



UMA IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS PARA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE MUDANÇA DE FASE

Maicon William Niebus Odone

Luis Paulo da Silva Barra

Lorran Ferreira Maroco Sutter

maicon.odone@gmail.com

luis.barra@ufjf.edu.br

Universidade Federal de Juiz de Fora - UFJF

Rua José Lourenço Kelmer s/n, 36036-900, Minas Gerais, Juiz de Fora, Brazil

Elson Magalhães Toledo

emtc@lncc.br

Laboratório Nacional de Computação Científica - LNCC

Av. Getúlio Vargas 333, 25651-076, Rio de Janeiro, Petrópolis, Brazil

Abstract. *A compreensão dos fenômenos envolvidos em processos de mudança de fase (fusão / solidificação) é de importância fundamental em diversas áreas do conhecimento tais como na engenharia e na metalurgia. No presente trabalho é apresentada uma formulação do método dos volumes finitos para problemas de transferência de calor com mudança de fase considerando-se a convecção natural na região líquida do domínio. São formuladas as equações do movimento de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis acrescidas da equação da energia. O tratamento do problema de mudança de fase é feito pelo método da entalpia-porosidade onde a condição de velocidade nula no sólido é tratada por termos fonte adicionais sendo o efeito da convecção natural tratado por meio da aproximação de Boussinesq. Apresentam-se diferentes algoritmos para tratamento do acoplamento pressão-velocidade e das não-linearidades presentes nas equações do movimento. Um código desenvolvido e implementado em linguagem Python é verificado através da comparação de resultados encontrados na literatura com o programa Phoenix.*

Keywords: *Mudança de fase, Entalpia-porosidade, Volumes finitos, Transferência de calor, Mecânica dos fluidos*

1 INTRODUÇÃO

Problemas de fronteira livre (ou móvel) são caracterizados pelo fato de que a forma e a posição de pelo menos uma parte fronteira do domínio são desconhecidas ao longo do tempo, sendo necessária sua determinação como parte da solução do problema. Nesta classe de problemas são encontrados os problemas de mudança de fase. Neste trabalho, considera-se como mudança de fase a passagem de um material do seu estado líquido para sólido (solidificação) e/ou a passagem do estado sólido para líquido (fusão).

Problemas de mudança de fase possuem aplicações práticas em diversas áreas do conhecimento tais como na engenharia e metalurgia. Exemplos de aplicações incluem derretimento e solidificação de rios, lagos e calotas polares, fundição e moldagem de equipamentos e peças industriais, armazenamento de energia térmica, soldagens, crescimento de cristais, lingotamento contínuo entre outros (Alexiades et al., 2003, Rady et al., 1996, Sun et al., 2007, Odone et al., 2013).

Vários fenômenos podem estar envolvidos quando um material se solidifica ou derrete. Um processo de mudança de fase pode envolver, além da transferência de calor, transporte de massa, super resfriamento (redução da temperatura de um material abaixo de seu ponto de fusão sem que ocorra sua solidificação), liberação ou absorção de calor latente, efeitos de superfície entre outros (Alexiades et al., 1993). Diante disso, a classe de problemas de mudança de fase mais simples e ponto de partida para o estudo de casos mais complexos é composta pelos problemas de Stefan nos quais são levados em conta várias hipóteses simplificadoras permitindo que soluções analíticas possam ser estabelecidas (Odone et al., 2013, Alexiades et al., 1993). Em geral, nestes problemas considera-se apenas a condução como principal mecanismo de transferência de calor, sendo formulados apenas em termos de um balanço de energia escrito na forma da equação de transferência de calor. Problemas mais gerais, envolvendo por exemplo transporte de massa por convecção e efeitos gravitacionais, requerem a utilização de equações de movimento além da equação da energia, tornando suas formulações complexas e demandando modelos computacionais para a sua solução.

Os modelos numéricos para a solução de problemas de mudança de fase podem ser classificados como: métodos de malha deformável ou adaptativa e métodos de malha fixa (Real et al., 2003). Nos métodos de malha adaptativa um conjunto de equações de conservação é empregado separadamente em cada fase. Condições de continuidade do fluxo de calor e da temperatura através da região de transição de fase devem ser consideradas. Para acompanhar a forma e posição da interface ao longo do tempo, a malha computacional empregada deve ser adaptada a cada passo de tempo (Gartling, 1980). Por outro lado, nos métodos de malha fixa, um único conjunto de equações é aplicado em todo domínio computacional, tanto na fase líquida quanto na fase sólida. A determinação da região de transição de fase pode ser aproximada por meio do calor latente total presente em volume de controle (VC) computacional. Uma restrição que deve ser atendida nestes métodos é que as velocidades calculadas por meio das equações do movimento sejam nulas nas regiões do domínio ocupadas pelo material em estado sólido (Rady et al., 1996). Alguns métodos empregados para impor essa condição podem ser encontrados em Morgan (1981), Gartling (1980), Voller et al. (1985, 1986, 1987) e Brent et al. (1988).

Um dos métodos mais utilizados para impor a condição de velocidade nula nas regiões sólidas é o método da entalpia-porosidade no qual o efeito do aumento gradual da viscosidade com a solidificação do material é artificialmente obtido através de uma analogia com o fluxo

em um meio poroso. Desta forma, a distribuição dessa porosidade fictícia é calculada a partir da fração líquida do material ao longo do tempo. Sua implementação é feita por meio da formulação de termos fonte baseados na lei de Darcy e na equação de Carman-Kozeny para meios porosos que são adicionados às equações do movimento (Voller et al., 1987). Outra característica deste método é a formulação da equação da energia em termos da quantidade termodinâmica entalpia que, diferentemente da temperatura, permite distinguir a fase sólida da fase líquida (Alexiades et al., 1993).

Neste trabalho, uma formulação para a solução de problemas de condução de calor com mudança de fase e convecção no líquido baseada no método da entalpia-porosidade é apresentada. As equações do modelo são discretizadas pelo método dos volumes finitos e para o tratamento das não-linearidades e do acoplamento pressão-velocidade presentes nas equações do movimento são descritos e utilizados os algoritmos SIMPLE, SIMPLER e SIMPLER. Os termos difusivos são tratados por meio de diferenças centrais enquanto os termos convectivos são tratados por meio dos esquemas *upwind* e híbrido. O código desenvolvido foi implementado em Python e através da comparação de seus resultados com soluções de problemas de mudança de fase encontrados na literatura verifica-se sua validade e correção.

2 EQUAÇÕES DO MODELO

Em um método de malha fixa como o método da entalpia-porosidade apenas um conjunto de equações de conservação precisa ser formulado em todo o domínio dos problemas. Para a formulação das equações do modelo assume-se que os materiais possuem propriedades termofísicas constantes com exceção da densidade. A variação da densidade em função da temperatura é tratada por meio da aproximação de Boussinesq (Ferziger et al., 2002), isto é, densidade constante em todos os termos das equações com exceção de um termo fonte de empuxo empregado na equação de movimento na direção da aceleração da gravidade. Além disso assume-se ainda que os materiais no estado líquido são fluidos newtonianos incompressíveis, e o escoamento é laminar bidimensional. Para um material sob mudança de fase a equação da conservação da energia pode ser escrita em termos da entalpia total como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} H) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (1)$$

onde ρ é a densidade, $\vec{V} = (u, v)$ é o vetor velocidade, k é a condutividade térmica, T é a temperatura e $H = h + \Delta H$ é a entalpia total sendo $h = h_{ref} + \int_{T_{ref}}^T c(T) dT$ a entalpia sensível, ΔH o calor latente total e c o calor específico. Tomando-se $T_{ref} = h_{ref} = 0$, a entalpia total pode ser escrita como $H = cT + \Delta H$. Substituindo essa expressão para a entalpia total na Eq. (1), tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} h) - \nabla \cdot (\alpha \nabla h) = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho \Delta H) - \nabla \cdot (\rho \vec{V} \Delta H) \quad (2)$$

onde o lado direito da Eq. (2) leva em conta a evolução do calor latente e $\alpha = k/c$.

O calor latente total ΔH é restrito ao limite $0 \leq \Delta H \leq L$ onde L é o calor latente de fusão ou simplesmente o calor latente do material, uma propriedade termofísica dada. A relação entre o calor latente total e o calor latente de fusão tem a seguintes interpretações físicas:

$$\text{fração líquida: } f_l = \frac{\Delta H}{L} \quad \text{fração sólida: } f_s = 1 - \frac{\Delta H}{L} = 1 - f_l$$

O calor latente total é definido como uma função da temperatura e diversas relações $\Delta H = f(T)$ podem ser estabelecidas ou obtidas experimentalmente. Neste trabalho, considera-se que o processo de transição de fase não ocorre a temperatura constante e a seguinte relação linear por partes para a evolução do calor latente com a temperatura é adotada:

$$\Delta H = f(T) = \begin{cases} 0, & \text{se } T < T_s \\ \frac{L}{2} \left(1 + \frac{T - T_m}{0.5(T_l - T_s)} \right), & \text{se } T_s \leq T \leq T_l \\ L, & \text{se } T > T_l \end{cases} \quad (3)$$

onde $T_m = 0.5(T_l + T_s)$ é considerada a temperatura de fusão, e, para um processo de solidificação, T_s é a temperatura abaixo da qual o material é completamente sólido e T_l é a temperatura acima da qual o material é completamente líquido.

Para o tratamento da convecção natural na região líquida do domínio, equações de movimento são utilizadas e como o escoamento é considerado incompressível, a essas equações de movimento deve ser acrescentada a equação da conservação da massa ou equação da continuidade. Sob as hipóteses mencionadas anteriormente, as equações da conservação da quantidade de movimento linear (uma para cada componente da velocidade) e a equação da continuidade são dadas respectivamente por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} u) = \nabla \cdot (\mu \nabla u) - \frac{\partial p}{\partial x} - Au \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} v) = \nabla \cdot (\mu \nabla v) - \frac{\partial p}{\partial y} - Av + S_b \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (6)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica e p é a pressão.

Em um método de malha fixa como o método da entalpia-porosidade, é necessário impor uma condição que torne nulas as velocidades computadas pelas equações do movimento na região sólida. No método em questão, esta condição é alcançada definindo-se o parâmetro A nas Eq. (4) e (5). O objetivo é reduzir gradualmente as velocidades de valores finitos na região líquida para zero na região sólida (Brent et al., 1988). Isto pode ser feito assumindo-se que os VCs computacionais que estão em processo de mudança de fase, isto é, com $0 \leq \Delta H \leq L$, simulam um meio pseudo-poroso com a porosidade definida pela fração líquida f_l do VC. O valor de A é então definido de modo que as equações do movimento são forçadas a simular a equação de Carman-Kozeny para escoamentos em meios porosos:

$$\nabla p = -C \frac{(1 - \lambda)^2}{\lambda^3} \vec{V}_a \quad (7)$$

onde λ é a porosidade e $\vec{V}_a$ é uma velocidade aparente. Com isto, uma definição apropriada para o valor de A nas Eqs. (4) e (5) é:

$$A = -C \frac{(1 - f_l)^2}{f_l^3 + q} \quad (8)$$

onde C é uma constante relacionada com a morfologia da região de transição de fase e q é uma constante adicionada para impedir divisão por zero quando $f_l = 0$ (região sólida).

Em termos práticos, o efeito do valor de A se dá da seguinte forma (Odone et al., 2014): nos VCs que estão na fase completamente líquida, ou seja, com $\Delta H = L$ e $f_l = 1$, o valor de A é zero e portanto não irá influenciar o comportamento das equações do movimento. Nos VCs que estão sob mudança de fase, ou seja, com $0 \leq \Delta H \leq L$ e $0 < f_l < 1$, o valor de A aumenta com a redução de f_L e passa a exercer domínio sobre os demais termos dependentes das componentes da velocidade. Desta forma as equações de movimento passam a simular o comportamento da equação de Carman-Kozeny e fazendo com que as velocidades tendam para zero. Na região com VCs completamente em estado sólido, isto é, com $\Delta H = 0$ e $f_l = 0$, o valor de A será suficientemente alto em relação aos demais termos das equações do movimento fazendo com que as velocidades calculadas sejam praticamente nulas. Em termos de implementação computacional, por multiplicar as componentes da velocidade, o valor de A não altera o termo independente, mas é somado em cada elemento da diagonal principal das matrizes de coeficientes, provocando numericamente o efeito desejado.

O termo fonte S_b empregado na equação de movimento relativa a componente vertical da velocidade (na direção da gravidade) é um termo de empuxo empregado para induzir convecção natural na região líquida do domínio. O fenômeno da convecção natural, ou de transporte de matéria na região líquida, decorre de que gradientes de temperaturas induzem gradientes de densidade que, por sua vez, induzem o movimento. Este termo é baseado na aproximação de Boussinesq: assume-se que a densidade é constante em todos os termos das equações exceto para o termo de empuxo S_b . Para a maioria dos fluidos, a densidade pode ser relacionada de forma linear com a temperatura. Com isso, a expressão para o termo de empuxo é:

$$S_b = \frac{\rho g \beta (h - h_{ref})}{c} \quad (9)$$

onde g é a aceleração da gravidade e β o coeficiente de expansão térmica.

O sistema de equações do método da entalpia porosidade dados pelas Eqs. (2), (4), (5) e (6) são acopladas além de serem não-lineares. Neste trabalho são utilizados os algoritmos SIMPLE, SIMPLEC e SIMPLER para a solução iterativa do sistema de equações do modelo.

A equação da continuidade normalmente não é empregada em sua forma usual da pela Eq. (6). Em um algoritmo iterativo de solução como os acima citados, esta equação é reescrita de modo a se transformar em uma equação para a pressão ou de correção para a pressão. Além disso, a equação da energia dada pela Eq. (2) por si só requer um procedimento iterativo para a sua resolução (Voller et al., 1987). No que se segue, apresenta-se a discretização e os procedimentos de solução do sistema de equações do modelo.

3 DISCRETIZAÇÃO PELO MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

Para a discretização do sistema de equações dados pelas Eqs. (2), (4), (5) e (6) empregou-se o método dos volumes finitos (MVF) em malhas cartesianas retangulares (Odone et al., 2014). A Fig. 1 ilustra trecho de uma malha em um domínio bidimensional empregada para a discretização espacial dos problemas aqui tratados. Os ponto P indica o centro de um volume de controle (VC) onde variáveis escalares como a entalpia, temperatura e calor latente são calculadas. Os pontos E , W , N e S indicam os pontos vizinhos de P . O VC ao redor do ponto P é limitado pelas faces e , w , n e s .

Nas faces dos VCs de variáveis escalares são calculadas as componentes da velocidade. Assim, de acordo com a Fig. 1, as componentes horizontais da velocidade são calculadas nas

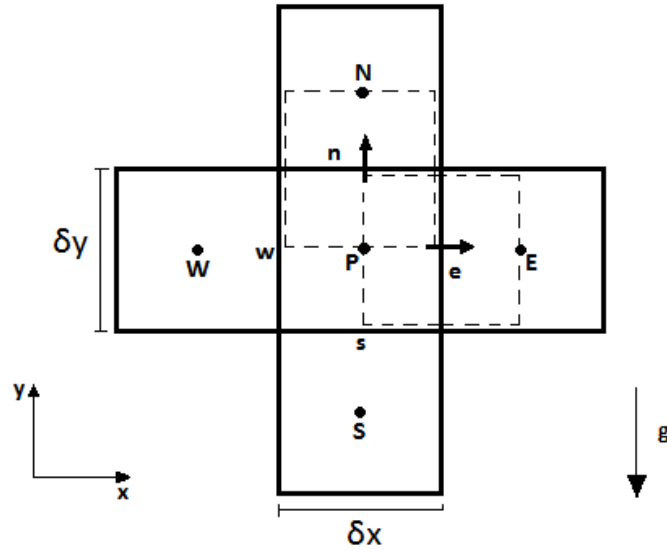


Figura 1: Stencil computacional para o método dos volumes finitos

faces verticais dos VCs escalares (por exemplo, u_e) enquanto as componentes verticais são calculadas nas faces horizontais dos VCs escalares (por exemplo, v_n). Esse procedimento, de empregar malhas deslocadas para diferentes variáveis, é empregado para se evitar problemas relacionados a avaliação do gradiente de pressão nas faces dos VCs (Versteeg et al., 2007, Patankar, 1980).

As equações da conservação da energia (Eq. (2)), e da quantidade de movimento linear (Eq. (4) e Eq. (5)) possuem formas discretas muito similares. A equação discreta da energia pode ser escrita como:

$$a_P h_P = a_N h_N + a_S h_S + a_E h_E + a_W h_W + a_P^0 h_P^0 + b. \quad (10)$$

onde a_i são os coeficientes contendo combinações da discretização dos termos difusivo e convectivo. O sobrescrito 0 indica avaliações da corresponde expressão no passo de tempo anterior, sendo $a_P^0 = \rho \delta x \delta y / \delta t$. A discretização temporal é completamente implícita de primeira ordem e os termos sem sobrescritos são avaliados no passo de tempo atual. O termo b representa a discretização do lado direito da Eq. (2) e também contém termos devido as condições de contorno.

A discretização das equações do movimento pode ser feita de modo análogo à equação da energia e as equações discretas podem ser escritas como:

$$a_e u_e = \sum a_{nb} u_{nb} + a_e^0 u_e^0 + (p_P - p_E) A_e + b \quad (11)$$

e

$$a_n v_n = \sum a_{nb} v_{nb} + a_n^0 v_n^0 + (p_P - p_N) A_n + b \quad (12)$$

onde o somatório é tomado sobre cada um dos pontos vizinhos para cada componente da velocidade. As expressões $(p_P - p_E) A_e$ e $(p_P - p_N) A_n$ resultam da integração feita para o gradiente da pressão com A_e e A_n sendo as áreas do VC para os quais as equações estão sendo escritas. O termo b contém a discretização feitas para termos fonte como a aproximação de Boussinesq, B_b e termos advindos das condições de contorno de do passo de tempo anterior. Similarmente à

equação discreta da energia, os coeficientes a_i contém combinações da discretização dos termos difusivo e convectivo.

Um dos pontos chave do MVF consiste na avaliação de uma dada grandeza escalar (temperatura, entalpia, componentes da velocidade, etc.) e do gradiente dessa grandeza escalar através das faces dos VCs após a integração da equação diferencial em um VC. Para a avaliação do gradiente é usual empregar o esquema central. Já para a avaliação da grandeza em si, são inúmeros os esquemas de discretização que podem ser empregados. Para este trabalho, adotou-se os esquemas *upwind* de primeira ordem e o esquema híbrido ((Odone et al., 2014, Versteeg et al., 2007, Patankar, 1980).

4 ALGORITMOS DE SOLUÇÃO

As Eq. (2), (4), (5) e (6) formam um sistema de equações diferenciais não-lineares e acopladas. Ainda, o processo geral de solução de um problema de mudança de fase requer o cálculo do valor de A (Eq. 8), da fração líquida f_l , e do termo de empuxo S_b entre outros. Além disso, a equação da energia Eq. (2) requer um tratamento específico para a atualização do calor latente ΔH e uma solução de modo iterativo.

Nesta seção descrevem-se os algoritmos iterativos SIMPLE, SIMPLEC e SIMPLER (Versteeg et al., 2007), empregados primordialmente para resolver as não-linearidades e o acoplamento pressão-velocidade presentes nas equações do movimento (Eq. (4), Eq. (5)). Em particular, explica-se como estes algoritmos transformam a equação da continuidade (Eq. (6)) em formas específicas para fornecer a pressão ou correção para a pressão. Se alguma variável escalar depender das velocidades, elas também devem fazer parte do algoritmo, como será descrito. Também mostra-se o algoritmo global de solução de um problema de mudança de fase pelo método da entalpia-porosidade.

No que se segue, admite-se que as equações da conservação da quantidade de movimento sejam escritas para um problema de escoamento sem mudança de fase, isto é, sem a inclusão dos termos fonte adicionais do método da entalpia porosidade. Tal simplificação não altera a forma como os algoritmos descritos são aplicados a problemas de mudança de fase.

4.1 Algoritmo SIMPLE

O algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations) é o pilar central de uma série de métodos iterativos similares onde os fluxos de massa $F_x = \rho u$ e $F_y = \rho v$ através das faces dos VCs são avaliados por meio de estimativas para as componentes u e v da velocidade sendo necessária também uma estimativa para o campo de pressões. A medida que o algoritmo evolui, espera-se que as estimativas fornecidas se aproximem da solução das equações.

Admitindo-se uma estimativa p^* para o campo de pressões e considerando-se que os fluxos de massa $F_x = \rho u$ e $F_y = \rho v$ através das faces dos VCs tenham sido calculados por uma estimativa da velocidade, as componentes u^* e v^* da velocidade podem ser obtidas a partir das equações de movimento de modo que:

$$a_e u_e^* = \sum a_{nb} u_{nb}^* + (p_P^* - p_E^*) A_e + b_e \quad (13)$$

e

$$a_n v_n^* = \sum a_{nb} v_{nb}^* + (p_P^* - p_N^*) A_n + b_n \quad (14)$$

onde os termos avaliados no passo de tempo anterior, $a_e^0 u_e^0$ e $a_e^0 u_e^0$ foram inseridos na expressão de b . Definindo-se a correção para a pressão, p' , como a diferença entre o valor correto da pressão p e da estimativa p^* , e definindo-se correções similares para as componentes da velocidade, pode-se escrever:

$$p = p^* + p', \quad u = u^* + u', \quad e \quad v = v^* + v'. \quad (15)$$

A substituição do campo de pressões correto nas Eqs. (11) e (12) levam ao cálculo de componentes u e v corretas dadas por:

$$a_e u_e = \sum a_{nb} u_{nb} + (p_P - p_E) A_e + b_e \quad (16)$$

e

$$a_n v_n = \sum a_{nb} v_{nb} + (p_P - p_N) A_n + b_n \quad (17)$$

Subtraindo a equação Eq. (16) da equação Eq. (13) e subtraindo a a equação Eq. (17) da equação Eq. (14) fornece:

$$a_e u_e' = \sum a_{nb} u_{nb}' + (p_P' - p_E') A_e \quad (18)$$

e

$$a_n v_n' = \sum a_{nb} v_{nb}' + (p_P' - p_N') A_n \quad (19)$$

A principal aproximação do algoritmo SIMPLE consiste em desprezar os termos sob os somatórios, permitindo escrever:

$$u_e' = d_e (p_P' - p_E') \quad (20)$$

e

$$v_n' = d_n (p_P' - p_N') \quad (21)$$

onde $d_e = A_e/a_e$ e $d_n = A_n/a_n$. As equações Eq (20) e Eq. (21) definem as correções para a velocidade dadas em conjunto com a Eq. (15), ou seja,

$$u_e = u_e^* + d_e (p_P' - p_E'), \quad e \quad v_n = v_n^* + d_n (p_P' - p_N') \quad (22)$$

Lembrando que o escoamento deve satisfazer à equação da continuidade Eq. (6), substituindo as velocidades corretas, dadas pela Eq. (22), na forma discreta da equação da continuidade leva a

$$a_P p_P' = a_E p_E' + a_W p_W' + a_N p_N' + a_S p_S' + b_P' \quad (23)$$

com os coeficientes dados por

$$\begin{aligned} a_E &= (\rho d A)_e \\ a_W &= (\rho d A)_w \\ a_N &= (\rho d A)_n \\ a_S &= (\rho d A)_s \\ a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S \\ b_P' &= (\rho u^* A)_w - (\rho u^* A)_e + (\rho v^* A)_s - (\rho v^* A)_n \end{aligned} \quad (24)$$

A Eq. (23) representa a forma discreta da equação da continuidade escrita como uma equação para a correção da pressão p' . Resolvendo esta equação, obtém-se correções para a pressão em todos os pontos e essas correções são empregadas para corrigir as pressões e velocidades. As principais etapas do algoritmo SIMPLE são descritas a seguir.

1 - Defina as condições iniciais e de contorno;

2 - Arbitre valores para os campos p , u e v ;

3 - Repita até a convergência:

3.1 - Resolva as equações de movimento discretas, obtendo u^* e v^* :

$$\begin{aligned} a_e u_e^* &= \sum a_{nb} u_{nb}^* + (p_P^* - p_E^*) A_e + b_e \\ a_n v_n^* &= \sum a_{nb} v_{nb}^* + (p_P^* - p_N^*) A_n + b_n \end{aligned}$$

3.2 - Resolva a equação de correção da pressão, obtendo p' :

$$a_P p'_P = a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S + b'_P$$

3.3 - Corrigir as pressões e velocidades, obtendo u , v e p :

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

3.4 - Resolver outras equações discretas, obtendo ϕ :

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b_\phi$$

3.5 - Defina as estimativas para a próxima iteração:

$$p^* = p \quad u^* = u \quad v^* = v$$

4.2 Algoritmo SIMPLEC

O algoritmo SIMPLEC (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations Consistent) possui etapas idênticas ao algoritmo SIMPLE (Versteeg et al., 2007) com diferença na definição dos valores d_e e d_n nas expressões de correções da velocidades dadas pelas Eq. (20) e Eq. (21) ou Eq. (22).

No SIMPLEC as equações do movimento são manipuladas de modo que as expressões de correção para as componentes da velocidade são escritas como

$$u'_e = d_e (p'_P - p'_E), \quad \text{com} \quad d_e = \frac{A_e}{a_e - \sum a_{nb}} \quad (25)$$

e

$$v'_n = d_n (p'_P - p'_N), \quad \text{com} \quad d_n = \frac{A_n}{a_n - \sum a_{nb}} \quad (26)$$

Todas as demais expressões e passos do algoritmo SIMPLEC são exatamente os mesmos do algoritmo SIMPLE.

4.3 Algoritmo SIMPLER

O algoritmo SIMPLER - Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations Revised - (Versteeg et al., 2007, Patankar, 1980) apresenta como característica o uso da equação de

correção da pressão para corrigir as velocidades mas empregando entretanto, uma equação a parte para fornecer diretamente as pressões intermediárias.

A partir das equações de movimento discretas

$$a_e u_e = \sum a_{nb} u_{nb} + (p_P - p_E) A_e + b_e \quad (27)$$

e

$$a_n v_n = \sum a_{nb} v_{nb} + (p_P - p_N) A_n + b_n \quad (28)$$

definem-se as pseudo-velocidades $\hat{u}$ e $\hat{v}$ dadas por

$$\hat{u}_e = \frac{\sum a_{nb} u_{nb} + b_e}{a_e} \quad (29)$$

e

$$\hat{v}_n = \frac{\sum a_{nb} v_{nb} + b_n}{a_n} \quad (30)$$

Reescrevendo as equações do movimento Eq. (27) e Eq. (28) e usando a Eq. (29) e a Eq. (30) obtêm-se:

$$u_e = \hat{u}_e + d_e (p_P - p_E) \quad (31)$$

e

$$v_n = \hat{v}_n + d_n (p_P - p_N) \quad (32)$$

com $d_e = A_e/a_e$ e $d_n = A_n/a_n$.

Empregando-se expressões como a Eq. (31) e Eq. (32) na equação discreta da continuidade, obtêm-se a equação da pressão dada por

$$a_P p_P = a_E p_E + a_W p_W + a_N p_N + a_S p_S + b_P \quad (33)$$

com os coeficientes dados por

$$\begin{aligned} a_E &= (\rho dA)_e \\ a_W &= (\rho dA)_w \\ a_N &= (\rho dA)_n \\ a_S &= (\rho dA)_s \\ a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S \\ b'_P &= (\rho \hat{u} A)_w - (\rho \hat{u} A)_e + (\rho \hat{v} A)_s - (\rho \hat{v} A)_n \end{aligned} \quad (34)$$

A solução da equação da pressão Eq. (34) fornece um campo de pressões que, empregado nas equações do movimento discretas Eq. (27) e Eq. (28), permite obter as velocidades u^* e v^* . Estas velocidades por sua vez são usadas para resolver a equação de correção da pressão, Eq. (23). As correções para a pressão obtidas são usadas apenas para corrigir as velocidades mas não as pressões. As principais etapas do algoritmo SIMPLER são apresentadas a seguir.

- 1 - Defina as condições iniciais e de contorno;
- 2 - Arbitre valores para os campos u e v ;
- 3 - Repita até a convergência:

3.1 - Calcule as pseudo-velocidades, obtendo $\hat{u}$ e $\hat{v}$:

$$\hat{u}_e = \frac{\sum a_{nb} u_{nb} + b_e}{a_e}$$

$$\hat{v}_n = \frac{\sum a_{nb} v_{nb} + b_n}{a_n}$$

3.2 - Resolva a equação da pressão usando $\hat{u}$ e $\hat{v}$, obtendo p :

$$a_P p_P = a_E p_E + a_W p_W + a_N p_N + a_S p_S + b_P$$

3.3 - Defina a pressão arbitrária:

$$p^* = p$$

3.4 - Resolva as equações de movimento discretas, obtendo u^* e v^* :

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

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

3.5 - Resolva a equação de correção da pressão, obtendo p' :

$$a_P p'_P = a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S + b'_P$$

3.6 - Corrigir somente as velocidades, obtendo u , v :

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

3.7 Resolver outras equações discretas, obtendo ϕ :

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b_\phi$$

3.8 - Defina as estimativas para a próxima iteração:

$$u^* = u \quad v^* = v$$

4.4 O método da entalpia-porosidade

Os algoritmos apresentados podem ser empregados em conjunto com as relações descritas para o método da entalpia-porosidade na solução de problemas de mudança de fase. As principais etapas para a solução de um problema de mudança de fase pelo método da entalpia-porosidade são descritas a seguir.

- 1 - Defina as condições iniciais e de contorno;
- 2 - Arbitre valores para os campos u e v (e p , se usar o SIMPLE ou SIMPLEC);
- 3 - Calcule os valores iniciais das relações do método da entalpia-porosidade:

$$\Delta H, \quad f_l, \quad A, \quad S_b$$

- 4 - Repita para cada passo de tempo:

4.1 - Algoritmo SIMPLE, SIMPLER ou SIMPLEC sem a equação da energia

4.2 - Solução da equação discreta da energia, restringindo $0 \leq \Delta H \leq L$:

$$a_P h_P = a_N h_N + a_S h_S + a_E h_E + a_W h_W + a_P^0 h_P^0 + b$$

4.3 - Atualizar valores para o próximo passo de tempo

4.5 RESULTADOS

Nesta seção apresentam-se alguns resultados numéricos obtidos empregando-se o método da entalpia-porosidade descrito através do desenvolvimento e implementação de um código em linguagem de programação Python.

O problema estudado trata da solidificação de um líquido em uma cavidade quadrada em que o processo de mudança de fase envolve convecção natural na região líquida do domínio. A Fig. (2) a seguir ilustra esquematicamente o processo de solidificação.

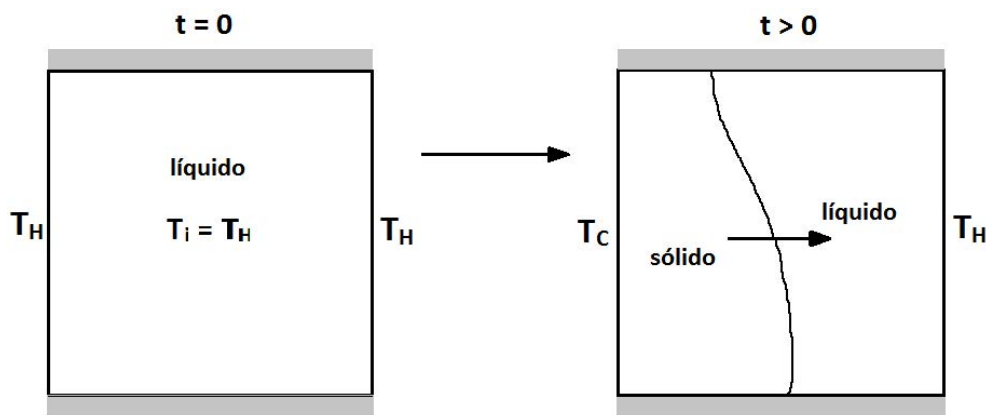


Figura 2: Esquema de um processo de solidificação

O problema, descrito em Argentieri et al. (2003) e Voller et al. (1987), tem inicialmente seu domínio preenchido com um material na fase líquida à temperatura $T = T_i$. As paredes superior e inferior são isoladas termicamente enquanto que a parede direita é mantida a uma temperatura maior que a temperatura de solidificação do material. No instante inicial, uma temperatura menor que a temperatura de solidificação é subitamente imposta na parede esquerda. Assim, o processo de solidificação inicia-se nesta parede com uma região de transição de fase se formando e avançando para a direita com o tempo.

Quatro casos apresentados por Argentieri et al. (2003), A, B, C e D foram simulados e a Tabela 1 a seguir ilustra as condições e propriedades do material em cada simulação. Em todos os casos, a mudança de fase ocorre em uma pequena faixa de temperaturas, com $T_s = -0,01^\circ C$ e $T_l = 0,01^\circ C$. Com base nos dados da Tabela 1, define-se os seguintes parâmetros adimensionais:

- Número de Rayleigh: $Ray = \frac{\rho^2 g \beta c (T_H - T_{ref}) L^3}{\mu k}$
- Número de Prandtl: $Pra = \frac{\mu c}{k}$
- Número de Stefan: $Ste = \frac{c(T_H - T_C)}{L}$

cujos valores são: $Ray = 10^4$ nas simulações A e C e $Ray = 3 \times 10^4$ nas simulações B e D, $Ste = 5$ nas simulações A e B e $Ste = 10$ nas simulações C e D, e $Pra = 10^3$ nas quatro simulações.

Tabela 1: Dados usados nas simulações

Simulação	A	B	C	D
Temperatura inicial, T_i ($^{\circ}C$)	0.5	0.5	0.5	0.5
Temperatura quente, T_H ($^{\circ}C$)	0.5	0.5	0.5	0.5
Temperatura fria, T_C ($^{\circ}C$)	-0.5	-0.5	-0.5	-0.5
Temperatura de fusão, T_f ($^{\circ}C$)	0	0	0	0
Dimensão da cavidade, l , (m)	1	1	1	1
Densidade, ρ (Kg/m^3)	1	1	1	1
Calor específico, c ($J/Kg^{\circ}C$)	1	1	1	1
Viscosidade, μ (Kg/ms)	1	1	1	1
Condutividade térmica, k ($W/m^{\circ}C$)	0.001	0.001	0.001	0.001
Coeficiente de expansão, β ($^{\circ}C^{-1}$)	0.01	0.03	0.01	0.03
Calor latente, L (J/Kg)	5	5	10	10
Gravidade, g (m/s^2)	1000	1000	1000	1000

Nas simulações efetuadas nos quatro casos empregou-se uma malha regular uniforme de 40×40 VCs na discretização espacial, enquanto a discretização temporal é totalmente implícita de primeira ordem. A discretização dos termos difusivos foi feita usando o esquema central enquanto o esquema híbrido foi usado para os termos convectivos (Versteeg et al., 2007, Patankar, 1980). O passo de tempo adotado em cada simulação foi $\Delta t = 20s$ com os seguintes valores na expressão Eq. (8): $C = 1.6 \times 10^5$ e $q = 10^{-3}$. O algoritmo empregado para o tratamento das não-linearidades e do acoplamento pressão-velocidade foi o SIMPLE.

Na sequência de figuras a seguir, na Fig. (3) exibe-se o campo de velocidades e a frente de solidificação para os instantes de tempo $t = 600s$, $t = 900s$ e $t = 1800s$ empregando-se os dados da simulação. Em cada caso, A figuras superiores - indicadas por (1) - são os resultados obtidos no presente trabalho e as figuras inferiores - indicadas por (2) - são os resultados obtidos por Argentieri et al. (2003). As Figs. (4), (5) e (6) exibem a mesma situação descrita acima, porém empregando os dados das simulações B, C e D respectivamente.

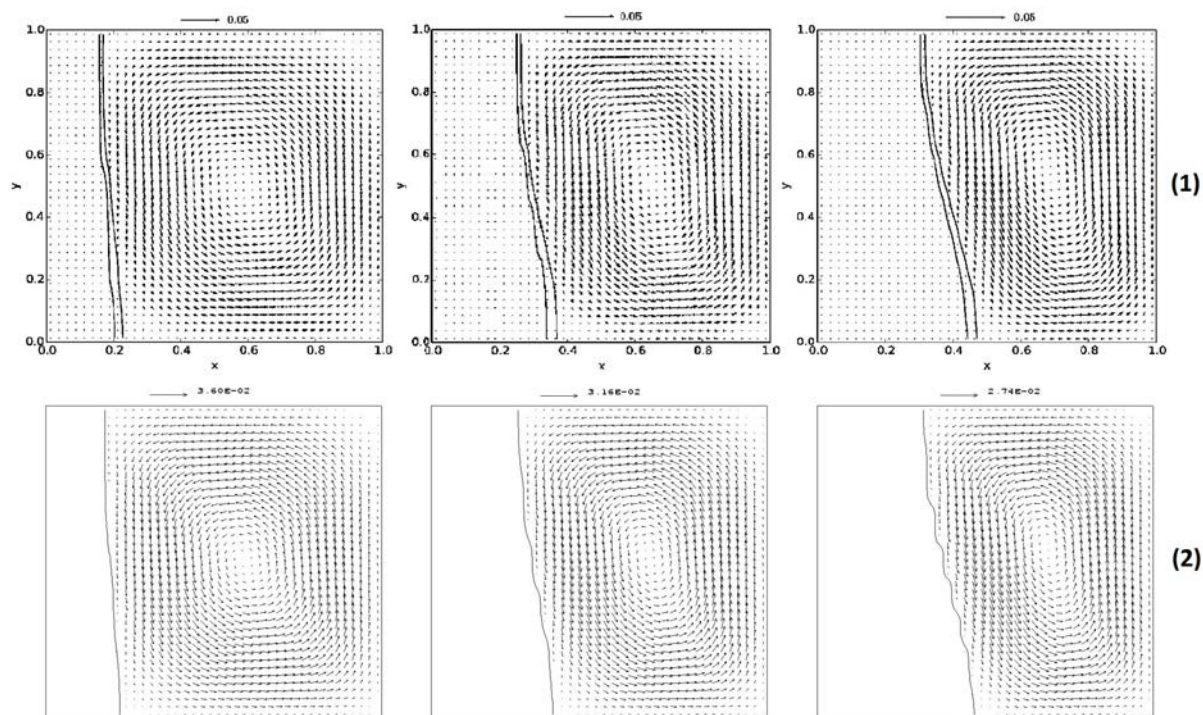


Figura 3: simulação A. Campo de velocidades e frente de solidificação, $t = 600s$, $t = 900s$ e $t = 1800s$.

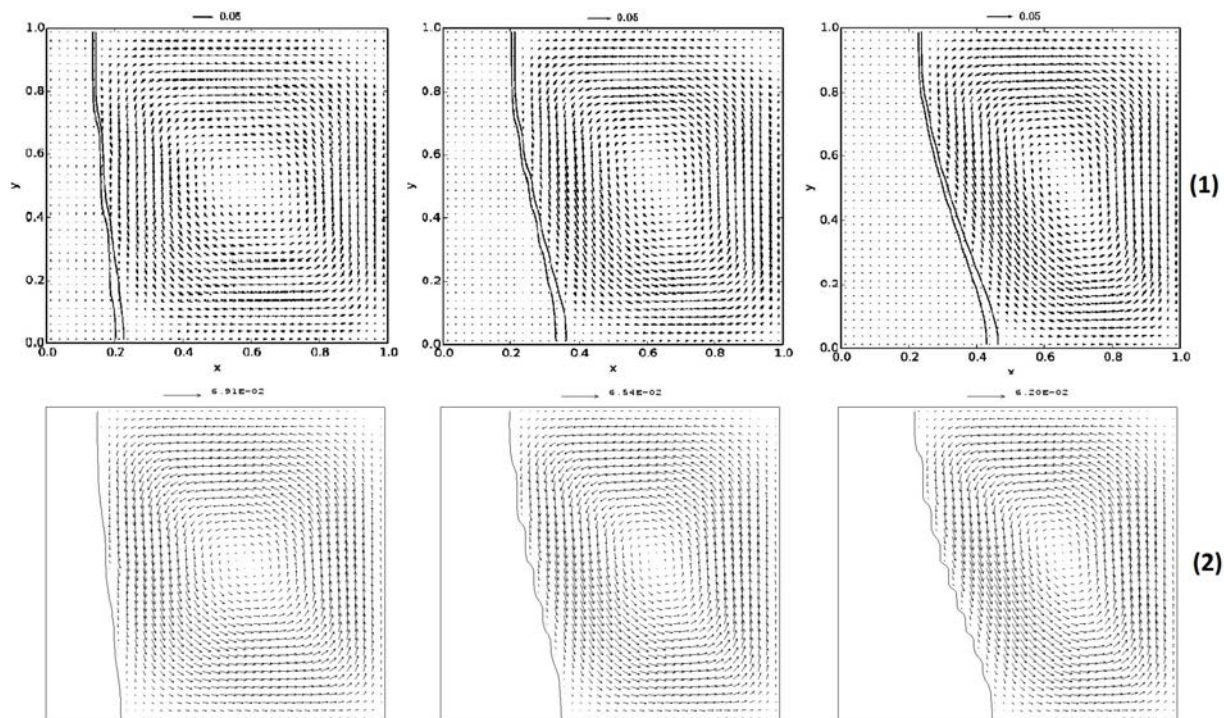


Figura 4: simulação B. Campo de velocidades e frente de solidificação, $t = 600s$, $t = 900s$ e $t = 1800s$.

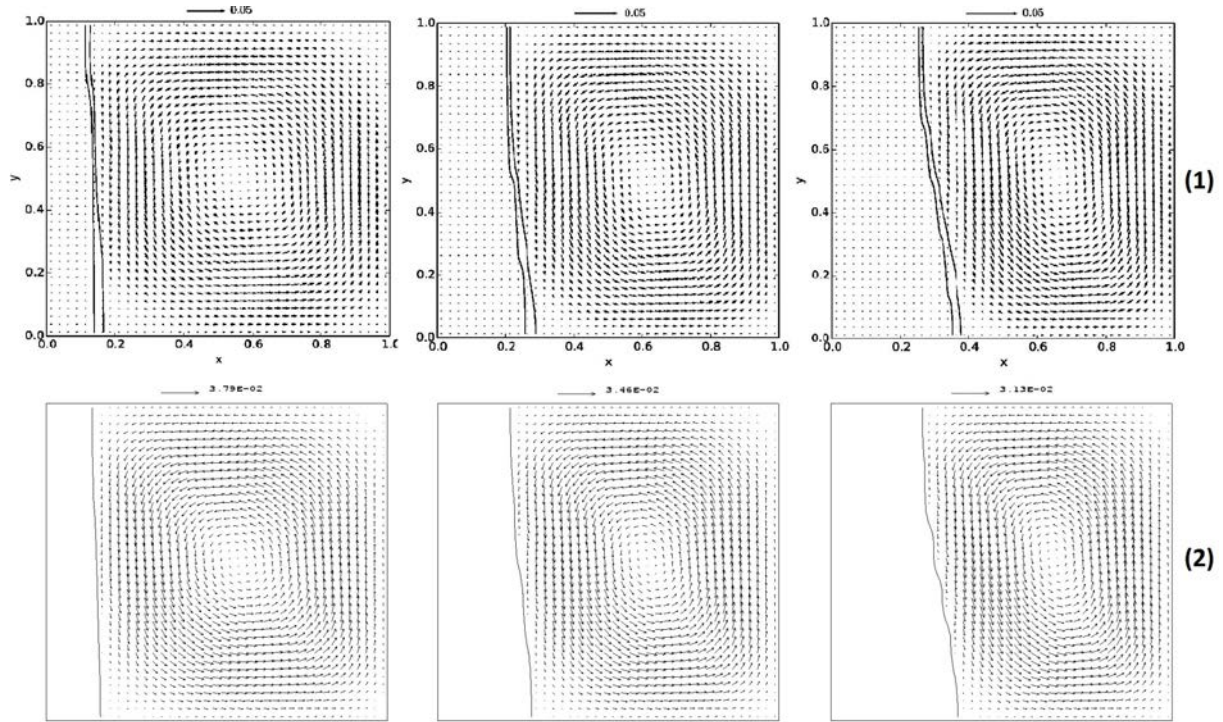


Figura 5: simulação C. Campo de velocidades e frente de solidificação, $t = 600s$, $t = 900s$ e $t = 1800s$.

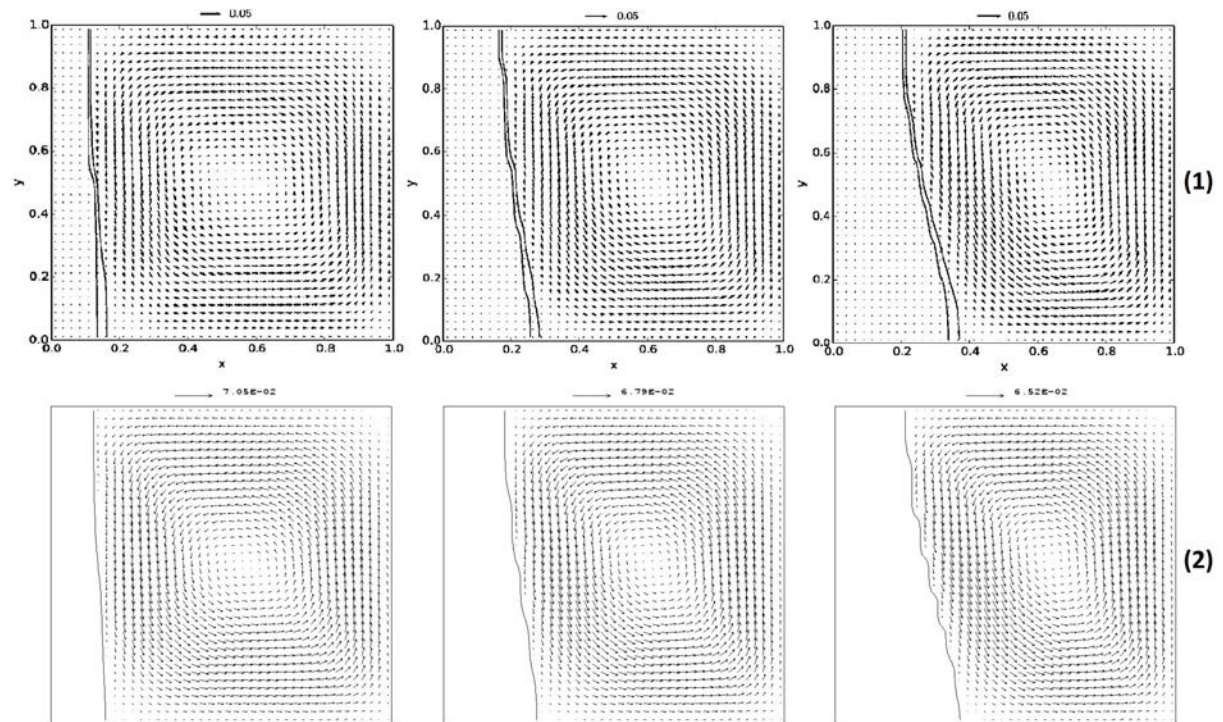


Figura 6: simulação D. Campo de velocidades e frente de solidificação, $t = 600s$, $t = 900s$ e $t = 1800s$.

Em termos de comparação e qualidade do código implementado, a inspeção das Figs. (3), a (6) permite verificar boa concordância entre os resultados expostos por Argentieri et al. (2003) e o código do presente trabalho.

Em termos de características de cada simulação, observa-se que a variação do número de Rayleigh (de 10^4 para 3×10^4) afeta a convecção natural na parte líquida da cavidade, causando uma deformação mais acentuada da frente de solidificação, com a parte inferior da cavidade solidificando-se em proporção maior que na parte superior da cavidade. Por outro lado, a variação no número de Stefan (de 5 para 10), provoca uma taxa de solidificação mais lenta visto que a variação do número de Stefan indica se o processo será dominado pelo processo de transferência de calor ou pelo processo de mudança de fase.

A Fig. (7) mostra dois conjuntos de isotermas variando entre -0.5°C a 0.5°C , sendo (1) obtida pelo código implementado neste trabalho e (2) obtida por Argentieri et al. (2003). Os resultados são no instante de tempo $t = 1000s$ e empregando os dados da simulação A. A Fig. (8)

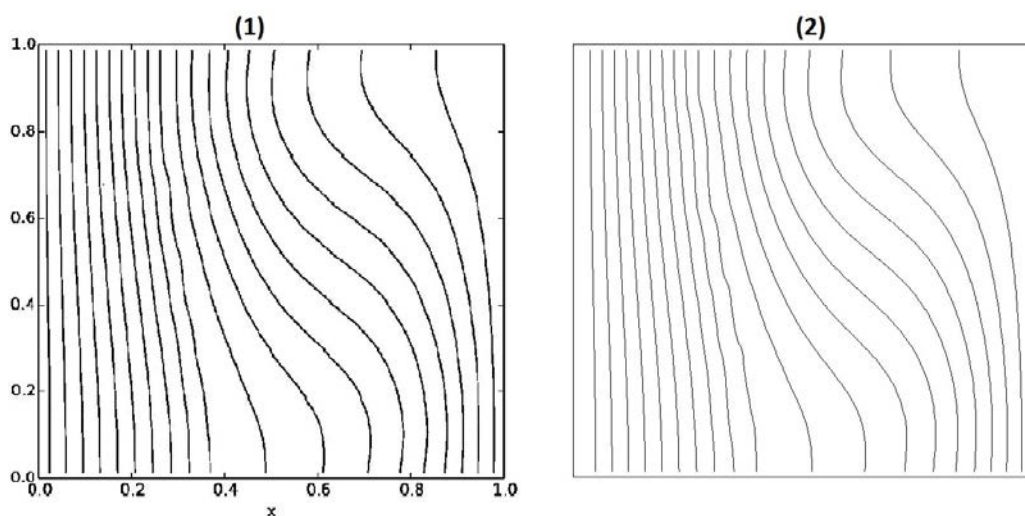


Figura 7: Isotermas no instante $t = 1000s$

exibe a frente de solidificação para o instante de tempo $t = 1000s$ com os dados da simulação A, sendo (1) obtida pelo código implementado neste trabalho e (2) obtida por Argentieri et al. (2003). Observando-se mais pelo aspecto qualitativo a Fig. (7) e a Fig. (8), observa-se boa

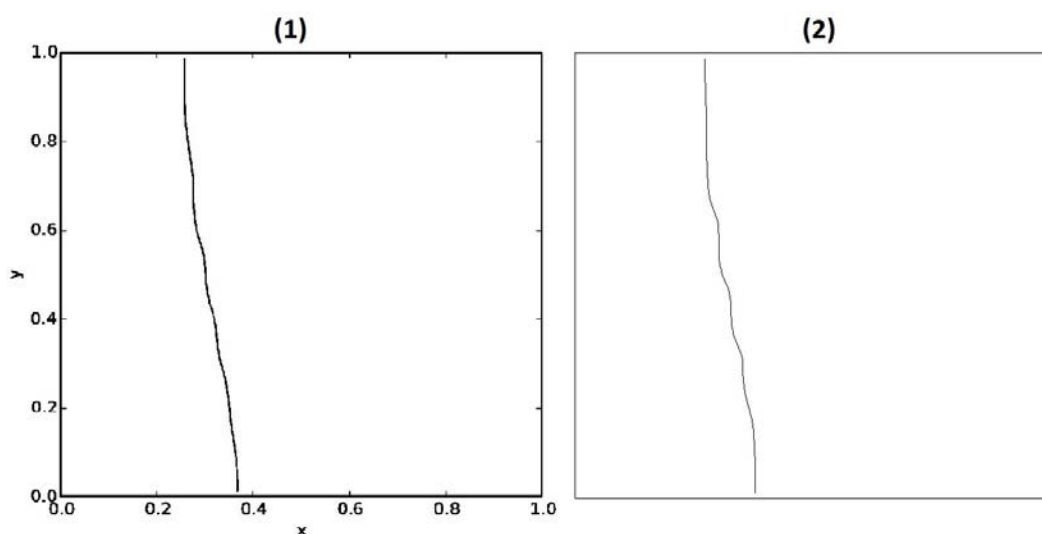


Figura 8: Frente de solidificação no instante $t = 1000s$

concordância entre o código implementado e os resultados obtidos por Argentieri et al. (2003), caracterizando um bom funcionamento do código implementado.

5 CONCLUSÕES

Apresentou-se neste trabalho uma formulação do método da entalpia-porosidade para tratamento de problemas de mudança de fase. Trata-se de um método de malha fixa baseado em modificações nas equações de movimento e na equação da energia através do emprego de termos fontes adicionais. Algoritmos para tratamento das não-linearidades e do acoplamento pressão-velocidade presentes nas equações de movimento também foram apresentados. Com pequenas modificações, os algoritmos SIMPLE, SIMPLEC e SIMPLER são implementados dando origem ao método da entalpia-porosidade através das relações e dos termos fonte apresentados.

Um código em Python foi desenvolvido e implementado e através da comparação dos resultados obtidos com os resultados encontrados na literatura pode ser avaliada a qualidade das soluções obtidas.

Uma melhoria significativa no código implementado é uma das propostas de continuação desse trabalho. Deseja-se incorporar em sua estrutura o tratamento para malhas não-estruturadas no intuito de simular problemas de mudança de fase com aplicações mais práticas, normalmente envolvendo domínios irregulares que não podem ser discretizados com precisão por malhas estruturadas. Também pretende-se estudar algumas melhorias para o método da entalpia-porosidade em si visto que pesquisas recentes mostram refinamentos no método.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem às agências de fomento CAPES e FAPEMIG pelo apoio fornecido para a realização deste trabalho.

REFERÊNCIAS

Alexiades, V., & Solomon, A., 1993. *Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes*. CRC Press, 1st edition.

Alexiades, V., Hannoun N., & Tsun M., 2003. *Tin melting: effect of grid size and scheme on the numerical solution*. Eletronic Journal on Differential Equations and Computational Simulations, Conference 10, pp. 55-69.

Argentieri, H. G., & Ismail, K. A. R., 2003. *Enthalpy method for convection solidification in square cavity*. 1st Symposium of Phoenics Users, 2003

Brent, A., Voller, V., & Reid, K., 1988. *The Enthalpy-Porosity technique for modeling convection-diffusion phase change: Application to the melting of a pure metal*. Numerical Heat Transfer, vol. 13, issue 3, pp. 297-318.

Ferziger, J., & Peric, M., 2002. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 3rd edition.

- Gartling, D., 1980. *Finite Element analysis of convective heat transfer problems with change of phase*. Computer Methods in Fluids, pp. 257-284.
- Morgan, K., 1981. *A numerical analysis of freezing and melting with convection*. Comp. Meth. Appl. Engng. vol. 28, pp. 275-284.
- Odone, M., Toledo, E., Barra, L., 2014. *Estudos numéricos na solução de problemas de mudança de fase*. Universidade Federal de Juiz de Fora - Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional. Dissertação MSc., 2014.
- Odone, M., Toledo, E., Barra, L., & Silva, C., 2013. *Um estudo numérico sobre o método entalpia-porosidade na solução de problemas de mudança de fase*. XXXIV Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering, XXXII CILAMCE.
- Patankar, S., 1980. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Taylor & Francis, 1st edition.
- Rady, M., & Mohanty, A., 1996. *Natural convection during melting and solidification of pure metals in a cavity*. Numerical Heat Transfer, Part A, vol. 29, pp. 49-63.
- Real, P., & Oliveira, C., 2003. *Modelação numérica de problemas térmicos envolvendo mudança de fase*. Rev. Int. Mét. Num. Cál. Dis. Ing., vol. 19, 2, pp. 171-196.
- Souza, S., 2002. *Simulação numérica do processo de fusão e solidificação da água no interior de cilindros*. Universidade Federal do Rio Grande do Sul - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. Tese DSc., 2002.
- Sun, D., & Garimella, S., 2007. *Numerical and experimental investigation of solidification shrinkage*. Numerical Heat Transfer, part A, vol. 52, pp. 145-162.
- Versteeg, H., & Malalasekera, W., 2007. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method*. Prentice Hall, 2nd edition.
- Voller, V., Cross, M., & Markatos, N., 1987. *An enthalpy method for convection/diffusion phase change*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 24, pp. 271-284.
- Voller, V., Markatos, N., & Cross, M., 1985. *Techniques for accounting for the moving interface in convection/diffusion phase change*. Numerical Methods in thermal Problems, vol. 4, pp. 595-609.
- Voller, V., Markatos, N., & Cross, M., 1986. *Solidification in convection and diffusion*. Numerical Simulations of Fluid Flow and Heat/Mass Transfer Processes, pp. 425-432.
- Voller, V., & Prakash, C., 1987. *A fixed grid numerical modeling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems*. Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 30, n. 8, pp. 1709-1719.