



MÉTODOS MATEMÁTICOS E COMPUTACIONAIS NA SOLUÇÃO DE UM PROBLEMA TÉRMICO CONVECTIVO/DIFUSIVO COM MUDANÇA DE FASE

Paulo Fernandes Dechichi

Fernanda do Carmo Silvério Vanzo

Pollyana Fernandes Bento

paulo_fernands@yahoo.com.br

fcsilverio@gmail.com

pollyanabento03@gmail.com

Universidade Federal de Uberlândia

Dr. Solidônio Rodrigues de Carvalho

srcarvalho@mecanica.ufu.br

Universidade Federal de Uberlândia

Av. João Naves de Ávila, 2121 - Campus Santa Mônica, CEP 38408-100, Uberlândia, Minas Gerais, Brasil

Resumo. *O presente estudo tem como proposta encontrar uma solução numérica conveniente para um problema térmico convectivo/difusivo com mudança de fase e malha fixa. O modelo utilizado corresponde a um processo de soldagem TIG (Tungsten Inert Gas) sem deposição de material, desconsiderando qualquer interferência eletromagnética ou recirculação da poça de fusão. O fenômeno da mudança de fase é analisado por meio de um termo denominado fração mássica que depende da temperatura e tempo de aquecimento do modelo térmico. São abordados três métodos para o cálculo da fração mássica. O primeiro é basicamente o mais simples e considera apenas as propriedades termofísicas e variações da temperatura. O segundo faz uso dos parâmetros anteriores e informações da célula de interesse, já o terceiro, o mais robusto, adiciona informações das células adjacentes. Esta correção depende de um fator de subrelaxação λ , cuja escolha interfere na variação da fração mássica. Cada um dos três métodos possui um valor λ considerado ótimo em função da melhor representação do problema e do menor custo computacional. A partir da identificação do valor ótimo de λ , este trabalho propõe realizar uma comparação entre os três métodos de forma a identificar as vantagens e desvantagens de cada um na solução do problema térmico. As simulações e comparações são realizadas com o software MatLab®.*

Palavras-chave: *Solução numérica, Fração mássica, Problema térmico, Mudança de fase.*

1 INTRODUÇÃO

1.1 Considerações iniciais

Problemas de engenharia são geralmente descritos por meio de equações diferenciais, sejam elas do tipo ordinárias ou parciais. Dependendo da complexidade do problema a ser tratado, basicamente, existem dois caminhos para se obter a solução destas equações. O primeiro deles é o método analítico, o qual abrange um conjunto de operações matemáticas que levam a uma solução dita exata. O segundo trata-se do método numérico, que consiste em técnicas de aproximação para encontrar a solução aproximada de uma dada equação. Em muitas das vezes, a solução analítica do problema é complexa ou até impossível de ser obtida, e neste caso, o uso dos métodos numéricos é inevitável. Dentre os métodos mais comuns de solução numérica destacam-se o Método dos Elementos Finitos, Método das Diferenças Finitas e o Método dos Volumes Finitos.

O presente trabalho trata da solução de um problema térmico regido por uma equação diferencial parcial utilizando-se o Método das Diferenças Finitas.

O modelo físico do problema é baseado em um processo de soldagem do tipo TIG que utiliza como fonte de calor um arco elétrico gerado a partir de um eletrodo de tungstênio não consumível ligado a uma fonte de soldagem e a peça a ser soldada. O arco elétrico, o eletrodo e a peça são protegidos por um gás inerte, por exemplo, o Argônio. O uso de gás de proteção é necessário para evitar a oxidação excessiva do eletrodo e da peça pela atmosfera em altas temperaturas. O processo TIG pode ser usado com ou sem adição de material. Uma esquematização do modelo físico é apresentada na Fig. 1.

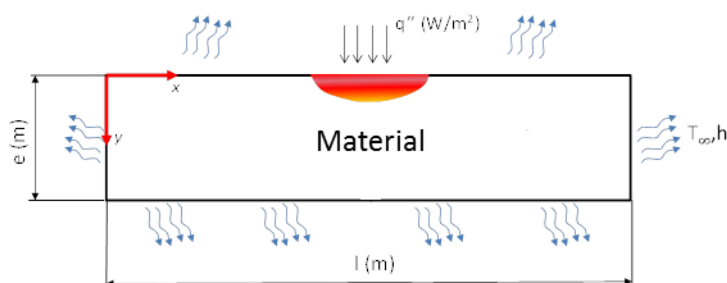


Figura 1. Esquematização do modelo físico e matemático do problema

As seguintes considerações foram adotadas na abordagem do problema em questão: a soldagem TIG ocorre sem deposição do material; a fonte de calor é estática; o campo eletromagnético não exerce influência sobre o processo; não há recirculação no interior da poça de fusão; o material foi submetido à convecção térmica livre em todas as faces, exceto na região da poça de fusão, conforme mostra a Fig. 1; a temperatura inicial dos materiais (T_0) é igual à temperatura ambiente $T_0 = T_\infty$; as propriedades físicas do material permanecem constantes durante o processo.

As grandezas representadas na Fig. 1 são:

- l - Largura da peça a ser soldada;
- e - Espessura da peça;
- q'' - Fluxo térmico proveniente do arco elétrico;

- T_{∞} - Temperatura ambiente;
- h - Coeficiente de convecção.

1.2. Equação Diferencial Parcial

A modelagem matemática utilizada será inicialmente representada pela Eq. (1), a qual corresponde a uma equação diferencial parcial de segunda ordem (Ozisik, 1993).

$$k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right] = \rho \cdot \frac{\partial H}{\partial t} \quad (1)$$

Onde:

- T - temperatura [$^{\circ}\text{C}$];
- H - entalpia [J / kg];
- x, y - dimensões da peça [m];
- t - tempo [s];
- ρ - densidade [kg / m^3];
- k - condutividade térmica [$\text{W} / \text{m}^{\circ}\text{C}$].

Uma vez definidos os modelos físico e matemático para este problema, apresentam-se então, as condições de contorno adotadas. A Equação (2) representa a condição de fluxo de calor fornecido ao material e Eq. (3) indica as trocas térmicas por convecção entre o material e o meio.

$$q'' \cdot A = k \cdot A \cdot \frac{\partial T}{\partial y} \quad (2)$$

$$h \cdot A(T - T_{\infty}) = k \cdot A \cdot \frac{\partial T}{\partial \eta} \quad (3)$$

Sendo a condição inicial $T = T_{\infty}$ (temperatura ambiente). η representa as faces expostas ao meio ao longo das direções x e y .

2 PROBLEMA A SER RESOLVIDO

Considerando as funções $T = T(x,y,t)$ e $H = H(T)$, onde T e H são, respectivamente, a temperatura e a entalpia, tem-se a Eq. (4) apresentada abaixo:

$$H(T) = C \cdot T + f \cdot L \quad (4)$$

Onde:

- C - Calor Específico (característica do material);
- T - Temperatura;
- f - Fração mássica, com $0 \leq f \leq 1$;
- L - Calor Latente.

A Figura 2 demonstra o comportamento da fração mássica em função da variação da temperatura para um metal puro (linha cheia) e para uma liga metálica (linha tracejada), em que “0” significa que o metal se encontra no estado sólido e “1” no estado líquido. Entre zero e um é gerada uma zona de transição na qual as duas fases (líquido/sólido) coexistem.

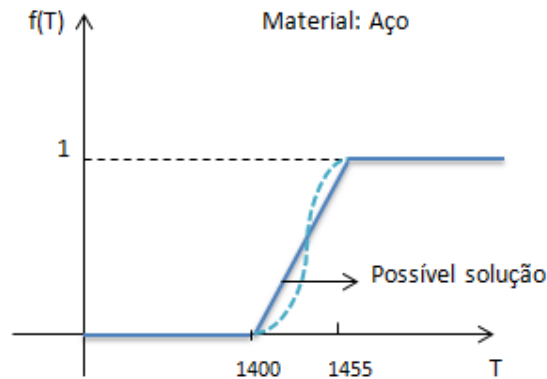


Figura 2. Comportamento de f (fração mássica) em função de T (temperatura). Adaptado de Ozisik (1993)

Substituindo a Eq. (4) em (1) tem-se:

$$K \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right] = \rho \cdot \frac{\partial (C \cdot T + f \cdot L)}{\partial t} \quad (5)$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{1}{\alpha_1} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + \alpha_2 \cdot \frac{\partial f}{\partial t} \quad (6)$$

Onde:

- $\alpha_1 = [K / (\rho \cdot C)]$ - difusividade térmica [m^2 / s];
- $\alpha_2 = [(\rho \cdot C) / K]$.

3 MÉTODO NUMÉRICO

Para solução do problema proposto, definiu-se o método numérico de Diferenças Finitas de primeira ordem conforme apresentado nas Eqs. (7) e (8).

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} \quad (7)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{(\Delta x)^2} \quad (8)$$

Uma vez definidas as discretizações, define-se então o modelo das malhas numéricas aplicadas ao problema conforme a Fig. 3.

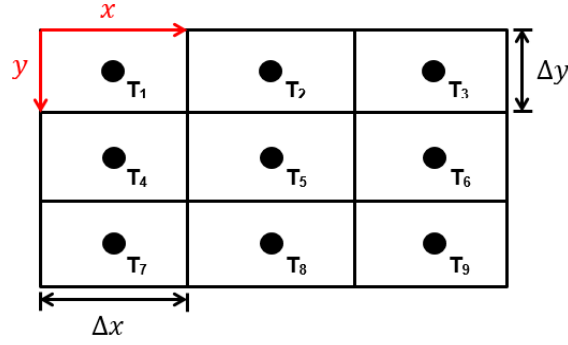
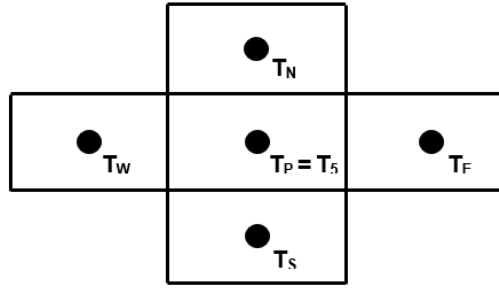


Figura 3. Representação da malha numérica

Para analisar as interações entre cada ponto da malha definida, adota-se inicialmente o ponto T_5 como referência, conforme ilustrado na Fig. 4.


 Figura 4. Representação do volume T_5 e seus vizinhos utilizados no cálculo

Desta forma, a discretização dos termos que compõem a equação diferencial estudada pelo método de diferenças finitas é feita conforme apresentado nas Eqs (9) a (12).

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_E^{t+1} - 2 \cdot T_P^{t+1} + T_W^{t+1}}{(\Delta x)^2} \quad (9)$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{T_S^{t+1} - 2 \cdot T_P^{t+1} + T_N^{t+1}}{(\Delta y)^2} \quad (10)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_P^{t+1} - T_P^t}{\Delta t} \quad (11)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f_P^{t+1} - f_P^t}{\Delta t} \quad (12)$$

Pela escolha de se utilizarem valores de temperatura no momento $t+1$ (futuro), a solução a ser obtida será totalmente implícita (Patankar, 1980), já que o cálculo do valor da propriedade no ponto P no momento $t+1$ dependerá da resolução de um sistema de equações envolvendo todos os pontos da malha nesse instante.

Substituindo as equações anteriores na Eq. (6), tem-se:

$$\frac{T_E^{t+1} - 2 \cdot T_P^{t+1} + T_W^{t+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{T_S^{t+1} - 2 \cdot T_P^{t+1} + T_N^{t+1}}{(\Delta y)^2} = \frac{1}{\alpha_1} \cdot \left(\frac{T_P^{t+1} - T_P^t}{\Delta t} \right) + \alpha_2 \cdot \left(\frac{f_P^{t+1} - f_P^t}{\Delta t} \right) \quad (13)$$

Rearranjando a Eq. (13), obtém-se:

$$A_p \cdot T_p + A_E \cdot T_E + A_W \cdot T_W + A_N \cdot T_N + A_S \cdot T_S = B \quad (14)$$

Tem-se então o seguinte sistema linear a ser resolvido:

$$\{A\}_{N_x N_y \times N_x N_y} \cdot [T]_{N_x N_y \times 1} = [B]_{N_x N_y \times 1} \quad (15)$$

Para a malha numérica 3x3 (Fig. 3), as matrizes serão representadas conforme a Eq. (16).

$$\left\{ \begin{array}{cccccccc} A_p & A_E & 0 & A_S & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_W & A_p & A_E & 0 & A_S & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_W & A_p & A_E & 0 & A_S & 0 & 0 \\ A_N & 0 & A_W & A_p & A_E & 0 & A_S & 0 \\ 0 & A_N & 0 & A_W & A_p & A_E & 0 & A_S \\ 0 & 0 & A_N & 0 & A_W & A_p & A_E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_N & 0 & A_W & A_p & A_E \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_N & 0 & A_W & A_p \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_N & 0 & A_W \end{array} \right\} \cdot \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \\ T_7 \\ T_8 \\ T_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \\ B_5 \\ B_6 \\ B_7 \\ B_8 \\ B_9 \end{bmatrix} \quad (16)$$

A matriz $\{A_{9 \times 9}\}$ é conhecida como uma matriz esparsa pentadiagonal (Patankar, 1980).

A relação representada na Eq. (17) deve ser respeitada de forma a garantir a convergência do modelo numérico proposto:

$$A_p \geq |A_E + A_W + A_N + A_S| \quad (17)$$

Assim, os termos da Eq. (17) podem ser definidos como:

$$A_p = -\frac{2}{(\Delta x)^2} - \frac{2}{(\Delta y)^2} - \frac{1}{\alpha_1 \cdot \Delta t} \quad (18)$$

$$A_E = A_W = \frac{1}{(\Delta x)^2} \quad (19)$$

$$A_N = A_S = \frac{1}{(\Delta y)^2} \quad (20)$$

$$B = -\frac{1}{\alpha_1 \cdot \Delta t} \cdot T_p^t - \frac{\alpha_2}{\Delta t} \cdot f_p^t + \frac{\alpha_2}{\Delta t} \cdot f_p^{t+1} \quad (21)$$

Para simplificar a representação do problema, considera-se dentro do termo B que:

$$cte = -\frac{1}{\alpha_1 \cdot \Delta t} \cdot T_p^t - \frac{\alpha_2}{\Delta t} \cdot f_p^t \quad (22)$$

Já os termos com coeficientes A_E , A_W , A_N e A_S são agrupados sob a forma de $Termos^{t+1}$. Obtém-se, assim, a Eq. (23):

$$A_p \cdot T_p^{t+1} + Termos^{t+1} = cte + \frac{\alpha_2}{\Delta t} \cdot f_p^{t+1} \quad (23)$$

Por meio da análise da Eq. (23), verifica-se que a solução do problema é condicionada à correta identificação da temperatura e fração mássica no tempo futuro $t+1$. Ou seja, há uma não linearidade associada à solução do problema térmico. Para resolver o problema, um método iterativo é aplicado baseado no trabalho desenvolvido por Voller (1983) e Voller e Brent (1989). Segundo tais autores, quando a temperatura T_p^{t+1} tende à temperatura de fusão T_m há uma variação Δf associada à fração mássica f_p^{t+1} . Logo, é definida a Eq. (24).

$$A_p \cdot T_m + \text{Termos}^{t+1} = \text{cte} + \frac{\alpha_2}{\Delta t} \cdot (f_p^{t+1} + \Delta f) \quad (24)$$

Assim, segundo Voller e Brent (1989), três métodos podem ser deduzidos a partir das equações (23) e (24):

3.1 Método A:

Por meio de uma subtração entre as equações (24) e (23) e desprezando a influência das dimensões da malha numérica no termo A_p , tem-se a Eq. (25):

$$-\frac{1}{\alpha_1 \cdot \Delta t} \cdot (T_m - T_p^{t+1}) = \frac{\alpha_2}{\Delta t} \cdot \Delta f \quad (25)$$

Logo, a variação da fração mássica pode ser estimada por meio da Eq. (26):

$$\Delta f = \frac{1}{\alpha_1 \cdot \alpha_2} \cdot (T_p^{t+1} - T_m) \quad (26)$$

Assim, baseado no método de Euler (Eq. 27), Voller e Brent (1989) propõem um método iterativo para estimar a fração mássica f_p^{a+1} em todo o domínio de cálculo.

$$f_p^{a+1} = f_p^a + \lambda \cdot \Delta f \quad (27)$$

onde λ consiste em um fator de subrelaxação que pode variar entre zero e um.

Logo, substituindo a Eq. (26) em (27), tem-se:

$$f_p^{a+1} = f_p^a + \lambda \cdot \frac{1}{\alpha_1 \cdot \alpha_2} \cdot (T_p^{t+1} - T_m) \quad (28)$$

3.2 Método B:

Neste método, A_p e Termos^{t+1} são aqueles definidos nas equações (18) e (23) respectivamente. Desta forma, realizando novamente a operação de subtração entre as equações (24) e (23), obtém-se:

$$A_p \cdot (T_m - T_p^{t+1}) = \frac{\alpha_2}{\Delta t} \cdot \Delta f \quad (29)$$

$$\Delta f = \frac{A_p \cdot \Delta t}{\alpha_2} (T_m - T_p^{t+1}) \quad (30)$$

Logo, a partir do método B, propõe-se estimar a fração mássica conforme a Eq. (31):

$$f_p^{a+1} = f^a + \lambda \cdot \frac{A_p \cdot \Delta t}{\alpha_2} (T_m - T_p^{t+1}) \quad (31)$$

3.3 Método C:

O método C é baseado apenas na Eq. (24). Logo, isolando o termo Δf , tem-se:

$$\Delta f = \frac{A_p \cdot T_m + \text{Termos}^{a+1} - cte - \frac{\alpha_2 \cdot f_p^{a+1}}{\Delta t}}{\frac{\alpha_2}{\Delta t}} \quad (32)$$

Substituindo a Eq. (32) na (27) e organizando os termos, obtém-se a Eq. (33).

$$f_p^{a+1} = \frac{f_p^a + \lambda \cdot \frac{\Delta t}{\alpha_2} (A_p \cdot T_m + \text{Termos}^{a+1} - cte)}{1 + \lambda} \quad (33)$$

Segundo Voller e Brent (1989) o método C é o mais robusto, pois faz uso de várias informações do modelo numérico para estimar a fração mássica em cada região do domínio de cálculo.

As três metodologias proporcionam estimativas da distribuição da fração mássica no material metálico. Tais valores são usados de forma a obter uma solução atualizada do problema térmico, que só avançara no tempo mediante à convergência da distribuição de temperatura em todo o material. Dessa forma, faz-se necessária no mínimo duas avaliações da distribuição da fração mássica a cada instante de tempo.

3.4 Análise das Condições de Contorno

Para a análise inicial, foi selecionada a célula T_1 . As células representadas por linhas tracejadas são fictícias, porém, são necessárias para definir as condições de contorno do modelo. A relação entre o calor de condução interno no volume T_1 e o calor de convecção proveniente das células adjacentes pode ser observada na Fig. 5.

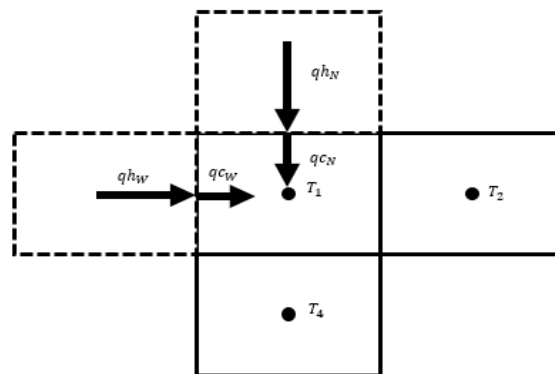


Figura 5. Representação do volume T_1 e suas condições de contorno

Por meio de um balanço de energia na fronteira superior, tem-se que:

$$qh_N = qc_N \quad (34)$$

Considerando-se a Equação de Fourier para Condução e a Equação de Newton para convecção, após organizar a equação obtêm-se:

$$\left(\frac{2 \cdot k + \Delta y \cdot h}{2 \cdot k} \right) \cdot T_f = T_p + T_\infty \cdot \frac{\Delta y \cdot h}{2 \cdot k} \quad (35)$$

Onde:

- A - área perpendicular da face (m²);
- T_f - temperatura da face (°C).

A temperatura na face da célula pode ser aproximada por meio de uma média ponderada das células vizinhas conforme apresentado na Eq. (36), logo:

$$T_f = \frac{T_p + T_N}{2} \quad (36)$$

Substituindo-se a Eq. (35) na Eq. (36), tem-se a Eq. (37):

$$T_N = \frac{2 \cdot \Delta y \cdot h \cdot T_\infty}{2 \cdot k + \Delta y \cdot h} + \left(\frac{2 \cdot k - \Delta y \cdot h}{2 \cdot k + \Delta y \cdot h} \right) \cdot T_p \quad (37)$$

Analogamente, obtém-se T_w conforme a Eq. (38).

$$T_w = \frac{2 \cdot \Delta x \cdot h \cdot T_\infty}{2 \cdot k + \Delta x \cdot h} + \left(\frac{2 \cdot k - \Delta x \cdot h}{2 \cdot k + \Delta x \cdot h} \right) \cdot T_p \quad (38)$$

Substituindo os valores de T_N e T_w na Eq. (14), obtém-se os termos da célula T₁ para convecção livre nas fronteiras.

$$A_{p_{Célula_T_1}} = A_p + A_w \cdot \left(\frac{2 \cdot k - \Delta x \cdot h}{2 \cdot k + \Delta x \cdot h} \right) + A_N \cdot \left(\frac{2 \cdot k - \Delta y \cdot h}{2 \cdot k + \Delta y \cdot h} \right) \quad (39)$$

$$A_{E_{Célula_T_1}} = A_E \quad (40)$$

$$A_{w_{Célula_T_1}} = 0 \quad (41)$$

$$A_{N_{Célula_T_1}} = 0 \quad (42)$$

$$A_{S_{Célula_T_1}} = A_S \quad (43)$$

$$B_{Célula_T_1} = B - \left(\frac{2 \cdot \Delta x \cdot h \cdot T_\infty}{2 \cdot k + \Delta x \cdot h} \right) \cdot A_w - \left(\frac{2 \cdot k - \Delta y \cdot h}{2 \cdot k + \Delta y \cdot h} \right) \cdot A_N \quad (44)$$

Prosseguindo a análise das condições de contorno, o próximo tipo de célula tratado é aquele do tipo T₂, representado na Fig. 6. Para essa célula há a possibilidade de duas condições de contorno: A primeira está relacionada ao fluxo de calor oriundo do processo de soldagem, enquanto a segunda, consiste em convecção térmica após a soldagem.

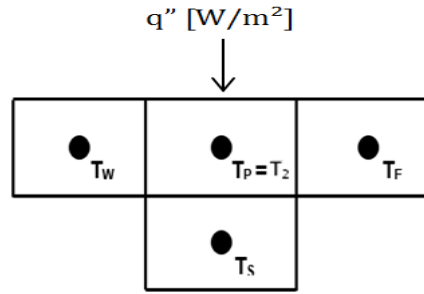


Figura 6. Representação da célula T_2 e células adjacentes

No caso de convecção térmica, as correções das equações para T_2 são feitas de forma análoga a T_1 . Para fluxo de calor, por meio de um balanço de energia na fronteira, tem-se a Eq. (45):

$$q'' A = \frac{kA(T_f - T_p)}{\frac{\Delta y}{2}} \quad (45)$$

Por meio das equações (36) e (45), tem-se:

$$T_N = \frac{\Delta y q''}{k} + T_p \quad (46)$$

Assim, são definidas as seguintes correções para os termos da célula tipo T_2 considerando fluxo de calor na fronteira ao norte:

$$A_{p_{Célula_T2}} = A_p + A_N \quad (47)$$

$$A_{E_{Célula_T2}} = A_E \quad (48)$$

$$A_{W_{Célula_T2}} = A_W \quad (49)$$

$$A_{N_{Célula_T2}} = 0 \quad (50)$$

$$A_{S_{Célula_T2}} = A_S \quad (51)$$

$$B_{Célula_T2} = B - \frac{\Delta y q''}{k} \cdot A_N \quad (52)$$

Finalmente, para as demais células, considerou-se as condições de contorno análogas à célula T_1 .

4 ALGORITMO COMPUTACIONAL

A Figura (7) apresenta o algoritmo computacional proposto para a solução do problema térmico.

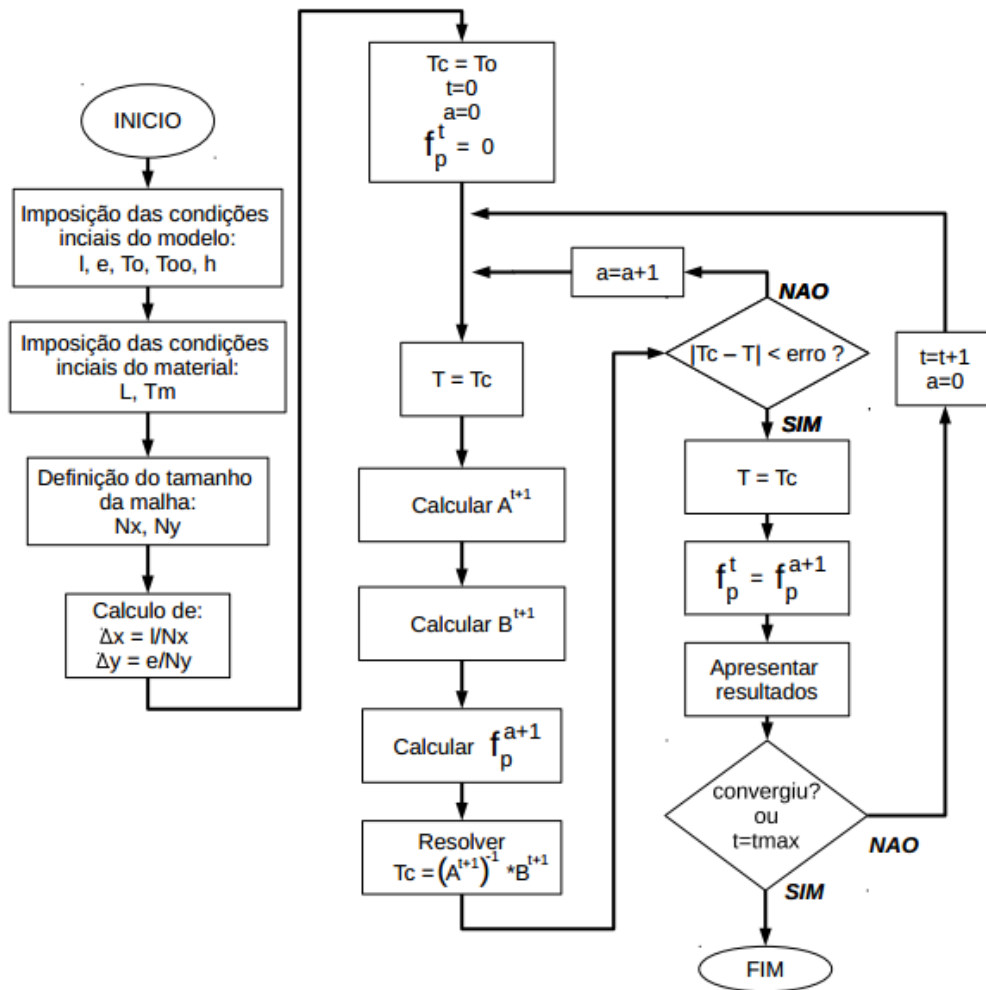


Figura 7. Algoritmo computacional.

Como pode ser observado no diagrama, o algoritmo para a solução é composto por algumas etapas distintas. A primeira consiste em definir as variáveis do sistema e seus valores, sendo esses relativos às propriedades físicas e ao próprio processo de discretização do domínio.

Em seguida, inicia-se o cálculo do campo de temperaturas para o tempo inicial, levando-se em conta as condições iniciais e de contorno do sistema. Esse cálculo ocorre no maior laço do algoritmo. Dentro dele há o processo iterativo para o cálculo simultâneo dos valores de temperatura e da fração mássica para as células do domínio.

Havendo convergência nesse laço interno, pode-se, então, passar para o cálculo do próximo instante. O laço de tempo se repete até que o tempo de simulação se esgote.

5 ANÁLISE TÉRMICA E NUMÉRICA DO PROBLEMA PROPOSTO

Para a análise numérica foram utilizados os seguintes parâmetros físicos: coeficiente de transferência de calor por convecção igual a 20 W/m²K em todas as faces da amostra, exceto na região exposta à fonte de calor. Temperatura ambiente e similar à da amostra, ambas iguais à 30 °C. O material simulado foi aço inox AISI304 com 200 mm de largura e 5 mm de

espessura. A escolha do material é baseada na vasta literatura científica que reporta suas propriedades termofísicas (Tab. 1).

Tabela 1- Propriedades do aço AISI 304 (Cângani, 2010)

Símbolo	Propriedade	Valor	Unidade
T_l	Temperatura do líquido	1455	[°C]
T_s	Temperatura do sólido	1400	[°C]
k	Condutividade térmica	14,9	[W/m°C]
C	Calor específico	522,6	[J/kg°C]
ρ	Densidade	7200	[Kg/m ³]
L	Calor latente	265200	[J/kg]
h	Coefficiente de transferência de calor	20	[W/m ² °C]

Adotou-se um fluxo de calor de 2000W aplicado em um região de 25 mm de comprimento. Os valores envolvendo dimensões do material e amplitude do fluxo de calor foram definidos por meio de testes preliminares, de forma a garantir o fenômeno da mudança de fase na amostra. Além disso, foram definidas as seguintes condições adicionais:

- Passo de tempo: 0,05 segundos;
- Tempo total de aquecimento do material: 10 segundos;
- Número de células na malha computacional: conforme a Tab. 2
- Limite de iterações para cálculo da fração mássica: 1500 iterações;
- Critério de convergência da temperatura: erro = 10^{-4} °C.

Tabela 2. Número de células na malha numérica

Malha	Número de células Nx x Ny	Custo computacional [Min]	Fator de subrelaxação λ
M ₁	80x20 =1600	8,5	0,16
M ₂	120x30 = 3600	20,6	0,16
M ₃	150x50= 7500	34,1	0,16
M ₄	200x80 = 16000	461	0,05

Segundo Voller e Brent (1989) o método C é considerado o mais robusto para a solução do problema proposto. Portanto, definindo valores para coeficiente de subrelaxação λ

conforme a Tab. 2, foram realizadas simulações de forma a analisar a convergência numérica do problema térmico. As simulações foram realizadas em um computador com processador Intel Core i7 3232QM 2.2 GHz e 8 GB de memória RAM.

As Figuras 8 e 9 apresentam a distribuição de temperatura e a variação da fração mássica conforme as malhas da Tab. 2, respectivamente. Nesta etapa de análise, adotou-se como referência o instante final de aquecimento, ou seja, $t = 10$ segundos.

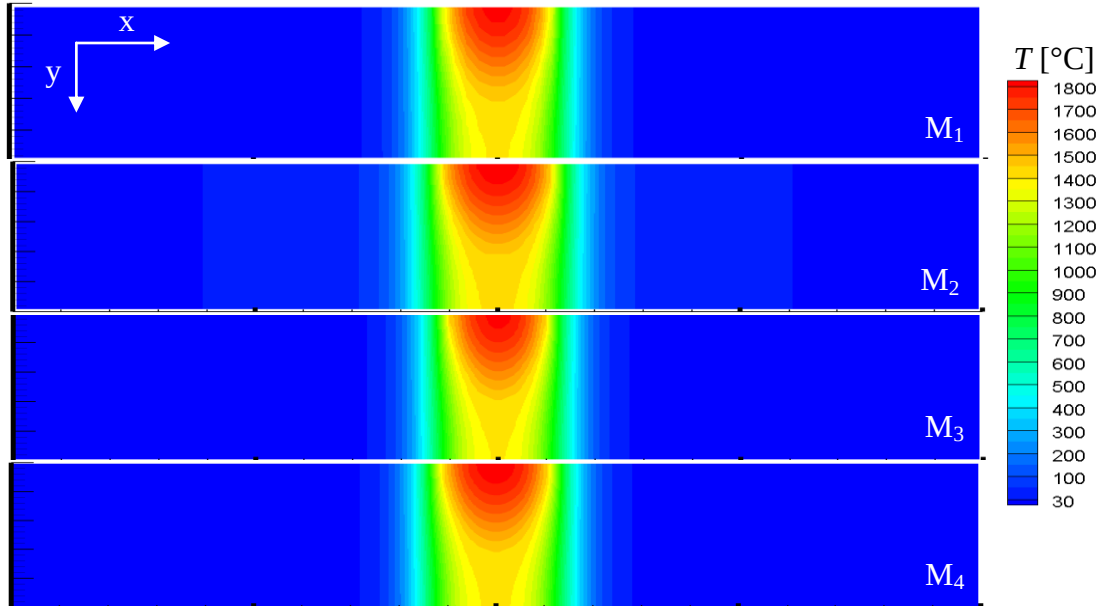


Figura 8. Distribuição de temperatura no instante de tempo $t=10$ s conforme o refino de malha apresentado na Tab. 2.

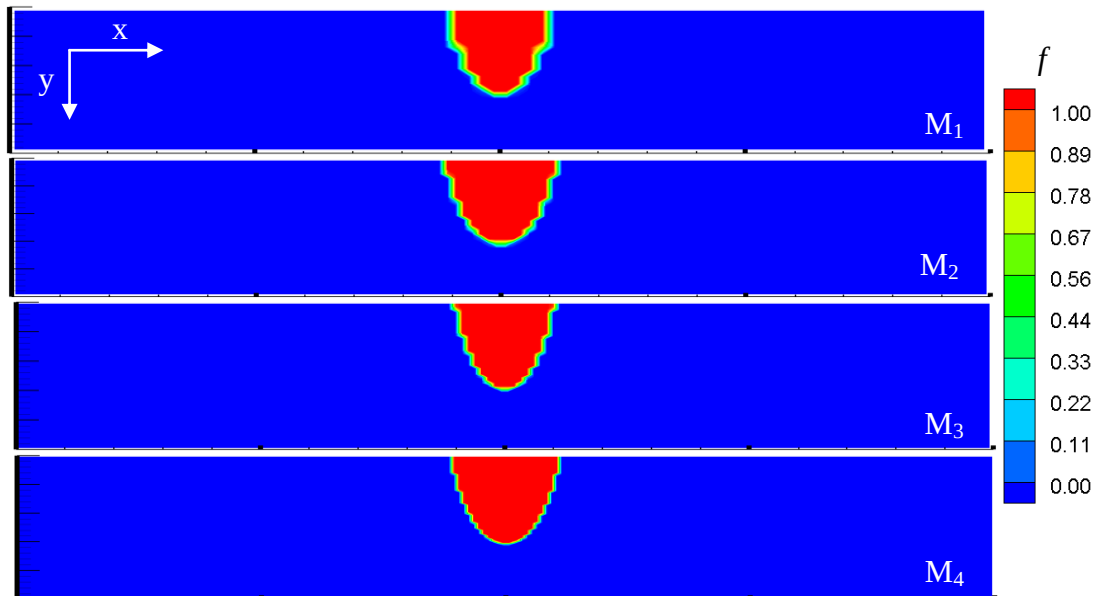


Figura 9. Fração mássica (f) no instante de tempo $t=10$ s conforme o refino de malha apresentado na Tab. 2.

Por meio da análise da Fig. 8, verifica-se que os campos de temperatura são bastante semelhantes. Portanto todas as malhas propostas seriam adequadas à solução do problema

proposto. Por meio da análise da Tab. 2, verifica-se que, para a malha M4, mais refinada, foi necessário reduzir o fator de subrelaxação λ . Basicamente, para o valor $\lambda = 0,16$ o modelo não alcançava a convergência e ultrapassa o limite máximo de 1500 iterações previsto para estimar a fração mássica.

Na Figura 9, por sua vez, verifica-se que, por meio da malha M4, a zona de transição sólido/líquido, região delimitada entre $0 < f < 1$, é corretamente delineada, pois há menor interferência da malha retangular proposta no presente trabalho. Portanto, para fins de análise de resultados, será definida a malha M4 como a ideal para a solução do problema térmico.

Assim, para a malha M4, a Tab. 3 apresenta um estudo envolvendo os métodos A, B e C. O valor ótimo do coeficiente de subrelaxação para cada método foi estimado usando o Método da Seção Áurea (Vanderplaats, 1999). Como referência, adotou-se uma faixa de busca para λ variando entre 0 e 1.

Tabela 3. Comparação entre os métodos A, B e C: coeficientes de subrelaxação ótimos, número máximo de iterações, e custo computacional para a solução do problema térmico.

Método	λ	$N_{\text{máx}}$ de iterações	Custo computacional (min)
A	0,1	1300	1300
B	0,06	730	480
C	0,05	600	461

A distinção principal que pode ser feita entre os métodos está relacionada ao custo computacional, já que, as temperaturas calculadas apresentaram pequeno desvio.

Dos métodos apresentados para a correção do valor da fração mássica, o método A é o mais simples de ser implementado, pois depende basicamente da temperatura da célula e da temperatura de fusão do material. Porém o custo computacional deste método é bastante superior quando comparado ao B e C.

No método B, durante a análise do λ , constatou-se melhor desempenho no intervalo de $0,02 < \lambda < 0,1$. Ressalta-se que o resultado obtido por meio do método B foi bastante expressivo, haja vista a maior facilidade de implementação deste quando comparado ao método C.

Segundo Voller e Brent (1989) a eficácia do método C na obtenção da convergência do modelo está condicionada à correta definição do coeficiente de subrelaxação λ . O coeficiente λ considerado o mais apropriado para o método é aquele que possibilita a obtenção da convergência com o menor número de iterações possível, sob o menor custo computacional. Desta forma, para o método C, foi realizada uma investigação do custo computacional em função da variação de λ .

Analisando a Figura 10, verifica-se que, assim como no método B, o valor considerado ótimo para λ também coincide com a região entre $0,02 < \lambda < 0,1$. Assim, por meio do método da Seção Áurea, o valor ótimo estimado para o método C foi 0,05.

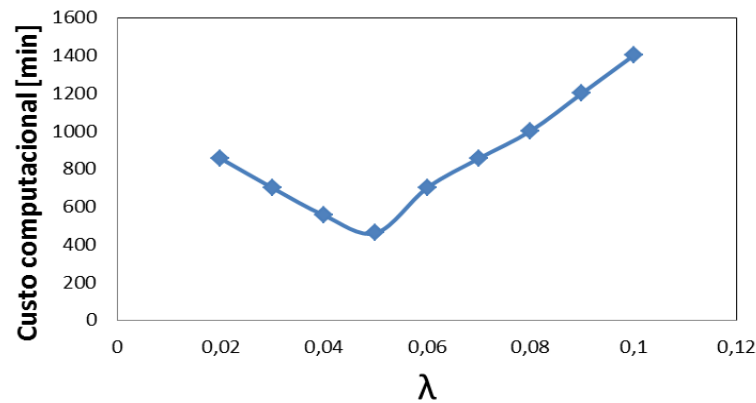


Figura 10. Custo computacional em função do coeficiente de subrelaxação “ λ ”.

O baixo valor identificado para o coeficiente de subrelaxação λ pode ser justificado por meio da análise da Fig. 11 que apresenta a variação da fração mássica ao longo do tempo de simulação.

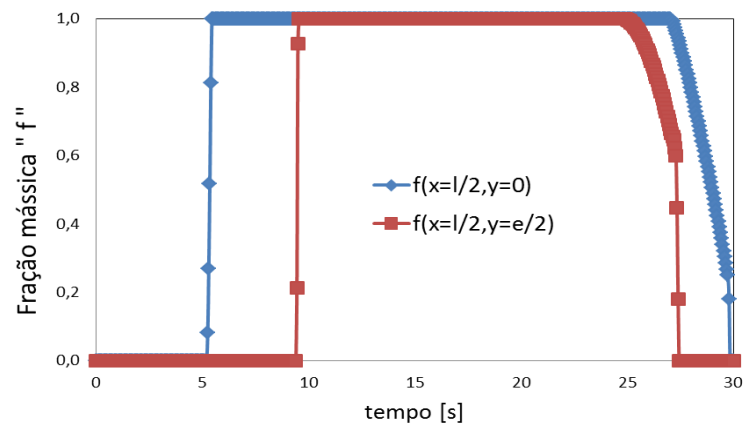


Figura 11. Variação da fração mássica “ f ” ao longo do tempo de simulação em duas regiões distintas da amostra.

Durante os 10 segundos iniciais, etapa de aquecimento, na qual a amostra experimenta a transição sólido/líquido, há uma maior variação entre os valores calculados para a fração mássica a cada passo de tempo. Portanto, um maior valor de λ poderia ser conveniente nessa etapa. De fato, por meio de simulações, constatou-se que durante o aquecimento o valor ótimo de λ seria 0,16. Todavia, durante a etapa de resfriamento da amostra, que ocorre entre 10 e 30 segundos, a amostra experimenta a transição líquido/sólido, e nessa etapa os valores calculados para a fração mássica vão reduzindo gradativamente a cada passo tempo. Dessa forma, faz necessária uma redução no coeficiente de subrelaxação em função da pequena variação da fração mássica a cada iteração.

Finalmente, considerando a malha 200x80, a Fig. 12 apresenta a distribuição de temperatura bem como a fração mássica durante os 30 segundos de simulação.

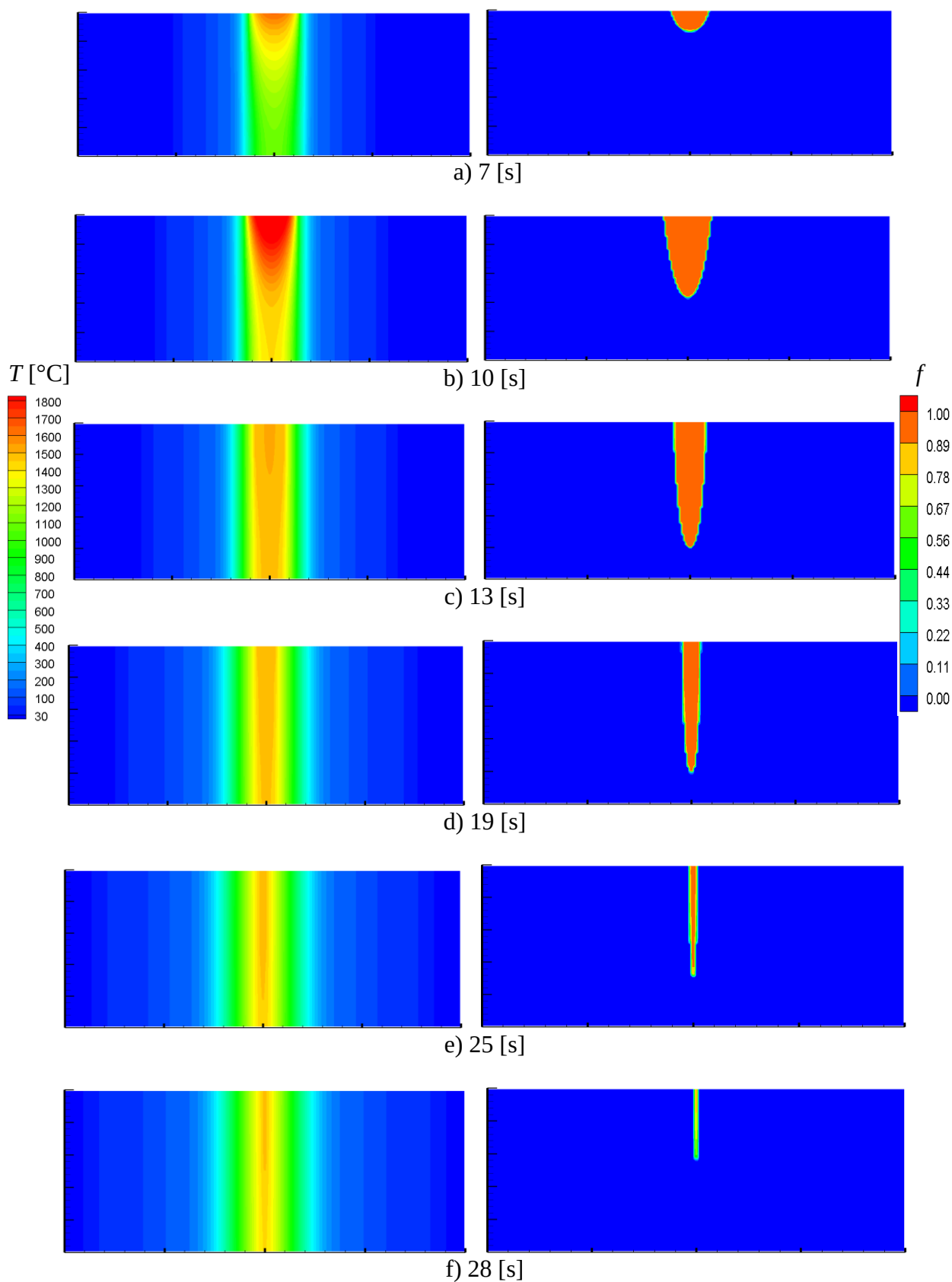


Figura 12. Variação da temperatura e da fração mássica ao longo do tempo de simulação.

A partir da análise da Fig. 12, verifica-se a distribuição de temperatura bem como a fração mássica em instantes específicos do processo de simulação. Durante os 10 segundos iniciais há a formação da poça de fusão em função da incidência de calor e da transição sólido/líquido. Após tal período, a amostra começa a trocar calor com o meio e tem início a transição líquido/sólido. Aos 19 segundos de simulação a poça de fusão apresenta maior penetração na amostra, todavia, se torna mais estreita. Após 28 segundos ainda persiste uma pequena porção de metal líquido na região de incidência da fonte de calor que lentamente vai retornado ao estado sólido. Tais características físicas comprovam a eficácia da metodologia matemática e numérica adotada neste trabalho.

6 CONCLUSÕES

Este trabalho apresentou uma solução numérica para um problema térmico convectivo/difusivo com mudança de fase e malha fixa. As simulações foram realizadas com o software MatLab® por sua versatilidade na solução das matrizes esparsas inerentes à metodologia numérica adotada.

Por meio do método das diferenças finitas com esquema totalmente implícito foram definidos três métodos para o cálculo da fração mássica. O método A foi o mais simples de ser implementado no algoritmo computacional. Todavia, apresentou alto custo computacional. Os métodos B e C demonstraram ser compatíveis em termos de custo computacional. Todavia, constatou-se maior dificuldade em implementar o método C, haja vista que o mesmo faz uso das propriedades termofísicas do material, informações dos campos térmicos na célula de interesse e vizinhanças para estimar a fração mássica a cada instante de tempo.

Por meio do estudo da influência do fator de subrelaxação “ λ ” na solução do problema térmico, constatou-se que um esquema híbrido seria o mais conveniente para a solução de problemas térmicos envolvendo mudança de fase sólido/líquido e, posteriormente, líquido/sólido. Dessa forma, seria possível adotar um maior valor para “ λ ” na etapa de aquecimento, uma vez que há maior variação na fração mássica a cada instante de tempo. “ λ ” seria reduzido na etapa de resfriamento de forma a assegurar a convergência do modelo térmico durante a transição líquido/sólido.

Por meio dos resultados obtidos constatou-se a eficácia do método C na solução do problema térmico convectivo/difusivo, conforme relatado por Voller e Brent (1989). Em trabalhos futuros, propõe-se usar a experiência adquirida no estudo experimental de processos de soldagem de metais.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Capes, CNPq e Fapemig, pelo apoio financeiro.

REFERÊNCIAS

- Cângani, A. P. M., 2010, *Análise térmica do processo de soldagem TIG de amostras metálicas*, Dissertação de mestrado - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.
- Özisik, M. N., 1993, *Heat Conduction*, Second Edition, Wiley-Interscience.
- Patankar, S.V., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw Hill.
- Vanderplaats, G. N., 1999, *Numerical Optimization Techniques for Engineering Design: With Applications*, McGraw-Hill, USA.

Voller, V.R.; Brent, A.D, 1989, *Investigation of fixed grid techniques for convection / diffusion controlled phase change problems*, presented at 6th International Conference on Numerical Method in Thermal Problems, Swansea.

Voller, V.R., 1983, *Interpretation of the enthalpy in a discretized multidimensional region undergoing a melting/freezing phase change*, Int. j. Heat Mass Transfer, Volume 10, p. 323-328.