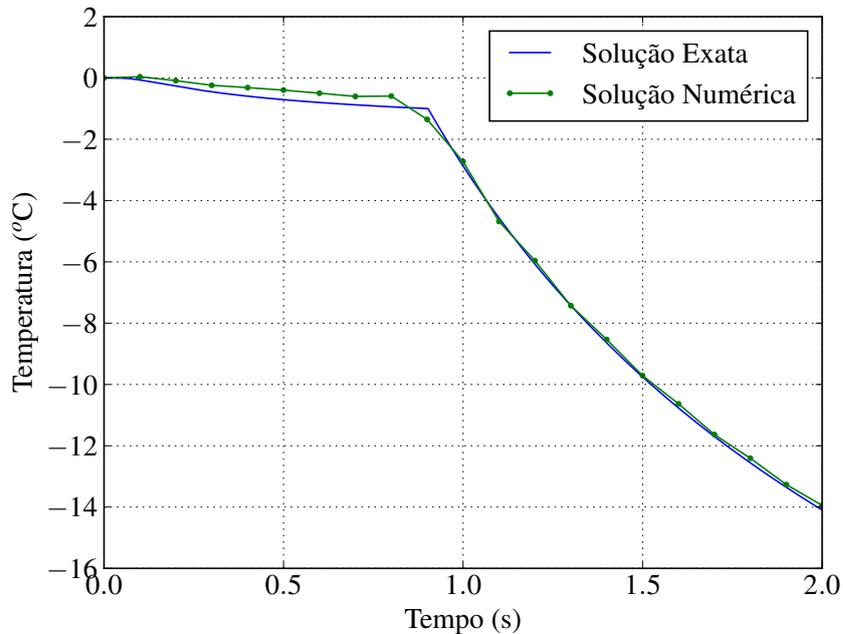


Figura 4.3: Evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m usando o método da capacidade efetiva com integração descontínua.

Observa-se na Figura (4.3) que aqui há uma boa concordância entre o resultado obtido pelo código implementado e a solução exata dada por [4]. Ressalta-se que, embora a mesma formulação para o tratamento da mudança de fase tenha sido utilizada (capacidade efetiva) no presente caso e no anterior, a única diferença entre eles foi o uso da técnica de integração descontínua que separa o elemento finito em diferentes fases para realizar a integração numérica. Portanto, fica claro a dificuldade da integração numérica adotada em integrar corretamente a função descontínua associada ao método da capacidade efetiva (ver Figura 3.1).

4.2.3 Entalpia

Como mencionado anteriormente, existem vários recursos na determinação do calor específico usando a entalpia, a qual é uma função mais suave do que o calor específico. Em [5] são sugeridas algumas aproximações para o termo $c^* = \frac{dH}{dT}$. Neste trabalho

considerou-se apenas a representação dada pela equação (3.32).

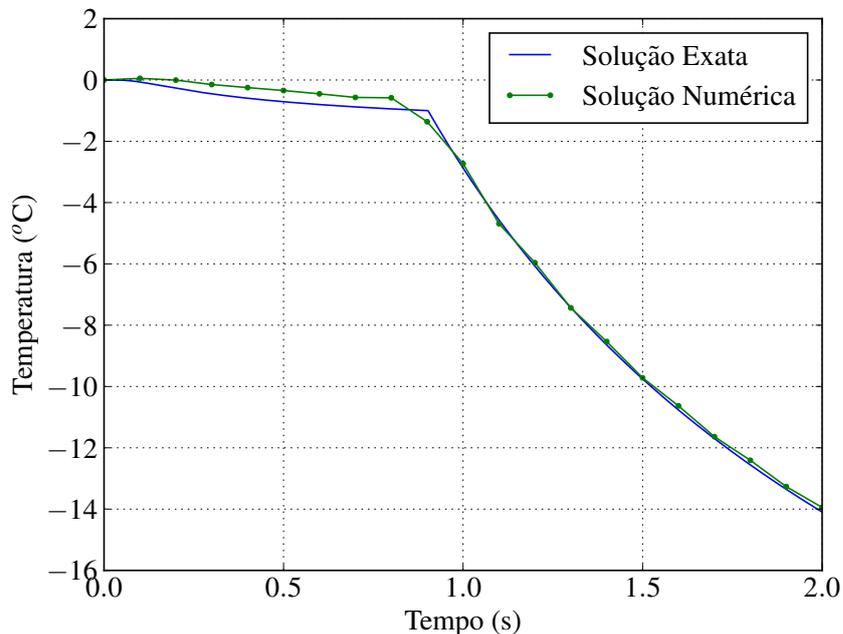


Figura 4.4: Evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m usando o método da entalpia com a aproximação de Morgan *et al* [5].

Pode-se observar que o método da entalpia, assim como o método da capacidade efetiva com uso de integração descontínua obtém resultados satisfatórios que estão em boa concordância com a solução exata do problema.

Nesse caso, como a entalpia é uma função mais suave (linear por partes, ver Figura 3.1) do que o calor específico direto (usado no método da capacidade efetiva), o resultado da integração numérica é melhor e, portanto, a aproximação numérica também.

4.2.4 Frente de solidificação e erro numérico

Nas seções anteriores foram apresentados o histórico de temperaturas ao longo do tempo para um ponto fixo do domínio ($x = 1$ m) utilizando os métodos da entalpia e da capacidade efetiva. Nesta seção também será apresentado o histórico de temperaturas ao longo de tempo em $x = 1$ m juntamente com outras visões da solução do problema de solidificação unidimensional tais como a distribuição da temperatura no tempo final $t = 2$ segundos e a evolução da frente de solidificação. Em seguida será ilustrado o erro relativo para uma avaliação geral da precisão do método utilizado nesse problema. A precisão é

quantificada pelo erro dado da seguinte forma:

$$Erro = \frac{\|T_n - T_a\|}{\|T_a\|} \quad (4.1)$$

onde T_n e T_a são as soluções numéricas e analíticas, respectivamente e $\|\cdot\|$ a norma euclidiana.

A Figura 4.5 apresenta diferentes visões da solução do problema de solidificação unidimensional e as respectivas aproximações numéricas obtidas para o mesmo utilizando o método da capacidade efetiva com o uso de integração descontínua.

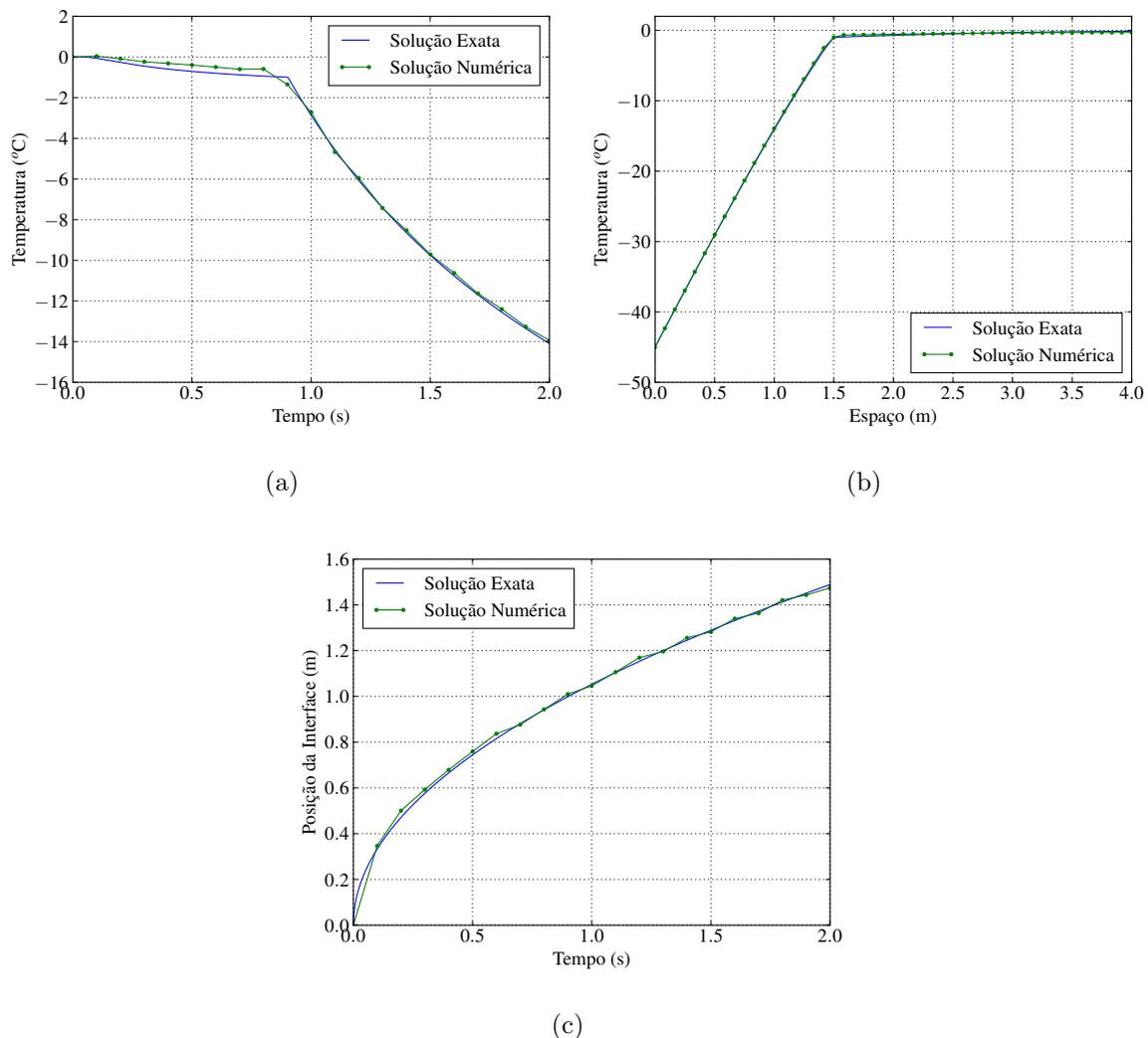


Figura 4.5: Comparações da solução analítica e da solução numérica pelo método dos elementos finitos usando a formulação da capacidade efetiva com integração descontínua. (a) evolução da temperatura para o ponto $x = 1$ m; (b) distribuição de temperatura no tempo $t = 2$ s; (c) evolução da frente de solidificação ao longo do tempo.

Nota-se que para uma discretização particular ($h = 0.083$ m, que corresponde a

uma malha de 48 elementos ao longo de x , $\Delta t = 0.001$ s e $\Delta T = 0.5^\circ\text{C}$) o modelo numérico aproxima de forma satisfatória a resposta exata do problema unidimensional de solidificação capturando detalhes importantes da solução. A Figura 4.5 mostra o histórico de temperatura no ponto $x = 1$ m, a temperatura em $t = 2$ segundos assim como para a evolução da frente de solidificação ao longo do tempo.

Em seguida, utilizando as métricas para o cálculo do erro entre as soluções analítica e numérica, definidas na equação (4.1), o erro relativo em cada um dos gráficos anteriores foi calculado para diferentes passos de tempo, sendo que os seguintes valores foram utilizados: $\Delta t = \{0.0005, 0.001, 0.0025, 0.004, 0.005\}$ segundos.

A Figura 4.6 mostra os erros para a evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m no gráfico 4.6(a), a distribuição de temperatura no tempo $t = 2$ s no gráfico 4.6(b) e a evolução da frente de solidificação ao longo do tempo no gráfico 4.6(c).

Fica evidente nessa figura que o tamanho do passo de tempo influencia de forma significativa no valor do erro, ou seja, em geral quanto menor é Δt , menor será o erro relativo.

Percebe-se que para a maioria das discretizações analisadas nesse estudo, Figura 4.6, o erro é menor do que 5%. Além disso, mostra-se que os erros obtidos para as Figuras 4.5(b) e 4.5(c) tiveram valores menores do que 2% e valor menor do que 3% na Figura 4.5(a).

Fachinotti *et al.* [20] simularam em seu trabalho um problema de solidificação unidimensional similar com o apresentado acima, porém utilizando uma malha com poucos elementos triangulares e obtiveram valores pequenos para o erro relativo para diferentes discretizações, a partir de um determinado tamanho de passo de tempo, exceto para a malha mais grosseira. Em seu trabalho os erros obtidos para diferentes discretizações tiveram valores abaixo de 5% na maioria dos casos. Além disso, observa-se que os erros relacionados com a evolução da temperatura em $x = 1$ m apresentam valores maiores do que na distribuição da temperatura no tempo final e na evolução da frente de solidificação, com resultados qualitativamente semelhantes observados nas Figuras 4.6(a), 4.6(b) e 4.6(c) deste trabalho.

Analisando a precisão dos resultados dados pela Figura 4.6 observa-se boa concordância com os resultados reportados por Fachinotti *et al.* [20] mesmo que tenham sido usados métodos e malhas diferentes na resolução do problema. Foram utilizados nos resultados obtidos nesta seção elementos quadriláteros idênticos, esquema de Euler

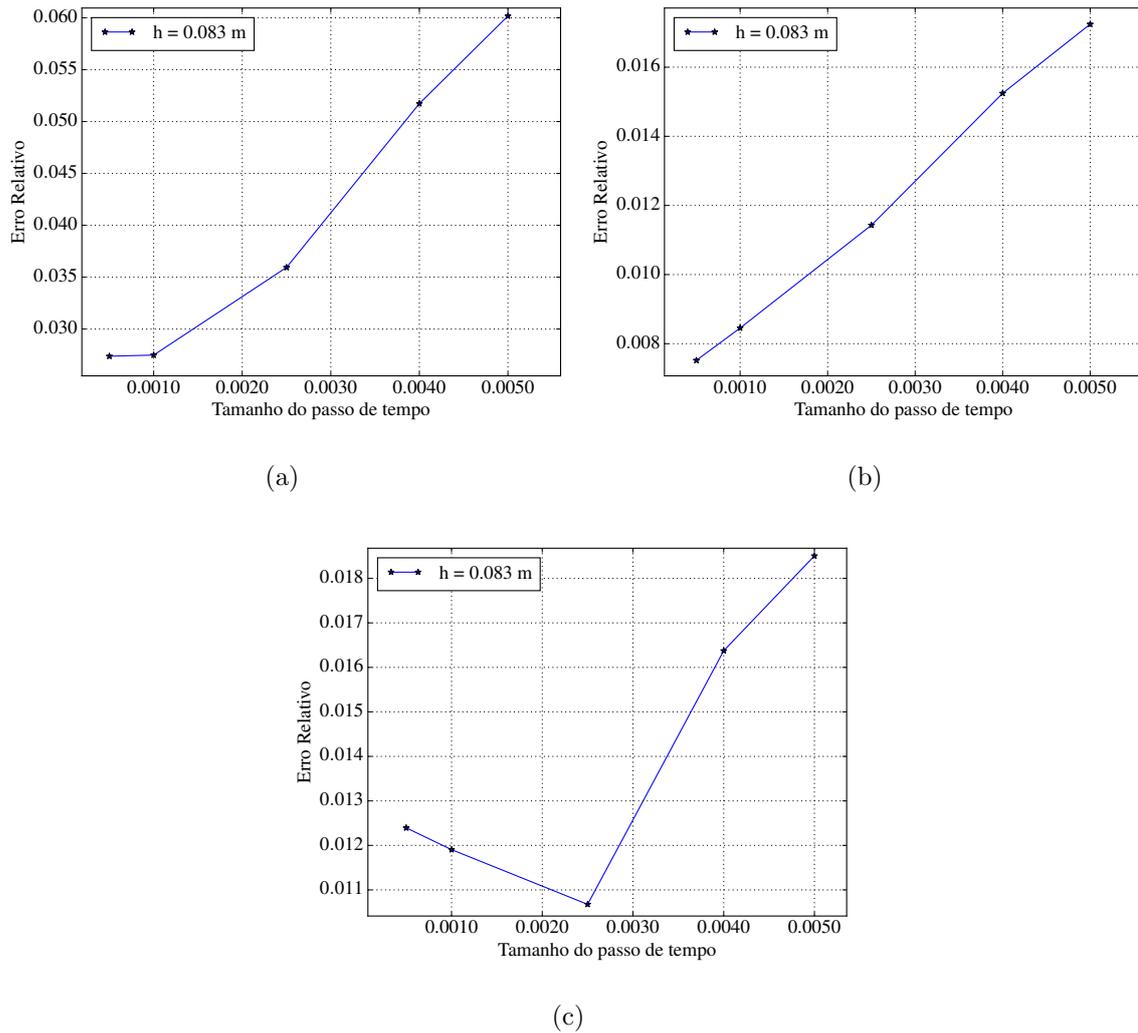


Figura 4.6: Precisão do método da capacidade efetiva com uso de integração descontínua em termos da discretização do tempo. (a) evolução da temperatura em $x = 1$ m; (b) distribuição da temperatura em $t = 2$ s; (c) evolução da frente de solidificação.

implícito para discretização temporal, método de Newton para resolver o sistema não-linear e uma formulação do método da capacidade efetiva com uso da integração descontínua. Por outro lado, os resultados de Fachinotti *et al.* [20] foram obtidos utilizando elementos triangulares, esquema de Euler Implícito na discretização do tempo, método de Newton original e uma formulação diferente para o método da entalpia daquela usada neste trabalho.

4.2.5 Efeito do intervalo de mudança de fase

Afim de analisar a influência do intervalo de temperatura onde ocorre mudança de fase é apresentado nesta seção os resultados obtidos usando o método da entalpia e o método

da capacidade efetiva com integração descontínua para diferentes ΔT . Foram usados um intervalo de tempo fixo $\Delta t = 0.001$ s e malha de elementos finitos quadrilaterais com tamanho $h = 0.021$ m. Em seguida são apresentados os erros obtidos para cada ΔT em forma de tabela.

Nas Figuras 4.7 e 4.8 estão ilustrados o efeito do intervalo de temperatura ΔT para o método da entalpia e para o método da capacidade efetiva com o uso da integração descontínua respectivamente. Observa-se um comportamento semelhante entre os dois métodos aqui utilizados.

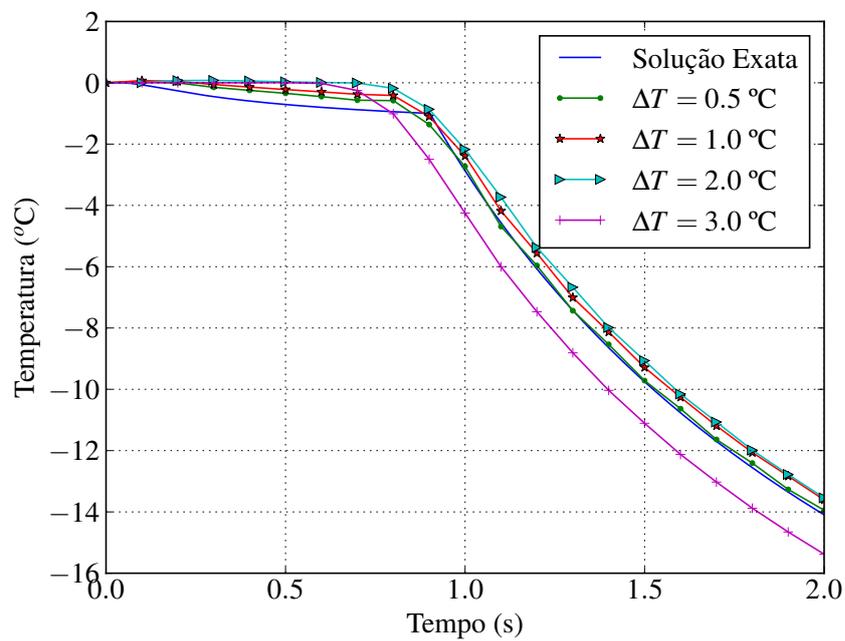


Figura 4.7: Evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m usando o método da entalpia.

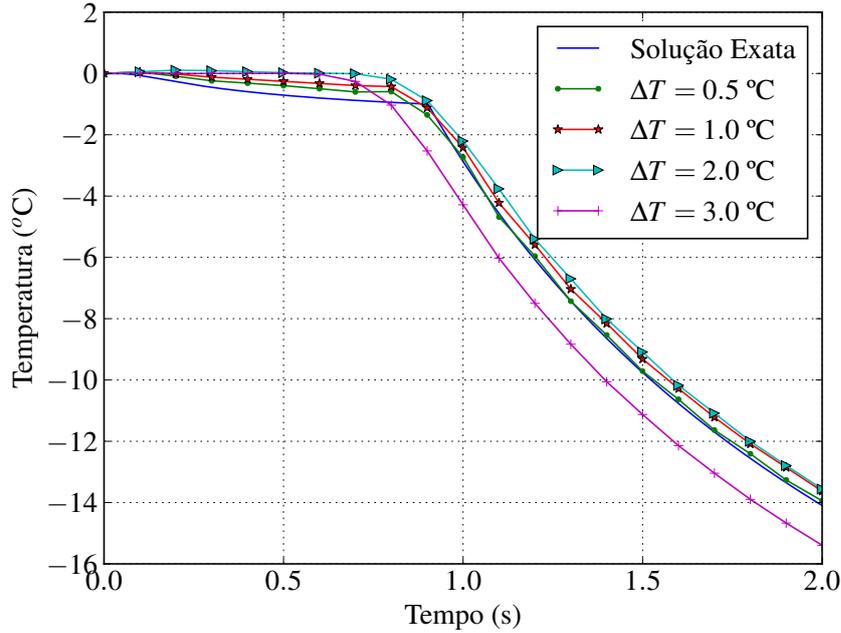


Figura 4.8: Evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m usando o método da capacidade efetiva com integração descontínua.

Na Tabela 4.2 são apresentados os erros relativos para os dois métodos utilizando diferentes intervalos de temperaturas ΔT . Observa-se que em ambos os métodos (ME e MCE ID) o erro relativo fica em torno de 5% para $\Delta T = 0.25^\circ\text{C}$, $\Delta T = 0.5^\circ\text{C}$ e $\Delta T = 1^\circ\text{C}$. Nos demais casos, para $\Delta T = 2^\circ\text{C}$ e $\Delta T = 3^\circ\text{C}$ o erro fica maior do que 5%. Nesse caso, em particular para $\Delta T = 3^\circ\text{C}$ observa-se um erro inaceitável para esse problema, tanto pelo ME quanto pelo MCE ID, conforme mostram as Figuras 4.7 e 4.8. Destaca-se que os menores erros cometidos neste experimento foram obtidos usando-se o método MCE ID e, em particular, para $\Delta T = 0.5^\circ\text{C}$ o erro cometido foi de 2.7%.

Tabela 4.2: Erro Relativo para diferentes intervalos de temperatura utilizando o método da entalpia (ME) e o método da capacidade efetiva com uso da integração descontínua (MCE ID).

Método	ΔT ($^\circ\text{C}$)				
	0.25	0.5	1.0	2.0	3.0
ME	3.837×10^{-2}	3.110×10^{-2}	6.155×10^{-2}	8.750×10^{-2}	1.509×10^{-1}
MCE ID	2.975×10^{-2}	2.749×10^{-2}	5.773×10^{-2}	8.584×10^{-2}	1.531×10^{-1}

Nota-se, entretanto, que a precisão dos métodos diminui à medida que o intervalo de

mudança de fase ΔT diminui, como pode se observar pelos erros entre $\Delta T = 0.5^\circ\text{C}$ e $\Delta T = 0.25^\circ\text{C}$. Valores ainda menores para ΔT foram estudados, porém a qualidade da aproximação piora, assim como foi observado por Dalhuijsen *et al.* [18].

Na figura 4.9 pode-se observar o comportamento mencionado acima apresentando-se os erros relativos obtidos para diferentes intervalo de temperatura. A curva azul “Erro temperatura”, representa os erros cometidos para a temperatura ao longo do tempo em $x = 1$, a curva verde “Erro histórico” representa os erros para a temperatura no espaço e por fim, a curva vermelha “Erro frente” representa o erro para a frente de solidificação ao longo do tempo.

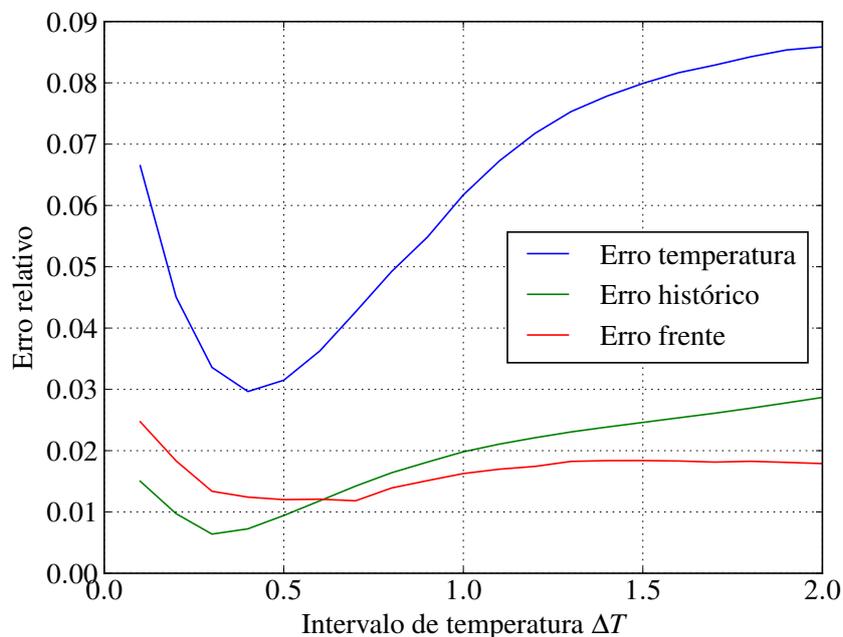


Figura 4.9: Erro relativo para diferentes intervalos de temperatura.

Observam-se a medida que o intervalo de temperatura é reduzido, os erros também são reduzidos. Entretanto, para intervalo de temperatura abaixo de 0.4°C aproximadamente, os erros começam a aumentar.

4.3 Problema 1D de fusão

Este problema considera a fusão de uma placa semi-infinita, inicialmente na fase sólida com uma temperatura inicial T_0 inferior à temperatura de mudança de fase, isto é, $T_0 < T_m$. Será considerado o mesmo domínio de solução do problema de solidificação visto

em 4.2. No instante de tempo inicial a temperatura na extremidade esquerda da placa é aumentada bruscamente e mantida constante em $T_w = 45^\circ\text{C}$. As propriedades térmicas do material são consideradas constantes e iguais para fases líquida e sólida e são descritas na Tabela 4.3 a seguir.

Tabela 4.3: Dados do problema de fusão unidimensional

Dados	Valor	Unidade
Condutividade térmica	$k_s = k_l = 1.08$	$W/m^\circ C$
Massa específica	$\rho_s = \rho_l = 1.0$	kg/m^3
Calor específico	$c_s = c_l = 1.0$	$J/kg^\circ C$
Calor latente	$L = 70.26$	J/kg
Temperatura inicial	$T_0 = 0.0$	$^\circ C$
Temperatura na fronteira	$T_w = 45$	$^\circ C$
Temperatura de mudança de fase	$T_m = 1.0$	$^\circ C$

A solução analítica para esse problema é calculada de acordo com a formulação dada por [5] e corresponde a um ponto localizado em $x = 1$ m com $\lambda = 0.506465$ [4].

Neste experimento utilizou-se uma malha de 48 elementos quadrilaterais de comprimento $h = 0.083$ m, intervalo de mudança de fase $\Delta T = 0.5$ $^\circ\text{C}$, tamanho do passo de tempo $\Delta t = 0.001$ s e tolerância no método de Newton de 10^{-3} .

Nas Figuras 4.10 e 4.11 são apresentados os resultados obtidos pelos métodos da capacidade efetiva (sem o uso da integração descontínua) e entalpia, respectivamente.

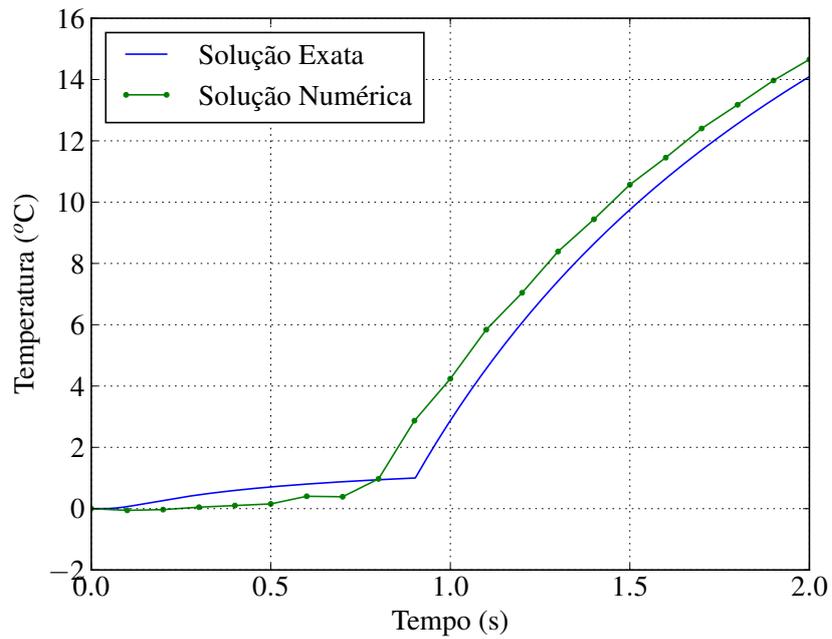


Figura 4.10: Evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m utilizando o método da capacidade efetiva.

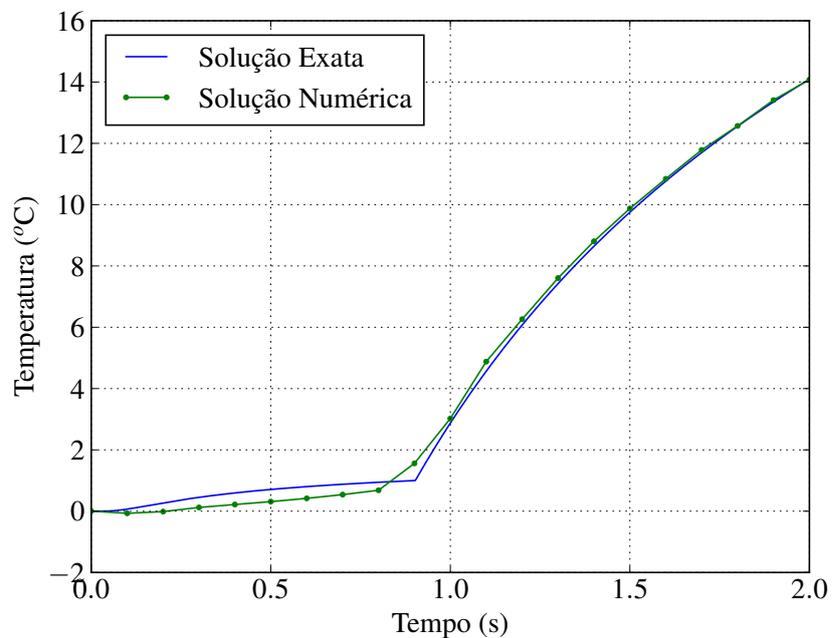


Figura 4.11: Evolução da temperatura no ponto $x = 1$ m utilizando o método da entalpia.

Como presumido, devido ao resultado obtido na Seção 4.2.1, o método da capacidade efetiva não se aproxima de forma satisfatória da solução exata do problema unidimensional

de fusão da mesma maneira que o método da entalpia.

4.4 Problema 2D de solidificação

Este último problema consiste na solução de um problema de solidificação usando elementos bidimensionais de uma região quadrada medindo 4 m cada lado. Inicialmente, a região considerada está na fase líquida com uma temperatura T_0 superior à temperatura de mudança de fase T_m . No instante de tempo inicial a temperatura nas faces $x = 0$ e $y = 0$ é reduzida e mantida constante em $T_w = -45$ °C. Consideram-se constantes as propriedades térmicas do material e iguais para as fases líquida e sólida, conforme mostrado na Tabela 4.4.

Tabela 4.4: Dados do problema de solidificação bidimensional

Dados	Valor	Unidade
Condutividade térmica	$k_s = k_l = 1.08$	$W/m^\circ C$
Massa específica	$\rho_s = \rho_l = 1.0$	kg/m^3
Calor específico	$c_s = c_l = 1.0$	$J/kg^\circ C$
Calor latente	$L = 70.26$	J/kg
Temperatura inicial	$T_0 = 0.0$	$^\circ C$
Temperatura na fronteira	$T_w = -45$	$^\circ C$
Temperatura de mudança de fase	$T_m = -0.15$	$^\circ C$

Os resultados para a variação da temperatura com o tempo nos pontos $x = 1, y = 1$ e $x = 2, y = 1$, usando $\Delta t = 0.001$ segundos e $\Delta T = 1.0^\circ C$ são comparados com os resultados encontrados em [29].

Mostra-se na Figura 4.12 a discretização de elementos finitos usada no problema em conjunto com a da distribuição de temperaturas em diferentes instantes de tempo. Destaca-se nas figuras os pontos localizados em $(1, 1)$ e $(2, 1)$, os quais foram utilizados na obtenção e comparação dos resultados.

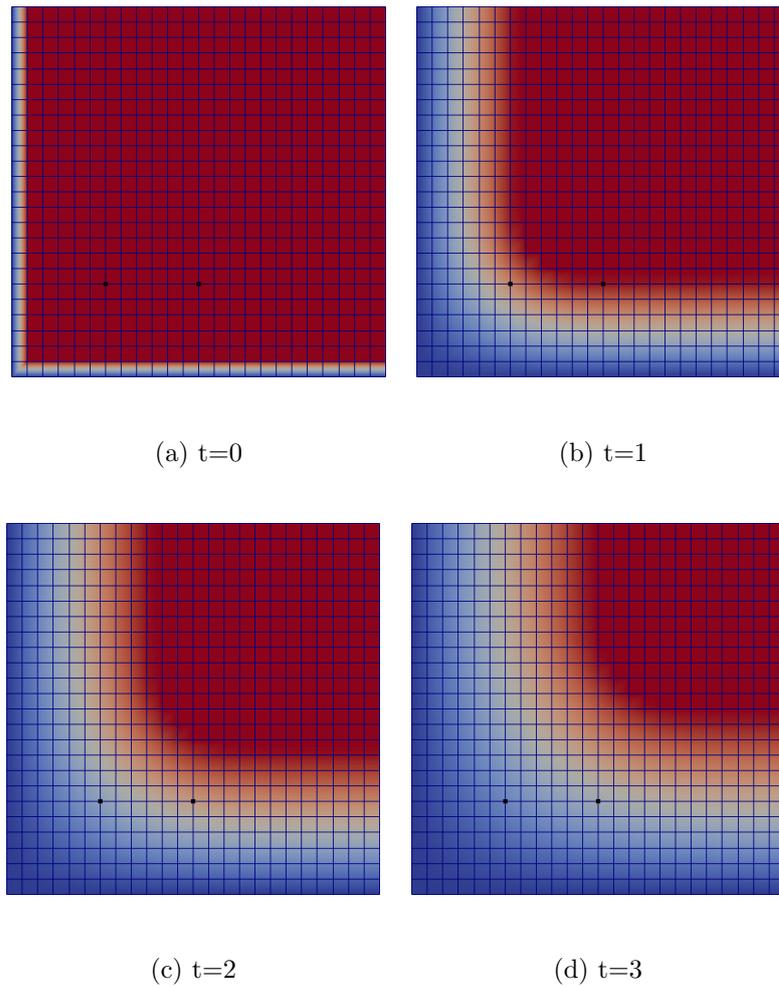


Figura 4.12: Evolução da distribuição de temperatura em diferentes instantes de tempo.

Nas Figuras 4.13 e 4.14 apresenta-se a evolução do campo de temperatura nos dois pontos distintos utilizando os métodos da entalpia (ME) e da capacidade efetiva (MCE), respectivamente. Observa-se, de forma geral, uma boa concordância dos resultados aqui relatados com aqueles apresentados por Morgan *et al.* em [29]. Ressalta-se que Morgan *et al.* [29] utilizaram o método explícito de Lees [25] para a discretização temporal e elementos finitos de 8 nós para a discretização espacial. Além disso, a malha utilizada em [29] é mais refinada na região próxima do contorno onde a condição de contorno é aplicada.

Finalmente, ressalta-se que, em particular, neste problema o MCE não apresentou um resultado ruim como nos problemas relatados anteriormente.

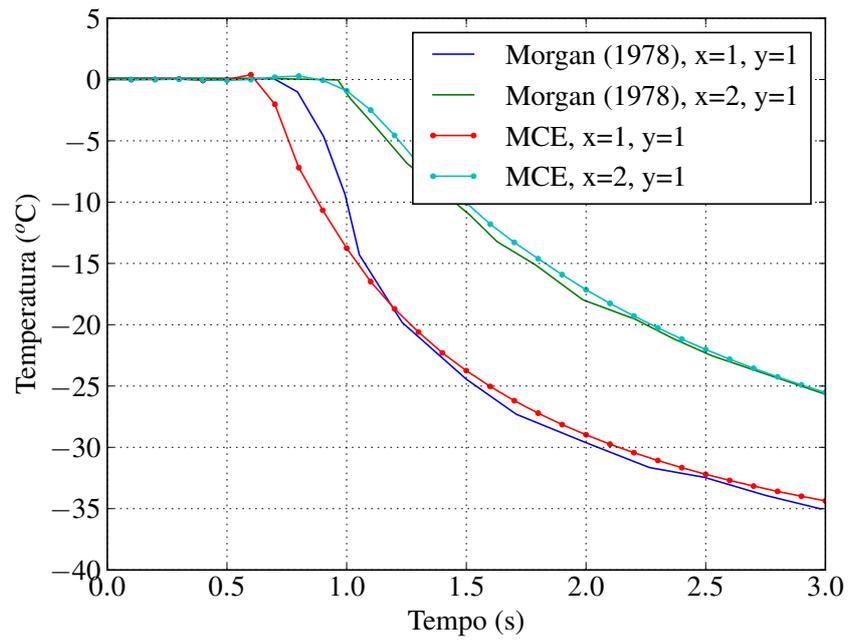


Figura 4.13: Simulação usando o Método da Capacidade Efetiva (MCE) sem o uso da integração descontínua.

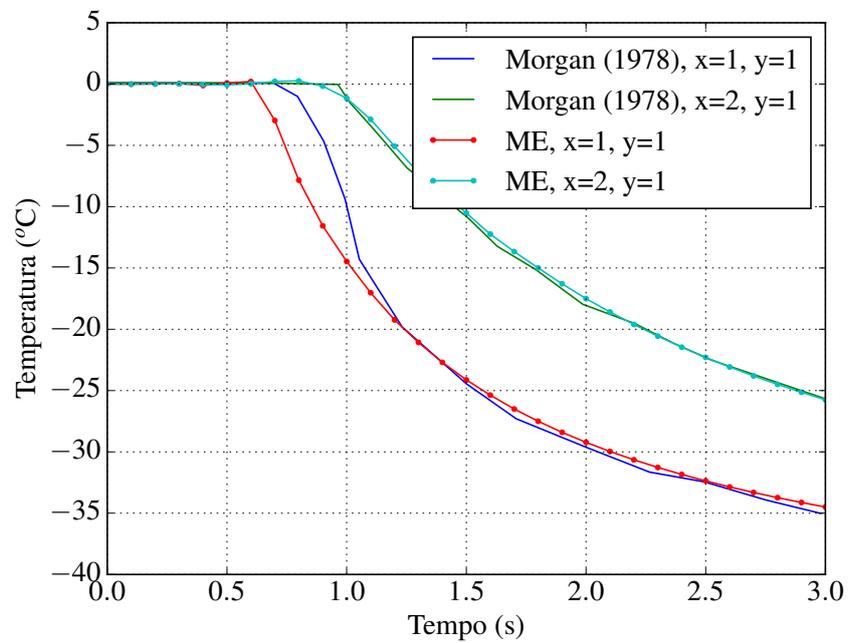


Figura 4.14: Simulação usando o Método da Entalpia (ME).

5 Conclusões

Este capítulo apresenta as conclusões finais do trabalho desenvolvido, algumas limitações e possibilidades de trabalhos futuros.

5.1 Conclusões

Neste trabalho abordou-se a modelagem matemática de problemas de transferência de calor que consideram a mudança de fase do material. Esta é uma classe de problemas que possui diversas aplicações importantes em várias áreas da ciência e engenharia, tais como, por exemplo, na metalurgia entre outras.

A classe de problemas de mudança de fase mais simples é conhecida como problemas de Stefan na qual se considera apenas a condução como principal mecanismo de transferência de calor e possui solução analítica apenas para alguns casos em que se utiliza geometria unidimensional. Também podem ser formulados em duas ou três dimensões, sendo que nestes casos, tratamentos numéricos devem ser feitos devido à inexistência de soluções analíticas. Neste trabalho apresentou-se os modelos matemáticos do problema de Stefan de uma e de duas fases e suas soluções analíticas.

A modelagem computacional abordada neste trabalho para descrever o processo de transferência de calor de um material sujeito à mudança de fase, levando em consideração a transferência de calor apenas por condução, foi tratada por meio do método dos elementos finitos. O método dos elementos finitos consiste, essencialmente, na integração de uma equação diferencial em elementos finitos para se escrever uma equação algébrica discreta equivalente à equação diferencial original. Empregou-se o esquema de Euler implícito na discretização temporal e utilizou-se o método de Newton na resolução de um sistema não-linear.

As diferentes formulações de elementos finitos abordadas neste trabalho para o problema de mudança de fase foram do tipo baseados em malha fixa, tais como o método da entalpia, o método da capacidade efetiva e uma modificação do método da capacidade efetiva que consiste na técnica de integração descontínua adaptada apenas para problemas unidimensionais. Em um problema unidimensional foi observado que a solução numérica

do método da capacidade efetiva apresentou dificuldades de convergir, enquanto que nos métodos da entalpia e da capacidade efetiva com o uso da integração descontínua obtiveram equivalência de resultados e satisfatórios com dados da literatura. Também em um problema bidimensional, os métodos da entalpia e da capacidade efetiva com integração descontínua reproduziram resultados satisfatórios com soluções encontradas na literatura.

Assim, pode-se concluir nesse trabalho que focou, principalmente, nos métodos da entalpia e da capacidade efetiva, que a integração numérica realizada em um elemento é de grande importância para a precisão da aproximação numérica. Quando o MCE foi utilizado em sua forma clássica, em alguns problemas a solução encontrada não foi satisfatória, enquanto que a sua versão proposta com uso da integração descontínua foi capaz de obter resultados satisfatórios próximos do método da entalpia. Ressalta-se que a estratégia do ME é exatamente suavizar a função descontínua do coeficiente usado no MCE e através dessa suavização é possível obter melhores resultados na integração numérica que, conseqüentemente, resultam em uma melhor aproximação.

5.2 Trabalhos Futuros

Como previsões de trabalhos futuros nesta linha de pesquisa, pode-se estender a implementação do método da capacidade efetiva com o uso da integração descontínua para outras dimensões, isto é, adaptá-la para elementos finitos quadrilaterais, triangulares, tetraedros e hexaedros.

Também espera-se estudar a inserção do termo convectivo ao problema de mudança de fase, uma vez que na maioria dos fenômenos relacionados à transferência de calor a existência de movimento e transporte de massa no material estão presentes no material em estado líquido, tornando-se o modelo matemático mais realista [3].

Considerando todas essas possibilidades de melhorias, outra possibilidade seria se estudar problemas com geometrias mais complexas que requeiram o emprego de malhas não estruturadas para uma boa cobertura do domínio e, conseqüentemente, a aplicação em problemas de interesse da indústria e engenharia.

REFERÊNCIAS

- [1] FOLEY, A., “Optimizing the Continuous Casting Process with Simulation”, 2017.
- [2] JEDEMA, F., “Phase-change materials: Designing optical media of the future”, *Nature materials*, v. 6, n. 2, pp. 90–91, 2007.
- [3] ODONE, M. W. N., TOLEDO, E. M., BARRA, L. P. S., “Estudos numéricos na solução de problemas de mudança de fase”, *Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF)*, 2014.
- [4] REAL, P. V., OLIVEIRA, C. M., “Modelação numérica de problemas térmicos envolvendo mudança de fase”, *Revista internacional de métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería*, v. 19, n. 2, pp. 171–196, 2003.
- [5] HUANG, H.-C., USMANI, A. S., *Finite element analysis for heat transfer: theory and software*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [6] ALEXIADES, V., *Mathematical modeling of melting and freezing processes*. CRC Press, 1992.
- [7] JIJI, L. M., *Heat Conduction: Third Edition*. 3rd ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009.
- [8] LARSON, M. G., BENGZON, F., *The finite element method: Theory, implementation, and applications*. v. 10. Springer Science & Business Media, 2013.
- [9] KÜRSCHNER, P., MÄKI-MARTTUNEN, T., VESTERGAARD, S., WANDL, S., KVAMSDAL, T., “Modelling and Simulation of Ice/Snow Melting”, *The 22nd ECMI Modelling Week 2008 in Eindhoven*, 2008.
- [10] FARID, M. M. ., *Mathematical Modeling of Food Processing*. CRC Press, 2010.
- [11] CHEN, Q., JIANG, Y., YAN, J., QIN, M., “Progress in modeling of fluid flows in crystal growth processes”, *Progress in Natural Science*, v. 18, n. 12, pp. 1465–1473, 2008.

- [12] SMITH, T. J., *Modelling the Flow and Solidification of Metals*. Martinus Nijhoff Publishers, 1987.
- [13] SEDEH, M. M., KHODADADI, J., “Thermal conductivity improvement of phase change materials/graphite foam composites”, *Carbon*, v. 60, pp. 117–128, 2013.
- [14] BRUSCHE, J. H., SEGAL, A., VUIK, C., URBACH, H. P., “A comparison of an enthalpy and a temperature method for melting problems on composite domains”, *European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 2006*, 2006.
- [15] REAL, V., FARIA, P. J. D. M. M., OTHERS, “Modelação por elementos finitos do comportamento térmico e termo-elástico de sólidos sujeitos a elevados gradientes térmicos”, 2012.
- [16] HU, H., ARGYROPOULOS, S. A., “Mathematical modelling of solidification and melting: a review”, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, v. 4, n. 4, pp. 371, 1996.
- [17] THOMAS, B., SAMARASEKERA, I., BRIMACOMBE, J., “Comparison of numerical modeling techniques for complex, two-dimensional, transient heat-conduction problems”, *Metallurgical and Materials Transactions B*, v. 15, n. 2, pp. 307–318, 1984.
- [18] DALHUIJSEN, A., SEGAL, A., “Comparison of finite element techniques for solidification problems”, *International journal for numerical methods in engineering*, v. 23, n. 10, pp. 1807–1829, 1986.
- [19] CELENTANO, D., OÑATE, E., OLLER, S., “A temperature-based formulation for finite element analysis of generalized phase-change problems”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 37, pp. 3441–3465, 1994.
- [20] FACHINOTTI, V. D., CARDONA, A., HUESPE, A. E., “A fast convergent and accurate temperature model for phase-change heat conduction”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 44, pp. 1863–1884, 1999.

- [21] IDELSOHN, S. R., STORTI, M. A., CRIVELLI, L. A., “Numerical method in phase-change problems”, *Archives of Computational Methods in Engineering*, v. 1, pp. 49–74, 1994.
- [22] 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.
- [23] ODONE, M. W. N., BARRA, L. P. D. S., M., T. E., “Um Estudo sobre a Influência dos Fatores de Relaxação na Convergência da Solução de Problemas Incompressíveis”, *Mecánica Computacional*, v. XXXIV, pp. 1869, 2016.
- [24] LEWIS, R., ROBERTS, P., “Finite element simulation of solidification problems”, *Applied Scientific Research*, v. 44, n. 1-2, pp. 61–92, 1987.
- [25] LEES, M., “A linear three-level difference scheme for quasilinear parabolic equations”, *Mathematics of Computation*, v. 20, n. 96, pp. 516–522, 1966.
- [26] ROLPH, W. D., BATHE, K.-J., “An efficient algorithm for analysis of nonlinear heat transfer with phase changes”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 18, n. 1, pp. 119–134, 1982.
- [27] NALLATHAMBI, A. K., SPECHT, E., BERTRAM, A., “Computational aspects of temperature-based finite element technique for the phase-change heat conduction problem”, *Computational Materials Science*, 2009.
- [28] KNOLL, D., KOTHE, D., LALLY, B., “A new nonlinear solution method for phase-change problems”, *Numerical Heat Transfer: Part B: Fundamentals*, v. 35, n. 4, pp. 439–459, 1999.
- [29] MORGAN, K., LEWIS, R., ZIENKIEWICZ, O., “An improved algorithm for heat conduction problems with phase change”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 12, n. 7, pp. 1191–1195, 1978.
- [30] YOO, J., RUBINSKY, B., “Numerical computation using finite elements for the moving interface in heat transfer problems with phase transformation”, *Numerical Heat Transfer*, v. 6, n. 2, pp. 209–222, 1983.

- [31] ONEILL, K., LYNCH, D., “A finite element solution for freezing problems using a continuously deforming coordinate system”, *Numerical Methods in Heat Transfer*, v. 1, pp. 215–231, 1981.
- [32] CRANK, J., “How to deal with moving boundaries in thermal problems”, *Numerical methods in heat transfer*, v. 50, pp. 177–200, 1981.
- [33] CRIVELLI, L. A., IDELSOHN, S. R., “A temperature-based finite element solution for phase-change problems”, *International journal for numerical methods in engineering*, v. 23, n. 1, pp. 99–119, 1986.
- [34] DEL GIUDICE, S., COMINI, G., LEWIS, R., “Finite element simulation of freezing processes in soils”, *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, v. 2, n. 3, pp. 223–235, 1978.
- [35] COSIMO, A., FACHINOTTI, V., CARDONA, A., “Temperatura gradient discontinuity aware numerical scheme for solidification problems”, *Blucher Mechanical Engineering Proceedings*, v. 1, n. 1, pp. 1326–1342, 2012.
- [36] VAN ROSSUM, G., “Python Programming Language”, 1991.
- [37] WALT, S. V. D., COLBERT, S. C., VAROQUAUX, G., “The NumPy array: a structure for efficient numerical computation”, *Computing in Science & Engineering*, v. 13, n. 2, pp. 22–30, 2011.
- [38] JONES, E., OLIPHANT, T., PETERSON, P., OTHERS, “SciPy: Open source scientific tools for Python”, 2001–.