

Modelação numérica de problemas térmicos envolvendo mudança de fase

Paulo Vila Real

Secção Autónoma de Engenharia Civil
Universidade de Aveiro
3810 Aveiro, Portugal
Tel.: 351-234-37 00 49, Fax: 351-234-37 00 94
e-mail: pvreal@civil.ua.pt

Carlos M. Oliveira

Departamento de Engenharia Mecânica
Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto
Roberto Frias, 4200-465 Porto, Portugal
e-mail: cmoliv@fe.up.pt

Sumário

Desenvolveu-se um programa computacional baseado no método dos elementos finitos para análise não linear do problema da condução de calor que permite simular a libertação de calor latente que acompanha a mudança de fase.

De entre os métodos mais utilizados para tratar a mudança de fase implementou-se o *método da entalpia* em que não é necessário considerar separadamente as regiões sólida e líquida, podendo a frente de solidificação ser obtida à posteriori com base nas temperaturas calculadas.

Faz-se um estudo comparativo das soluções obtidas com base em vários métodos de cálculo do calor específico do material em função da entalpia.

Palavras chave:

problemas térmicos, mudança de fase, método dos elementos finitos, método da entalpia.

NUMERICAL MODELLING OF THERMAL PROBLEMS WITH PHASE CHANGE

Summary

In this work a computer program based on the finite element method for non-linear analysis of conduction problems that allows for the simulation of the latent heat evolution accompanying the phase change has been developed.

Among the methods dealing with phase change, the *enthalpy method* has been implemented. With this method it is not necessary to consider separately the solid and liquid regions being the solidification front evaluated after knowing the temperature field.

Several techniques used for the evaluation of the specific heat function of the enthalpy has been compared.

Keywords:

thermal problems, phase change, finite element method, enthalpy method.

INTRODUÇÃO

Nos os últimos anos o interesse em relação à simulação numérica de problemas que envolvem mudança de fase tem crescido muito, uma vez que esta está presente em inúmeros processos de interesse tecnológico, tais como a solidificação de ferros fundidos ou outros materiais, os tratamentos térmicos (têmpera e revenido) de peças metálicas, a soldadura, a cura do betão, etc.

Na indústria da fundição o conhecimento da localização das fases líquida e sólida, durante o arrefecimento do metal vazado, é de grande importância, uma vez que, com base nestas informações, se pode antever a possibilidade de formação de vazios e porosidades, microsegregação e certas microestruturas e, se necessário, ajustar a forma da moldação ou colocar arrefecedores ou alimentadores, para melhorar a qualidade das peças vazadas, diminuindo assim o número de peças rejeitadas.

As soluções analíticas disponíveis, tratam apenas problemas muito simples de condução unidireccional de calor, com geometrias semi-infinitas e condições de fronteira elementares, não permitindo a resolução dos problemas que surgem na prática. Por outro lado, os métodos experimentais são geralmente dispendiosos e muitas vezes imprecisos, compreendendo-se, assim, o interesse que a simulação tem vindo a adquirir.

Podem ser usadas várias técnicas na modelação numérica de problemas que envolvem solidificação. Tradicionalmente tem sido usado o Método das Diferenças Finitas, no entanto nos últimos anos tem-se verificado uma tendência crescente na aplicação do Método dos Elementos Finitos. A razão desta tendência tem a ver com a facilidade com que este último método permite tratar problemas com geometrias e condições de fronteira complexas.

Existem essencialmente dois grandes grupos de métodos numéricos para simulação da mudança de fase: os que utilizam malhas de elementos fixas^{2-51,61-64,69-72} e aqueles que utilizam malhas deformáveis⁵²⁻⁶⁰. A utilização de um ou de outro depende basicamente do tipo de solidificação que ocorre.

Na referência 38 Voller *et al.* identifica três tipos de solidificação possíveis (Figura 1):

- Caso a) *Distinta*: a região de mudança de fase é constituída por duas fases distintas, a fase sólida e a fase líquida, separadas por uma curva contínua, dita *frente de solidificação*; por exemplo, o congelamento da água, a rápida solidificação de substâncias puras ou de ligas metálicas de composição eutética.
- Caso b) *Liga*: a região de mudança de fase tem uma estrutura cristalina, do tipo *colunar* e/ou *equiaxial*, e a interface sólido/líquido tem uma forma complexa não necessariamente contínua; por exemplo, a solidificação de muitas ligas metálicas.
- Caso c) *Contínua*: as fases sólida e líquida estão completamente dispersas sobre a região de mudança de fase, não sendo possível distinguir a interface entre as duas fases; por exemplo, a solidificação de polímeros ou do vidro.

Em materiais puros e nas ligas metálicas de composição eutética, caso a), a interface sólido-líquido corresponde a uma curva isotérmica, sendo, por isso, conveniente ter parte da malha de elementos finitos coincidente com a frente de solidificação e distorcer a malha em ambas as fases à medida que a fronteira entre elas se desloca. Nestes métodos a frente de solidificação é seguida continuamente e a libertação de calor latente é tratada como uma condição de fronteira móvel⁹.

Quando a mudança de fase ocorre dentro de um intervalo de temperaturas, casos b) e c), como acontece em muitas ligas metálicas, são obrigatoriamente utilizados os métodos de malha fixa.

Deve salientar-se que enquanto a aplicação dos métodos de malha deformável não é adequada a materiais do segundo tipo referidos anteriormente^{3,9,29,38}, para os materiais com solidificação isotérmica os métodos de malha fixa podem ainda ser utilizados.

Figura 1. Classificação dos diversos tipos de solidificação³⁸

Nos métodos de malha fixa, o problema da libertação do calor latente que acompanha a solidificação tem vindo a ser tratado de várias maneiras distintas: ou é incorporado directamente na definição do calor específico c_p do material^{9,12,36,47}, o qual é artificialmente aumentado sobre o intervalo em que ocorre a mudança de fase (*método directo*), ou se define o calor específico à custa da entalpia H do material^{2-12,20,25-30,33-39,47-49} (*método da entalpia*), ou é associado à parcela correspondente à geração interna de calor $\dot{Q}$ na equação de condução de calor (1)^{40,61-64}, ou ainda se inclui o calor latente numa parcela adicional à equação de condução de calor e que se designa habitualmente por “termo de fonte de calor”^{22,38,40} (enquadrando-se estes dois últimos procedimentos nos designados *métodos da fonte de calor*).

Podemos assim resumir os métodos mais frequentemente encontrados na literatura nos seguintes tipos:

- Método directo
- Método da entalpia
- Método da fonte de calor

Neste trabalho, dada a frequência com que aparece na literatura e também devido à fiabilidade que os vários autores lhe reconhecem, adoptamos o método da entalpia, em que o calor específico é definido, como veremos, em função da entalpia do material.

EQUAÇÕES GERAIS E CONDIÇÕES DE FRONTEIRA

A transmissão de calor por condução é regida pela equação diferencial

$$\nabla(k\nabla T) + \dot{Q} = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1)$$

em que k é a conductibilidade térmica, $\dot{Q}$ é o calor gerado internamente por unidade de volume e de tempo, ρ a massa específica, c_p o calor específico, T a temperatura e t o tempo. O campo de temperaturas que satisfaz esta equação num domínio Ω deve satisfazer certas condições de fronteira, que podem ser, temperaturas prescritas numa parte Γ_T da fronteira, fluxo de calor prescrito $\bar{q}$ numa outra parte Γ_q da fronteira, transmissão de calor por convecção entre uma parte Γ_c da fronteira à temperatura T e o meio ambiente à temperatura T_∞

$$q_c = h_c(T - T_\infty) \quad \text{em } \Gamma_c \quad (2)$$

em que h_c é o coeficiente de transmissão de calor por convecção, transmissão de calor por radiação entre uma parte Γ_r da fronteira à temperatura absoluta T e a superfície absorvente à temperatura absoluta T_a

$$q_r = \beta\varepsilon(T^4 - T_a^4) = \underbrace{\beta\varepsilon(T^2 + T_a^2)(T + T_a)}_{h_r}(T - T_a) = h_r(T - T_a) \quad \text{em } \Gamma_r \quad (3)$$

em que 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 da transferência de calor na fronteira se processar simultaneamente por convecção e por radiação e em particular se for, $T_\infty = T_a$, pode escrever-se

$$q_{cr} = q_c + q_r = h_c(T - T_\infty) + h_r(T - T_a) = h_{cr}(T - T_\infty) \quad (4)$$

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

DISCRETIZAÇÃO POR ELEMENTOS FINITOS E INTEGRAÇÃO NO TEMPO

Aplicando à eq. (1) e às suas condições de fronteira, o método dos resíduos pesados, usando elementos finitos Ω^e para discretizar o domínio Ω , uma formulação fraca e o método de Galerkin, obtém-se⁸⁰ o seguinte sistema de equações diferenciais:

$$\mathbf{KT} + \mathbf{C}\dot{\mathbf{T}} = \mathbf{F} \quad (5)$$

onde

$$K_{lm} = \sum_{e=1}^E \int_{\Omega^e} \left(\frac{\partial N_l}{\partial x} k \frac{\partial N_m}{\partial x} + \frac{\partial N_l}{\partial y} k \frac{\partial N_m}{\partial y} \right) d\Omega^e + \sum_{e=1}^H \int_{\Gamma_h^e} h_{cr} N_l N_m d\Gamma_h^e \quad (6)$$

$$C_{lm} = \sum_{e=1}^E \int_{\Omega^e} \rho c_p N_l N_m d\Omega^e \quad (7)$$

$$F_l = \sum_{e=1}^E \int_{\Omega^e} N_l \dot{Q} d\Omega^e - \sum_{e=1}^Q \int_{\Gamma_h^e} N_l \bar{q} d\Gamma_h^e + \sum_{e=1}^H \int_{\Gamma_h^e} N_l h_{cr} T_\infty d\Gamma_h^e \quad (8)$$

em que E é o número total de elementos, Q é o número de elementos com fronteira do tipo Γ_q , H é o número de elementos com fronteiras do tipo Γ_c e (ou) Γ_r e N_l e N_m são as habituais funções de forma.

Adoptando uma discretização do tempo através de diferenças finitas o sistema de equações diferenciais ordinárias (5) resulta na seguinte fórmula de recorrência

$$\hat{\mathbf{K}}_{n+\alpha} \mathbf{T}_{n+\alpha} = \hat{\mathbf{F}}_{n+\alpha}; \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (9)$$

onde

$$\hat{\mathbf{K}}_{n+\alpha} = \mathbf{K}_{n+\alpha} + \frac{1}{\alpha \Delta t} \mathbf{C}_{n+\alpha} \quad (10)$$

$$\hat{\mathbf{F}}_{n+\alpha} = \mathbf{F}_{n+\alpha} + \frac{1}{\alpha \Delta t} \mathbf{C}_{n+\alpha} \mathbf{T}_n \quad (11)$$

Resolvido o sistema de equações (9), para $\mathbf{T}_{n+\alpha}$, no instante $t_{n+\alpha}$, o valor de $\mathbf{T}$ no final do intervalo de tempo Δt , ou seja, no instante t_{n+1} é dado por

$$\mathbf{T}_{n+1} = \frac{1}{\alpha} \mathbf{T}_{n+\alpha} + \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right) \mathbf{T}_n \quad (12)$$

sendo estas as condições iniciais quando se avança para o intervalo de tempo seguinte. Fazendo variar o parâmetro α , obtêm-se vários esquemas de integração no tempo, sendo os mais usuais os correspondentes a $\alpha = 1/2$ (Crank–Nicolson), $\alpha = 2/3$ (Galerkin) e $\alpha = 1$ (Euler–Backward)⁸⁰.

MODELAÇÃO NUMÉRICA DA MUDANÇA DE FASE. O MÉTODO DA ENTALPIA

Um dos métodos mais utilizados quando se usam malhas fixas de elementos finitos é o método da entalpia, no qual não é necessário considerar-se separadamente as região sólida e a região líquida, podendo a frente de solidificação ser obtida a posteriori com base nas temperaturas calculadas. A libertação de calor latente que acompanha a solidificação é tratada em termos do calor específico, função da temperatura, sendo para o efeito introduzida uma nova variável: a entalpia H definida pela a referência 65

$$H(T) = \int_{T_{\text{ref}}}^T c_p(T) dT \quad (13)$$

Assim para materiais puros a entalpia pode ser definida do seguinte modo

$$H(T) = \begin{cases} \int_{T_{\text{ref}}}^T c_s(T) dT & T < T_f \\ \int_{T_{\text{ref}}}^{T_f} c_s(T) dT + L + \int_{T_f}^T c_l(T) dT & T \geq T_f \end{cases} \quad (14)$$

onde T_{ref} é a temperatura de referência e T_f 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. No caso de materiais em que a mudança de fase ocorre num intervalo de temperaturas $\Delta T = T_l - T_s$,

a entalpia vem definida pela a referência 9

$$H(T) = \begin{cases} \int_{T_{\text{ref}}}^T c_s(T) dT & T < T_s \\ \int_{T_{\text{ref}}}^{T_s} c_s(T) dT + \int_{T_s}^T \left[\frac{dL}{dT} + c_f(T) \right] dT & T_s \leq T \leq T_l \\ \int_{T_{\text{ref}}}^{T_s} c_s(T) dT + L + \int_{T_s}^{T_l} c_f(T) dT + \int_{T_l}^T c_l(T) dT & T \geq T_l \end{cases} \quad (15)$$

em que T_s e T_l são, respectivamente, as temperaturas *solidus* e *liquidus*, 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 o calor gerado internamente por unidade de volume e tempo $\dot{Q}$, a equação de condução de calor pode ser escrita

$$\nabla(k\nabla T) = \rho \frac{\partial H}{\partial t} \quad (16)$$

Atendendo a que o calor específico se relaciona com a entalpia específica de acordo com a referência 65

$$c_p = \frac{dH}{dT} \quad (17)$$

e ainda que a entalpia é apenas função da temperatura⁹

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{dH}{dT} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (18)$$

a equação (16) pode ser escrita na forma mais usual, equivalente à equação (1),

$$\nabla(k\nabla T) = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (19)$$

Neste trabalho utilizou-se a equação (19), sendo o problema da libertação do calor latente tratado à custa de uma correcta definição do calor específico nela interveniente. Numa primeira aproximação pode fazer-se o cálculo directo do calor específico (*método directo*) dado pela equação (17) a partir da equação (15). Assim, considerando-se que a libertação do calor latente ocorre de maneira uniforme ao longo do intervalo de mudança de fase $T_s \leq T \leq T_l$, ou seja

$$\frac{dL}{dT} = \frac{L}{T_l - T_s} \quad (20)$$

o calor específico vem dado por

$$c_p = \begin{cases} c_s & T < T_s \\ c_f + \frac{L}{T_l - T_s} & T_s \leq T \leq T_l \\ c_l & T > T_l \end{cases} \quad (21)$$

No caso de materiais com solidificação isotérmica, este cálculo directo do calor específico requer a utilização de um intervalo de temperaturas fictício, $\Delta T = T_l - T_s$, sobre o qual é suposto ocorrer a libertação de calor latente. Este intervalo de temperaturas deve, no entanto, ser considerado de pequena dimensão, de modo a evitar que a simulação numérica se afaste muito do problema de solidificação original.

Figura 2. Variação do calor específico e da entalpia com a temperatura

Por outro lado há a possibilidade da temperatura de um dado nó avançar a temperatura de mudança de fase T_f , durante um único intervalo de tempo, se o intervalo fictício de mudança de fase considerado for muito pequeno, a malha de elementos finitos não for suficientemente densa ou ainda se o intervalo de tempo Δt considerado na análise transitória do problema for muito grande⁹.

Um outro problema numérico que pode ocorrer quando se usa o calor específico, tal como está definido na equação (21), tem a ver com o facto de a curva do calor específico em função da temperatura se assemelhar à função Delta de Dirac, na zona de mudança de fase como mostra a Figura 2, em que a área tracejada corresponde precisamente ao calor latente L , libertado quando ocorre a mudança de fase.

Como consequência, durante o processo de solidificação a zona de mudança de fase pode estar situada entre pontos de integração, como mostra a Figura 3.

Figura 3. Elemento finito, mostrando uma possível localização da frente de solidificação

Nesta situação a contribuição do elemento para os termos da matriz que contêm o calor específico, eq. (7), será subestimada¹², já que, como se pode verificar na Figura 3, o calor específico nos pontos de integração toma valores correspondentes à fase sólida e à fase líquida apenas, apesar de no interior do elemento ocorrer mudança de fase.

Para evitar erros numéricos deste tipo, encontram-se na literatura várias técnicas para a determinação do calor específico, todas elas fazendo uso da entalpia, a qual é uma função

mais suave que o calor específico, como se pode ver na Figura 2. Assim, interpolando a entalpia no interior dos elementos finitos da maneira habitual

$$H(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^n N_i(x, y, z) H_i(t) \quad (22)$$

em que N_i são as funções de forma e H_i os valores nodais da entalpia, surgiram vários métodos para a obtenção do calor específico.

- Comini, entre outros¹⁰, sugere

$$c_p = \frac{1}{3} \left[\frac{\frac{\partial H}{\partial x}}{\frac{\partial T}{\partial x}} + \frac{\frac{\partial H}{\partial y}}{\frac{\partial T}{\partial y}} + \frac{\frac{\partial H}{\partial z}}{\frac{\partial T}{\partial z}} \right] \quad (23)$$

- Del Giudice utiliza⁹

$$c_p = \frac{\left[\left(\frac{\partial H}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial H}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial H}{\partial z} \right) \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right) \right]}{\left[\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^2 \right]} \quad (24a)$$

ou de forma mais compacta

$$c_p = \frac{\nabla H \cdot \nabla T}{\nabla T \cdot \nabla T} \quad (24b)$$

- Lemmon, por sua vez⁴⁵, define o calor específico como

$$c_p = \left\{ \frac{\left[\left(\frac{\partial H}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial H}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial H}{\partial z} \right)^2 \right]}{\left[\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)^2 \right]} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (25a)$$

ou ainda

$$c_p = \sqrt{\frac{\nabla H \cdot \nabla H}{\nabla T \cdot \nabla T}} \quad (25b)$$

Estes três métodos acabados de apresentar foram por nós implementados, tendo fornecido resultados muito semelhantes, como teremos oportunidade de constatar no parágrafo seguinte.

De notar que em zonas do domínio em que o campo de temperaturas é uniforme, situação muito frequente no início do processo transitório, não é aplicável qualquer dos métodos atrás referido, sendo necessário, nestes casos, recorrer ao cálculo directo do calor específico dado pela equação (21).

- Outro processo de se obter o calor específico foi apresentado por Morgan¹¹, tendo recorrido a diferenças finitas para calcular a derivada dH/dT no instante t_n

$$(c_p)_n = \frac{H_n - H_{n-1}}{T_n - T_{n-1}} \quad (26a)$$

Este último método foi também por nós implementado, sendo no entanto o calor específico calculado no instante $t_{n+\alpha}$ de acordo com

$$(c_p)_{n+\alpha} = \frac{H_{n+\alpha} - H_n}{T_{n+\alpha} - T_n} \quad (26b)$$

Se os primeiros métodos, equações (23) a (25), não eram aplicáveis a campos de temperatura uniformes, esta última equação (26), não se pode utilizar em campos de temperatura constantes $T_{n+1} = T_n$, situação que ocorre, por exemplo, quando se atinge o regime permanente, sendo neste caso também necessário recorrer ao cálculo directo do calor específico dado pela equação (21).

No método da entalpia aqui apresentado equações (23) a (26), contrariamente ao que acontece no método directo eq. (21), a mudança de fase é sempre contemplada. No entanto, se se pretender ter em conta de maneira precisa a libertação de calor latente, o intervalo de tempo Δt deverá ser tal que a variação de temperatura correspondente seja inferior ao intervalo de mudança de fase, $\Delta T = T_l - T_s$ (Figura 4a e 4b). Para o caso de um material puro ou liga de composição eutética a aproximação é sempre mais grosseira⁴⁷ (Figura 4c).

Figura 4. Influência do intervalo de tempo Δt na representação da mudança de fase (*método da entalpia*)

EXEMPLOS NUMÉRICOS

Apresentam-se em seguida dois exemplos numéricos, tendo um deles solução teórica conhecida.

O primeiro exemplo, para o qual se conhece a solução teórica⁸⁰, trata a solidificação de uma placa semi-infinita, constituída por uma substância pura, inicialmente a uma temperatura superior à temperatura de mudança de fase, $T_i > T_f$.

O segundo exemplo pretende simular o arrefecimento e solidificação de um cilindro longo cujas propriedades térmicas se consideraram iguais às do ferro fundido, em que a mudança de fase ocorre sobre um intervalo de temperatura definido.

Exemplo 1: Solidificação de uma placa semi-infinita

Este exemplo foi previamente estudado nas referências 21, 23, 80, 81 e trata, como se disse, a solidificação de uma placa semi-infinita, inicialmente na fase líquida, à temperatura $T_i = 0\text{ }^{\circ}\text{C}$, como mostra a Figura 5. No instante inicial a temperatura da fronteira é bruscamente reduzida e mantida constante em $T_w = -45\text{ }^{\circ}\text{C}$. Considerou-se que a conductibilidade, o calor específico e a massa específica das fases líquida e sólida eram iguais e constantes, como mostra a Tabela I.

Figura 5. Domínio de solução para a análise da solidificação de uma placa líquida semi-infinita

Conductibilidade	$k_s = k_l = 1,08$	[W/mK]
Massa específica	$\rho_s = \rho_l = 1,0$	[kg/m ³]
Calor específico	$c_s = c_l = 1,0$	[J/kgK]
Calor latente	$L = 70,26$	[J/kg]
Temperatura inicial	$T_i = 0,0$	[$^{\circ}\text{C}$]
Temperatura na fronteira	$T_w = -45,0$	[$^{\circ}\text{C}$]
Temperatura de mudança de fase	$T_f = -1,0$	[$^{\circ}\text{C}$]

Tabla I. Propriedades térmicas e condições de fronteira para o Exemplo 1

O domínio foi discretizado em 24 elementos de oito nós de igual dimensão e todos os resultados apresentados foram obtidos utilizando-se o esquema de Galerkin ($\alpha = 2/3$).

Como condições de fronteira consideramos temperatura fixa, $T_w = -45$ °C, na face exterior e todas as outras faces foram consideradas isoladas ($\partial T/\partial n = 0$).

A solução teórica deste problema⁸⁰ (Apêndice 1), correspondente a um ponto localizado em $x = 1$ m, é

$$T(t) = \begin{cases} -45 + \frac{44}{\text{erf}(\lambda)} \text{erf}\left(\frac{1}{2\sqrt{1,08t}}\right) & X(t) > 1 \\ -1 & X(t) = 1 \\ -\frac{1}{\text{erfc}(\lambda)} \text{erfc}\left(\frac{1}{2\sqrt{1,08t}}\right) & X(t) < 1 \end{cases} \quad (27)$$

em que $\lambda = 0,506465$ é solução da equação

$$\frac{1}{e^{\lambda^2} \text{erf}(\lambda)} - \frac{1}{44e^{\lambda^2} \text{erfc}(\lambda)} - \frac{70,26\sqrt{\pi\lambda}}{44} = 0 \quad (28)$$

sendo a posição da frente de solidificação dada por

$$X(t) = 2\lambda\sqrt{1,08t} \quad (29)$$

Nas Figuras 6 e 7 apresenta-se a influência de $\Delta T = T_i - T_s$, o intervalo fictício de temperaturas em que se supõe ocorrer a mudança de fase, quando se utiliza, respectivamente, o método de Lemmon, eq. (25) e o método de Morgan, eq. (26) e um intervalo de tempo $\Delta t = 0,01$ s. Como se pode verificar nessas duas figuras, em que se representa a evolução das temperaturas em $x = 1,0$ m, o método de Morgan é mais sensível à escolha do intervalo de temperaturas ΔT .

Figura 6. Evolução da temperatura em $x = 1,0$ m, para o Exemplo 1. Resultados obtidos com o método de Lemmon eq. (25) e $\Delta t = 0,01$ s: valores obtidos com $\Delta T = 1$ °C ($\square$); valores obtidos com $\Delta T = 2$ °C ($\diamond$); solução teórica (-)

Figura 7. Evolução da temperatura em $x = 1,0$ m, para o Exemplo 1. Resultados obtidos com o método de Morgan eq. (26) e $\Delta t = 0,01$ s: valores obtidos com $\Delta T = 1$ °C ($\square$); valores obtidos com $\Delta T = 2$ °C ($\diamond$); solução teórica (-)

Figura 8. Evolução da temperatura em $x = 1,0$ m, para o Exemplo 1. Resultados obtidos com o método de Lemmon eq. (25) e $\Delta T = 1$ °C: valores obtidos com $\Delta t = 0,1$ s ($\diamond$); valores obtidos com $\Delta t = 0,01$ s ($\square$); valores obtidos com $\Delta t = 0,001$ s ($\circ$); solução teórica (—)

Na Figura 8 apresentam-se os resultados obtidos com $\Delta T = 1$ °C, o método de Lemmon e vários intervalos de tempo Δt , com o objectivo de testar a influência deste último nos resultados. Como era de esperar e de acordo com o que se disse sobre a Figura 4, quanto maior o intervalo de tempo utilizado maior é o erro por defeito da solução obtida. A Tabela II é a expressão numérica do gráfico da Figura 8.

Tempo (s)	$\Delta t = 0,1$ s (°C)	$\Delta t = 0,01$ s (°C)	$\Delta t = 0,001$ s (°C)	Sol. teórica (°C)
0,00	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
0,10	-0,05754	-0,02606	0,02461	-0,06549
0,20	-0,30736	-0,09556	0,00403	-0,27044
0,30	-0,35547	-0,12257	-0,06827	-0,45193
0,40	-0,54726	-0,29170	-0,22824	-0,59515
0,50	-0,50225	-0,25896	-0,17474	-0,70894
0,60	-1,38810	-0,43854	-0,36766	-0,80137
0,70	-3,38070	-0,32355	-0,37203	-0,87810
0,80	-4,96260	-0,72188	-0,55342	-0,94298
0,90	-6,23010	-1,79710	-1,40040	-0,99874
1,00	-7,86600	-3,54300	-2,94150	-2,87360
1,10	-9,20110	-5,02250	-4,73450	-4,56767
1,20	-10,15600	-6,27200	-5,88050	-6,07404
1,30	-11,24700	-7,69690	-7,38250	-7,42474
1,40	-12,18900	-8,95930	-8,56010	-8,64468
1,50	-13,04300	-9,90060	-9,67110	-9,75356
1,60	-13,75700	-10,73900	-10,49600	-10,76720
1,70	-14,38900	-11,72100	-11,46700	-11,69850
1,80	-15,08000	-12,55300	-12,31600	-12,55790
1,90	-15,75000	-13,36500	-13,16600	-13,35420
2,00	-16,34900	-13,99300	-13,82300	-14,09470

Tabla II. Temperatura em $x = 1,0$ m. Exemplo 1, com o método de Lemmon e $\Delta T = 1$ °C

Na Tabela III comparam-se os valores obtidos quando se consideram vários intervalos de mudança de fase, desde a utilização de um intervalo nulo, $\Delta T = 0$ °C, até um intervalo de mudança de fase de 2 °C.

Tempo (s)	$\Delta T = 0,0$ °C (°C)	$\Delta T = 0,25$ °C (°C)	$\Delta T = 0,5$ °C (°C)	$\Delta T = 1,0$ °C (°C)	$\Delta T = 2,0$ °C (°C)	Sol. teor. (°C)
0,00	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
0,10	-0,09784	-0,05688	-0,05673	-0,02606	0,01176	-0,06549
0,20	-0,21866	-0,15353	-0,13076	-0,09556	0,03067	-0,27044
0,30	-0,23904	-0,24488	-0,14929	-0,12257	0,04782	-0,45193
0,40	-0,48054	-0,47061	-0,38117	-0,29170	0,01536	-0,59515
0,50	-0,50189	-0,48143	-0,33367	-0,25896	0,01247	-0,70894
0,60	-0,70919	-0,69340	-0,60015	-0,43854	-0,02288	-0,80137
0,70	-0,53940	-0,50452	-0,39219	-0,32355	-0,05550	-0,87810
0,80	-1,26180	-1,12430	-0,90615	-0,72188	-0,36283	-0,94298
0,90	-2,67140	-2,49580	-2,10070	-1,79710	-1,34870	-0,99874
1,00	-4,78180	-4,61790	-4,05840	-3,54300	-2,91940	-2,87360
1,10	-6,52390	-5,86790	-5,28530	-5,02250	-4,69040	-4,56767
1,20	-7,69260	-7,46180	-6,90220	-6,27200	-5,85330	-6,07404
1,30	-9,11850	-8,76050	-8,05240	-7,69690	-7,23650	-7,42474
1,40	-10,10800	-9,81320	-9,35040	-8,95930	-8,48280	-8,64468
1,50	-11,33000	-10,81300	-10,20500	-9,90060	-9,64280	-9,75356
1,60	-12,18900	-11,78500	-11,25800	-10,73900	-10,51100	-10,76720
1,70	-13,13300	-12,68700	-12,11300	-11,72100	-11,39800	-11,69850
1,80	-13,88800	-13,48600	-13,01700	-12,55300	-12,31400	-12,55790
1,90	-14,72700	-14,13300	-13,71400	-13,36500	-13,12600	-13,35420
2,00	-15,36400	-14,90100	-14,35600	-13,99300	-13,86100	-14,09470

Tabela III. Temperatura em $x = 1,0$ m. Exemplo 1, com o método de Lemmon e $\Delta t = 0,01$ s

Exemplo 2: Solidificação de um cilindro longo de ferro fundido

Este exemplo trata o arrefecimento e a solidificação de um cilindro de ferro fundido, como mostra a Figura 9, com o objectivo de se analisar o comportamento dos vários métodos implementados, quando aplicados a materiais em que a mudança de fase ocorre sobre um intervalo de temperaturas,

Figura 9. Domínio de solução e condições de fronteira para o Exemplo 2

Fez-se uma análise axissimétrica do problema, considerando para o efeito uma faixa radial, como mostra a Figura 9. Discretizou-se o domínio em 10 elementos finitos de 8 nós de igual dimensão, utilizou-se o esquema de Galerkin ($\alpha = 2/3$) e um intervalo de tempo de $\Delta t = 2,0$ s. Admitiu-se que a transferência de calor para o meio ambiente se processava por convecção, sendo todas as outras fronteiras consideradas isoladas.

A Tabela IV resume as propriedades térmicas do ferro fundido, admitindo-se um teor em carbono de 3,96 %⁶⁸, bem como as condições de fronteira utilizadas.

Conductibilidade	$k = 45$	[W/mK]
Calor específico	$c_p = 816$	[J/kgK]
Massa específica	$\rho = 7200$	[kg/m ³]
Calor latente	$L = 230\,000$	[J/kg]
Temperatura inicial	$T_i = 1350$	[°C]
Temperatura liquidus	$T_l = 1182$	[°C]
Temperatura solidus	$T_s = 1147$	[°C]
Coef. de transm. por convecção	$h_c = 10\,000$	[W/m ² °C]
Temperatura ambiente	$T_\infty = 20$	[°C]

Tabla IV. Propriedades térmicas e condições de fronteira para o Exemplo 2

Dada a circunstância de em muitas situações se conhecerem as propriedades dos materiais sob a forma de tabelas em função da temperatura, foi necessário criar essa possibilidade no programa de elementos finitos desenvolvido. Com esta versão da entrada de dados o programa não calcula automaticamente a entalpia e o calor específico em função da temperatura, de acordo com as equações (15) e (21), respectivamente, sendo necessário fornecer os seus valores sob a forma de tabelas. Porque nos parece pertinente, no Apêndice 2 fornecemos as tabelas correspondentes ao calor específico e à entalpia relativas a este exemplo que estamos a analisar. Todas as outras propriedades foram consideradas constantes. O gráfico da Figura 10 mostra a curva de arrefecimento obtida para um ponto situado sobre o eixo do cilindro, tendo sido utilizado o método de Lemmon, eq. (25).

Figura 10. Evolução da temperatura do ponto A no eixo do cilindro, obtida com o método de Lemmon eq. (25) e $\Delta t = 2,0$ s

Na Tabela V comparam-se os resultados obtidos com os vários métodos implementados para definição do calor específico em função da entalpia. De salientar que este exemplo, por força das propriedades térmicas do ferro fundido, não é tão sensível como o exemplo precedente, quer quanto ao método utilizado para tratar a mudança de fase, quer ainda quanto ao intervalo de tempo Δt , que, neste caso, foi considerado igual a 2,0 s.

Tempo (s)	Morgan eq. (3.14)	Lemmon eq. (3.13)	del Giudice eq. (3.12)	Comini eq. (3.11)
0	1350,000	1350,000	1350,000	1350,000
20	1350,000	1350,000	1350,000	1350,000
40	1349,600	1349,700	1349,700	1349,700
60	1345,600	1346,200	1346,200	1346,200
80	1333,500	1334,700	1334,700	1334,500
100	1312,800	1314,400	1314,400	1314,100
120	1286,100	1288,300	1288,300	1288,200
140	1256,700	1259,800	1259,800	1260,200
160	1228,200	1232,000	1232,000	1232,300
180	1203,900	1209,100	1209,100	1207,800
200	1187,300	1194,000	1194,000	1192,800
220	1181,800	1185,400	1185,400	1184,800
240	1180,200	1181,800	1181,800	1183,200
260	1174,300	1171,800	1171,800	1173,800
280	1019,200	1016,400	1016,400	1032,500
300	911,760	911,240	911,240	921,080
320	830,280	830,120	830,120	837,660
340	760,810	760,750	760,750	766,940
360	699,410	699,390	699,380	704,650
380	644,250	644,240	644,240	648,810
400	594,240	594,240	594,240	598,260

Tabla V. Evolução da temperatura num ponto do eixo do cilindro

CONCLUSÕES

Neste trabalho fez-se um estudo bibliográfico sobre os vários processos de tratar a libertação de calor latente que acompanha o fenómeno da solidificação.

De entre os denominados métodos de malha fixa encontrados na literatura, foram implementados e testados os mais frequentemente citados pelos vários investigadores.

Designando, como Comini¹², de técnicas “temporais” as que utilizam fórmulas do tipo da equação (26) e técnicas “espaciais” as que utilizam fórmulas do tipo das equações (22)–(25), a nossa experiência recomenda que se utilizem estas últimas, o que aliás, está de acordo

com Dalhuisen⁹, o qual considera os métodos baseados em técnicas temporais, eq. (26), muito restritivos, relativamente ao intervalo de tempo a utilizar e ainda que apresentam em alguns casos um comportamento oscilatório. Estas considerações são mais relevantes quando se pretende tratar o problema da solidificação de substâncias puras ou ligas de composição eutética do que quando se estudam materiais com um intervalo de mudança de fase definido, como ficou demonstrado com o Exemplo 2, em que os resultados obtidos com os vários métodos implementados foram todos muito semelhantes (Tabela V).

REFERÊNCIAS

- 1 H.S. Carslaw e J.C. Jaeger, “*Conduction of heat in solids*”, Oxford Univ. Press, Oxford, (1959).
- 2 P.M.M. Vila Real e C.A. Magalhães Oliveira, “Simulação por elementos finitos da solidificação de ligas metálicas vazadas em coquilha”, relatório interno, Janeiro, (1990).
- 3 M. Salcudean e Z. Abdullah, “On the numerical modelling of heat transfer during solidification process”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **25**, pp. 445–473, (1988).
- 4 J.A. Dantzig, “Modelling liquid-solid phase changes with melt convection”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **28**, pp. 1769–1785, (1989).
- 5 O.C. Zienkiewicz, “*The finite element method*”, 3ª edição, McGraw-Hill Book Company, Ltd., U.K., (1977).
- 6 N. Soyris, F. Bay, M. Bellet e J.L. CHenot, “Heat transfer analysis with three dimensional finite element code: application to the casting process, in R.W. Lewis e K. Morgan (Eds.), *Numerical Methods in Thermal Problems (proc. conf.)*, Julio 1989, Swansea, U.K., Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 280–290, (1989).
- 7 M. Samonds, R.W. Lewis, K. Morgan e R. Symberlist, “Finite element modelling of the mold-metal interface in casting simulation with coincident nodes or thin elements”, *Computational Techniques in Heat Transfer*, R.W. Lewis, K. Morgan, J.A. Johnson e R. Smith (Eds.), Vol. **1**, pp. 331–354, Pineridge Press, Swansea, U.K., (1985).
- 8 R.W. Lewis e P.M. Roberts, “Finite element simulation of solidification problems”, *Applied Scientific Research*, Vol. **44**, pp. 61–92, (1987).
- 9 A.J. Dalhuisen e A. Segal, “Comparison of finite element techniques for solidification problems”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **23**, pp. 1807–1829, (1986).
- 10 G. Comini, S. del Guidice, R.W. Lewis e O.C. Zienkiewicz, “Finite element solution of nonlinear heat conduction problems with special reference to phase change”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **8**, pp. 613–624, (1974).
- 11 K. Morgan, R.W. Lewis e O.C. Zienkiewicz, “An improved algorithm for heat conduction problems with phase change”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **12**, pp. 1191–1195, (1978).
- 12 G. Comini, S. del Guidice e O. Saro, “Conservative equivalent heat capacity methods for nonlinear heat conduction”, en R.W. Lewis e K. Morgan (Eds.), *Numerical Methods in Thermal Problems (proc. conf.)*, Julio 1989, Swansea, U.K., Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 5–15, (1989).

- 13 V.R. Voller, M. Cross e P.G. Walton, “Assessment of weak solution numerical techniques for solving Stefan problems”, en R.W. Lewis e K. Morgan (Eds.), *Num. Meth. in Ther. Problems* (proc. conf.), Julio 1979, Swansea, U.K., Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 172–181, (1979).
- 14 V.R. Voller e M. Cross, “Use of the enthalpy method in the solution of Stefan problems”, en R.W. Lewis, J.A. Johnson e W.R. Smith (Eds.), *Numerical Methods in Thermal Problems* (proc. conf.), Agosto 1983, Seattle, EE.UU., Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 91–101, (1983).
- 15 V.R. Voller, J.J. Moore e N. Shah, “Simple techniques for the analysis of metallurgical solidification processes”, en R.W. Lewis e K. Morgan (Eds.), *Numerical Methods in Thermal Problems* (proc. conf.), Julio 1985 Swansea, U.K., Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 229–239, (1985).
- 16 V.R. Voller e M. Cross, “Applications of control volume enthalpy methods in the solution of Stefan problems”, *Computational Techniques in Heat Transfer*, R.W. Lewis, K. Morgan, J.A. Johnson e R. Smith, (Eds.), Pineridge Press, Swansea, U.K., Vol 1, pp. 245–275, (1985).
- 17 V.R. Voller, “A numerical method for analysis of solidification in heat and mass transfer systems”, en R.W. Lewis, K. Morgan e W.G. Habashi (Eds.), *Num. Methods in Thermal Problems* (proc. conf.), Montreal, Canadá, Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 693–704, (1987).
- 18 V.R. Voller, “Numerical models of solidification processes and phenomena”, en R.W. Lewis e K. Morgan (Eds.), *Numerical methods in thermal problems* (proc. conf.), Swansea, U.K., Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 243–253, (1989).
- 19 M. Samonds, R.W. Lewis, K. Morgan e R. Symberlist, “Efficient three dimensional finite element metal casting simulation employing a quadratic conductivity approximation”, en R.W. Lewis e K. Morgan (Eds.), *Numerical Methods in Thermal Problems* (proc. conf.), Julio 1985 Swansea, U.K., Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 64–86, (1985).
- 20 Z. Abdullah e M. Salcudean, “Computation of casting solidification in the presence of natural convection”, en R.W. Lewis, K. Morgan e W.G. Habashi (Eds.), *Num. Meth. in Ther. Prob.* (proc. conf.), Montreal, Canadá, Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 164–175, (1987).
- 21 I. Rolph, W. Donald e K.J. Bathe, “An efficient algorithm for analysis of nonlinear heat transfer with phase changes”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **18**, pp. 119–134, (1982).
- 22 J. Roose e O. Storrer, “Modelization of phase changes by fictitious heat flow”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **20**, pp. 217–225, (1984).
- 23 L.A. Crivelli e S.R. Idelsohn, “A temperature-based finite element solution for phase-change problems”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **23**, pp. 99–119, (1986).
- 24 M.A. Keavy, “A simple enthalpy technique for heat conduction with phase change”, en R.W. Lewis e K. Morgan (Eds.), *Numerical Methods in Thermal Problems* (proc. conf.), Swansea, U.K., Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 270–278, (1985).
- 25 R. W. Lewis, K. Morgan e P.M. Roberts, “Application of an alternating-direction finite-element method to heat transfer problems involving a change of phase”, *Num. Heat Transfer*, Vol. **7**, pp. 471–482, (1984).

- 26 B.G. Thomas, I.V. Samarasekera e J.K. Brimacombe, "Comparison of numerical modeling techniques for complex, two-dimensional", *Transient Heat-Conduction Problems, Metallurgical Transactions B*, Vol. **15b**, pp. 307–318, (1984).
- 27 Q.T. Phan, "The use of lumped capacitance in the finite-element solution of heat conduction problems with phase change", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. **19**, N° 2, pp. 285–291, (1986).
- 28 D.T. Gethin, R.W. Lewis e D.V. Tran, "Computer based design tools for the foundry industry", en R.W. Lewis e K. Morgan (Eds.), *Numerical methods in thermal problems* (proc. conf.), Swansea, U. K., Pineridge Press, Swansea, U. K., pp. 254–266, (1989).
- 29 A.J. Dalhuisen e A. Segal, "Comparison of finite element techniques for solidification problems", en R.W. Lewis e K. Morgan (Eds.), *Numerical Methods in Thermal Problems* (proc. conf.), Swansea, U.K., Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 300–308, (1989).
- 30 S.E. Chidiac, I.V. Samarasekera e J.K. Briamacombe, "A numerical method for analysis of phase change in the continuous casting process", *Proc. 3rd International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes, NUMIFORM'89*, Colorado State University, Fort Collins, Colorado EE.UU., pp. 121–128, (1989).
- 31 J.L. Desbiolles, M. Rappaz, J.J. Droux e J. Rappaz, "Simulation of solidification of alloys using the FEM code MODULEF", European Materials Research Society (E-MRS), H. Fredriksson (Ed.), *State of the Art of Computer Simulation of Casting and Solidification Processes*, Strasbourg, França, pp. 49–55, (1986).
- 32 J.S. Cruz, J.C. Chevrier, Y. Gros, G. Patin e D. Marchese, "Heat flow simulation during solidification of complex shaped pieces", European Materials Research Society (E-MRS), H. Fredriksson (Ed.), *State of the Art of Computer Simulation of Casting and Solidification Processes*, Strasbourg, França, pp. 65–74, (1986).
- 33 Q.T. Pham, "A fast, unconditionally stable finite-difference scheme for heat conduction with phase change", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. **28**, N° 11, pp. 2079–2084, (1985).
- 34 R.O. Stafford, J.W. Klahs e D.F. Pinella, "Numerical methods for solidification simulation", en R.W. Lewis, K. Morgan e W.G. Habashi (Eds.), *Num. Meth. in Ther. Problems* (proc. conf.), Junio 1987 Montreal, Canadá, Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 62–83, (1987).
- 35 K.K. Tamma e S.B. Railkar, "Transfinite element methodology for non-linear/linear transient thermal modelling/analysis: progress and recent advances", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **25**, pp. 475–494, (1988).
- 36 U. Chandra, "Benchmark problems and testing of a finite element code for solidification in investment castings", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **30**, pp. 1301–1320, (1990).
- 37 K.K. Tamma e R.R. Namburu, "Recent advances, trends and new perspectives via enthalpy-based finite element formulations for applications to solidification problems", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **30**, pp. 803–820, (1990).
- 38 V.R. Voller, C.R. Swaminathan e B.G. Thomas, "Fixed grid techniques for phase change problems: a review", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **30**, pp. 875–898, (1990).
- 39 G. Commini, S. del Giudice e O. Saro, "A conservative algorithm for multidimensional conduction phase change", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **30**, pp. 697–709, (1990).
- 40 F.J. Bradley e M. Samonds, "On the application of source term, enthalpy and micro-modeling algorithms to the numerical simulation of near-eutectic ductile iron solidification and shrinkage prediction", *J. of Appl. Math. Modell.*, (1991).

- 41 C. Wei, P.N. Hansen e J.T. Berry, "The method – a compact technique for describing the heat flux present at the mold-metal interface in solidification problems", *Numerical methods in thermal problems* (proc. conf.), Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 193–204, (1981).
- 42 E. Pardo e D.C. Weckman, "A fixed grid finite element technique for modelling phase change in steady-state conduction-advection problems", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **29**, pp. 969–984, (1990).
- 43 A.S. Wood, S.I.M. Ritchie e G.E. Bell, "An efficient implementation of the enthalpy method", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **17**, pp. 301–305, (1981).
- 44 M. Storti, L.A. Crivelli e S.R. Idelsohn, "Making curved interfaces straight in phase-change problems", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **24**, pp. 375–392, (1987).
- 45 E.C. Lemmon, "Phase-change techniques for finite element conduction codes", en R.W. Lewis e K. Morgan (Eds.), *Numerical Methods in Thermal Problems* (proc. conf.), Swansea, U.K., Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 149–158, (1979).
- 46 M.R. Tadayan e R.W. Lewis, "A model of metal-mould interfacial heat transfer for finite element simulation of gravity-diecasting", *Cast Metals*, Vol. **1**, N° 1, pp. 24–28, (1988).
- 47 A. Habraken, "Contribution à la modélisation du formage des métaux par la méthode des éléments finis", Collection des publications N° 124 de la Faculté des Sciences Appliquées de l' Université de Liège, Bélgica, (1990).
- 48 R. Song, G. Dhatt e A. Ben Cheikh, "Thermo-mechanical finite element model of casting systems", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **30**, pp. 579–599, (1990).
- 49 R. Song, "Modelisation numérique de la solidification et du refroidissement lors d' un procédé de fonderie", tese de doutoramento, Université de Technologie de Compiègne, (1990).
- 50 R.W. Lewis, K. Morgan e P.M. Roberts, "Determination of thermal stresses in solidification problems", *Numerical analysis of forming processes*, J.F.T. Pittman, O.C. Zienkiewicz, R.D. Wood e J.M. Alexander (Eds.), John Wiley & Sons, (1984).
- 51 D. Celentano, S. Oller e E. Oñate, "A plastic constitutive model to simulate the solidification in casting problems", *Proc. of 3rd Int. Conf. on Comp. Plasticity-Fundamentals and Applications*, Pineridge Press, D.R. Owen, E. Oñate e E. Hinton (Eds.), pp. 1077–1088, (1992).
- 52 K. O'Neill, "Solution of 2-D axisymmetric phase change problems on a fixed mesh, with zero width phase change zone", en R.W. Lewis, J.A. Johnson e W.R. Smith (Eds.), *Num. Meth. in Th. Prob.*, Agosto 1983, Seattle, EE.UU., Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 134–146, (1983).
- 53 K. O'Neill e D.R. Lynch, "A finite element solution for porous medium freezing using hermite basis functions and a continuously deforming coordinate system", en R.W. Lewis e K. Morgan (Eds.), *Numerical Methods in Thermal Problems* (proc. conf.), Swansea, U.K., Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 548–559, (1979).
- 54 D.R. Lynch e K. O'Neill, "Continuously deforming finite elements for the solution of parabolic problems with and without phase change", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **17**, pp. 81–96, (1981).

- 55 M.R. Albert e K. O'Neill, "Transient two-dimensional phase change with convection using deforming finite elements", *Computational Techniques in Heat Transfer*, R.W. Lewis, K. Morgan, J.A. Johnson e R. Smith (Eds.), Pineridge Press, Swansea, U.K., Vol. **1**, pp. 229–243, (1985).
- 56 M.R. Albert e K. O'Neill, "Moving boundary-moving mesh analysis of phase change using finite elements with transfinite mappings", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **23**, pp. 591–607, (1986).
- 57 N. Zabaras, Y. Ruan e O. Richmond, "Front tracking thermomechanical model for hypoelastic-viscoplastic behavior in a solidifying body", *Comp Meth. in Appl. Mech. and Engng.*, Vol. **81**, pp. 333–364, (1990).
- 58 I. Kececioglu e B. Rubinsky, "A mixed-variable continuously deforming finite element method for parabolic evolution problems", Parte I: "The variational formulation for a single evolution equation", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **28**, pp. 2583–2607, (1989).
- 59 I. Kececioglu e B. Rubinsky, "A mixed-variable continuously deforming finite element method for parabolic evolution problems", Parte II: "The coupled problem of phase-change in porous media", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **28**, pp. 2609–2634, (1989).
- 60 I. Kececioglu e B. Rubinsky, "A mixed-variable continuously deforming finite element method for parabolic evolution problems", Parte III: "Numerical implementation and computational results", *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **28**, pp. 2715–2760, (1989).
- 61 C.S. Kanetkar e D.M. Stefanescu, "Equiaxed dendritic solidification of single phase alloys: a solidification kinetics and heat transfer model", *Modelling of casting and welding processes IV*, A.F. Giamei e G.J. Abbaschian (Eds.), *The Minerals, Metals & Materials Society*, pp. 697–708, (1988).
- 62 D.M. Stefanescu, G. Upadhyay, G. Baandhyopadhyay e I.G. Chen, "Modeling the evolution of equiaxed microstructures in casting", *JOM*, pp. 22–25, (1989).
- 63 C.S. Kanetkar, I.G. Chen e D.M. Stefanescu, "A latent heat method for macro-micro modeling of eutectic solidification", *Transactions of The Iron and Steel Institute of Japan*, Vol. **28**, pp. 860–868, (1988).
- 64 C.S. Kanetkar e D.M. Stefanescu, "Macro-modeling of solidification of hypoeutectic and eutectic Al-Si alloys", *AFS Transactions*, pp. 591–598, (1988).
- 65 G.F.C. Rogers e Y.R. Mayhew, "*Engineering thermodynamics work and heat transfer*", Longman Group Limited, Longman House, Burnt Mill, Harlow, Essex, U.K., 3ª edición, (1980).
- 66 J. Tuma, "*Engineering mathematics handbook*", McGraw-Hill Book Company, U.S., (1978).
- 67 J. Stefan, "Über die Theorie der Eisbildung, insbesondere über die Eisbildung im Polarmeere", *J. Ann. Phys. Chem.*, Vol. **42**, pp. 269–286, (1891).
- 68 H.T. Angus, "*Cast-iron – physical and engineering properties*", 2ª edición, Londres, Butterworths, (1976).

- 69 J.R. Williams, R.W. Lewis e K. Morgan, “An elasto-viscoplastic thermal stress model with applications to the continuous casting of metals”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **14**, pp. 1–9, (1979).
- 70 M. Bellet, F. Bay, J.J. Brioist e J.L. Chenot, “Modelling of the thermomechanical coupling in the cooling stage of the casting process”, *NUMIFORM 92, Numerical Methods in Industrial Forming Process*, Chenot, Wood e Zienkiewicz (Eds.), França, pp. 771–776, (1992).
- 71 K. Tamma e R. Namburu, “Prediction of thermal stress and deformations due to phase change in solidifying objects via flux7stress based finite element representations”, *Int. J. Num. Meth. Engng.*, Vol. **29**, pp. 1473–1485, (1990).
- 72 J.L. Marcelin, M. Abouaf e J.L. Chenot, “Analysis of residual stresses in hot-rolled complex beams”, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, Vol. **56**, pp. 1–16, (1986).
- 73 M. Salcudean e D. Poirier, “On numerical methods used in mathematical modeling of phase change in liquid metals”, *J. Heat Transfer, Trans. ASME* Vol. **110**, pp. 562–570, (1988).
- 74 D. Sheng, S. Knutsson e K. Axelsson, “Sensitivity analysis of an enthalpy method”, en R.W. Lewis, J.H. Chin e G.M. Homsy (Eds.), *Numerical Methods in Thermal Problems* (proc. conf.), Stanford, EE.UU., Pineridge Press, Swansea, U.K., pp. 133–143, (1991).
- 75 R.L. McAdie, J.B. Martin e R.W. Lewis, “A finite element enthalpy technique for solving coupled nonlinear heat conduction/mass diffusion problems with phase change”, *8th International Conference on Numerical Methods in Thermal Problems*, R.W. Lewis (Ed.), Pineridge Press, University College of Swansea, Swansea, U.K., Vol. **1**, pp. 16–31, (1993).
- 76 P.M.M. Vila Real e C.A.M. Oliveira, “Estudo do comportamento termo-elasto-viscoplástico de peças vazadas em moldações metálicas pelo método dos elementos finitos, 2ª Jornadas de Mecânica Computacional, Coimbra, M 15, (1992).
- 77 P.M.M. Vila Real e C.A.M. Oliveira, “Modelação pelo método dos elementos finitos do comportamento termo-elasto-viscoplástico de peças vazadas em moldações metálicas”, en F. Navarrina e M. Cateleiro (Eds.), *II Congreso Métodos Numéricos en Ingeniería* (proc. conf.), La Coruña, SEMNI, Sociedad Española de Métodos Numéricos en Ingeniería, 12 a 16 de Julho de 1993, Vol. **1**, pp. 193–203, (1993).
- 78 P.M.M. Vila Real e C.A.M. Oliveira, “Thermo-elasto-viscoplastic model for metal casting processes”, *8th International Conference on Numerical Methods in Thermal Problems*, R.W. Lewis (Ed.), Pineridge Press, University College of Swansea, Swansea, U.K., 12 a 16 de Julho de 1993, Vol. **1**, pp. 297–308, (1993).
- 79 C.R. Swaminathan e V.R. Voller, “On the enthalpy method”, *Int. J. Num. Meth. Heat Fluid Flow*, Vol. **3**, pp. 233–244, (1993).
- 80 P. Vila Real, “Modelação por elementos finitos da solidificação e comportamento termo-mecânico de peças vazadas em moldações metálicas”, tese de doutoramento, FEUP, Dezembro de 1993.
- 81 P.M.M. Vila Real e C.A.M. Oliveira, “Modelação numérica de problemas térmicos envolvendo mudança de fase”, *V Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería*, Madrid, Espanha, 3 a 6 de Junho de 2002.

APÊNDICE 1

Solução teórica de um problema de solidificação

Neste apêndice iremos apresentar a solução teórica para a classe de problemas que envolvem mudança de fase e são habitualmente designados por *problemas de Neumann* ou *problemas de Stefan*¹.

Considere-se o problema de Neumann, correspondente ao arrefecimento e solidificação de um meio semi-infinito representado na Figura A.1.1, inicialmente na fase líquida à temperatura T_0 . No instante inicial a temperatura da superfície exterior é bruscamente reduzida e mantida em T_w .

Figura A.1.1. Distribuição de temperaturas para o problema de Neumann num meio semi-infinito³

Este problema pode ser formulado matematicamente. Assim, se $T_s(x, t)$ e $T_l(x, t)$ forem, respectivamente, as temperaturas da região sólida e líquida, elas devem satisfazer em cada uma das regiões as seguintes equações:

$$\frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_s} \frac{\partial T_s}{\partial t} \quad (\text{A.1.1})$$

e

$$\frac{\partial^2 T_l}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha_l} \frac{\partial T_l}{\partial t} \quad (\text{A.1.2})$$

em que, considerando-se que as massas específicas das duas fases são iguais, $\rho_s = \rho_l = \rho$

$$\alpha_s = \frac{k_s}{\rho c_s} \quad (\text{A.1.3})$$

e

$$\alpha_l = \frac{k_l}{\rho c_l} \quad (\text{A.1.4})$$

Definindo a posição da superfície de separação entre a fase sólida e a fase líquida por $X(t)$, uma condição de fronteira a ser satisfeita nessa superfície, sendo T_f a temperatura de mudança de fase, é

$$T_s = T_l = T_f \quad \text{em } x = X(t) \quad (\text{A.1.5})$$

Outra condição de fronteira a verificar sobre a frente de solidificação tem a ver com a libertação de calor latente que se verifica quando ocorre a mudança de fase. Para melhor se compreender o que se passa, suponhamos que L representa o calor latente de fusão da substância, que a região $x > X(t)$ está na fase líquida à temperatura $T_l(x, t)$ e que a região $x < X(t)$ está na fase sólida à temperatura $T_s(x, t)$. Então quando a frente de solidificação se desloca da distância dX , é libertada a quantidade de calor $\rho L dX$ por unidade de área¹, a qual deve ser removida por condução. Isto implica que

$$k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} = \rho L \frac{dX}{dt} \quad (\text{A.1.6})$$

Em adição às condições de fronteira (A.1.5) e (A.1.6) devem ainda ser satisfeitas as condições

$$T_s(0, t) = T_w \quad (\text{A.1.7})$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} T_l = T_0 \quad (\text{A.1.8})$$

Segundo¹, a distribuição de temperatura ao longo das regiões sólida e líquida é, respectivamente,

$$T_s = T_w + A \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_s t}} \right) \quad (\text{A.1.9})$$

$$T_l = T_0 + B \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_l t}} \right) \quad (\text{A.1.10})$$

onde a *função erro* se define pela referência 66

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{0!} \frac{x}{1} - \frac{1}{1!} \frac{x^3}{3} + \frac{1}{2!} \frac{x^5}{5} - \frac{1}{3!} \frac{x^7}{7} + \dots \right) \quad (\text{A.1.11})$$

e

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) \quad (\text{A.1.12})$$

Com esta definição da temperatura, as equações (A.1.1), (A.1.2), (A.1.7) e (A.1.8) são automaticamente satisfeitas. Quanto à equação (A.1.5), ela conduz-nos às seguintes relações:

$$T_w + A \operatorname{erf} \left(\frac{X}{2\sqrt{\alpha_s t}} \right) = T_f \quad (\text{A.1.13})$$

$$T_0 + B \operatorname{erfc} \left(\frac{X}{2\sqrt{\alpha_l t}} \right) = T_f \quad (\text{A.1.14})$$

Estas duas relações devem permanecer válidas, qualquer que seja o instante de tempo t , pelo que X deverá satisfazer

$$\frac{X}{2\sqrt{\alpha_s t}} = \lambda = \text{constante} \quad (\text{A.1.15})$$

vindo a expressão analítica da frente de solidificação dada por

$$X(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha_s t} \quad (\text{A.1.16})$$

em que λ é uma constante numérica a ser determinada a partir da eq. (A.1.6), como veremos em seguida.

Usando (A.1.9), (A.1.10) e (A.1.16) na equação (A.1.6), vem

$$k_s A e^{-\lambda^2} - k_l B \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}} e^{-\frac{\alpha_s \lambda^2}{\alpha_l}} = \lambda L \alpha_s \rho \sqrt{\pi} \quad (\text{A.1.17})$$

Por outro lado, da equação (A.1.13) e (A.1.15) temos

$$A = \frac{T_f - T_w}{\operatorname{erf}(\lambda)} \quad (\text{A.1.18})$$

e da equação (A.1.14) e (A.1.15) resulta

$$B = \frac{T_0 - T_f}{\operatorname{erfc}\left(\lambda \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}}\right)} \quad (\text{A.1.19})$$

Substituindo (A.1.18) e (A.1.19) em (A.1.17) vem

$$\frac{e^{-\lambda^2}}{\operatorname{erf}(\lambda)} - \frac{k_l \sqrt{\alpha_s} (T_0 - T_f) e^{-\frac{\alpha_s \lambda^2}{\alpha_l}}}{k_s \sqrt{\alpha_l} (T_f - T_w) \operatorname{erfc}\left(\lambda \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}}\right)} = \frac{\lambda L \sqrt{\pi}}{c_s (T_f - T_w)} \quad (\text{A.1.20})$$

Encontrado λ desta equação, recorrendo, por exemplo a um método numérico, pode escrever-se a solução do problema

$$T(t) = \begin{cases} T_w + \frac{T_f - T_w}{\operatorname{erf}(\lambda)} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_s t}}\right) & x < X(t) \\ T_f & x = X(t) \\ T_0 - \frac{T_0 - T_f}{\operatorname{erfc}\left(\lambda \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}}\right)} \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_l t}}\right) & x > X(t) \end{cases} \quad (\text{A.1.21})$$

em que $X(t)$ é dado pela equação (A.1.16).

Se a temperatura inicial no problema de Neumann, que acabamos de apresentar, for igual à temperatura de mudança de fase T_f , o problema é então designado por *problema de Stefan*^{1,67}.

APÊNDICE 2

Calor específico e entalpia, sob a forma de tabelas

No caso do programa de cálculo disponível, admitir as propriedades dos materiais sob a forma de tabelas é necessário construí-las previamente.

O calor específico e a entalpia são as propriedades para as quais a obtenção de tabelas é menos imediata, daí a sua inclusão neste apêndice.

Para o caso concreto do Exemplo 2 deste artigo, o calor específico de acordo com a equação (3.9), tem a seguinte expressão

$$c_p = \begin{cases} 816 & T < 1147 \text{ }^\circ\text{C} \\ 7387,428571 & 1147 \text{ }^\circ\text{C} \leq T \leq 1182 \text{ }^\circ\text{C} \\ 816 & T > 1182 \text{ }^\circ\text{C} \end{cases} \quad [\text{J/kg}^\circ\text{C}] \quad (\text{A.1.21})$$

cujas representação gráfica se encontra esquematizada na Figura A.2.1.

Figura A.2.1. Representação gráfica do calor específico

Para evitar a descontinuidade nos pontos correspondentes à temperatura *solidus* e à temperatura *liquidus*, de modo a ser possível tabelar o calor específico, considerou-se a curva representada esquematicamente na Figura A.2.2, em que o valor da área tracejada continua a ser igual ao calor latente.

Figura A.2.2. Curva adoptada do calor específico, para o Exemplo 2

A tabela correspondente à entalpia, de acordo com a sua definição, eq. (3.1), que reescrevemos aqui

$$H(T) = \int_{T_{\text{ref}}}^T c_p(T) \, dT$$

é construída à custa do integral da função calor específico, desde uma certa temperatura de referência.

Tomando-se 25 °C como temperatura de referência e integrando a curva representada na Figura A.2.2. até 1500 °C, obtêm-se os valores da entalpia representados na Tabela A.2.I., onde também se podem encontrar os valores tabelados do calor específico.

Temperatura (°C)	Calor específico (J/kg°C)	Entalpia (J/kg)
25,00	816,00	0,00
1146,75	816,00	915348,00
1147,25	7387,428571	917398,8571
1181,75	7387,428571	1172265,143
1182,25	816,00	1174316,00
1500,00	816,00	1433600,00

Tabla A.2.I. Valores tabelados do calor específico e da entalpia para o Exemplo 2