

ANO
2019



UDESC

UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA – UDESC
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS – CCT
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

THIAGO SCHWINDEN LEAL | AVALIAÇÃO NUMÉRICA-EXPERIMENTAL DO
PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO DE ALUMÍNIO COM PREDIÇÃO DE POROSIDADES

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**AVALIAÇÃO NUMÉRICA-
EXPERIMENTAL DO PROCESSO DE
SOLIDIFICAÇÃO DE ALUMÍNIO
COM PREDIÇÃO DE POROSIDADES**

THIAGO SCHWINDEN LEAL

JOINVILLE, 2019

Os avanços na redução de defeitos em fundição constituem um desafio constante para a indústria metal mecânica. Dentre estes destaca-se um defeito causado por contração volumétrica do material fundido devido a mudança de fase, ao qual atribui-se o nome de rechupe. Tendo este cenário em vista, o presente trabalho traz uma análise numérico-experimental do processo de solidificação e formação de porosidade por contração volumétrica (rechupe) em um componente fundido para a qual utilizou-se um molde em aço de corpo cônico com dimensões reduzidas de forma a acomodar 150 g de alumínio puro. O molde apresenta uma face aberta abrangendo toda a sua porção superior de forma que a superfície do metal fique em contato com o ambiente nesta região. Para a simulação da solidificação empregou-se o método de entalpia-porosidade e para avaliação da contração da superfície livre do líquido utilizou-se o método VOF (*Volume Of Fluid*) utilizado para avaliação de fronteiras móveis entre fluidos multifásicos. Em ambas simulações empregou-se o programa comercial ANSYS FLUENT® como ferramenta de análise. Além das análises dos resultados para as temperaturas envolvidas no processo de solidificação e da contração da superfície da peça, outros resultados importantes como: taxa de resfriamento, gradiente térmico e velocidade de solidificação também são abordados com boa aproximação entre os resultados numéricos e experimentais.

Orientador: PAULO SERGIO BERVING ZDANSKI

JOINVILLE, 2019

THIAGO SCHWINDEN LEAL

AVALIAÇÃO NUMÉRICA-EXPERIMENTAL DO PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO
DE ALUMÍNIO COM PREDIÇÃO DE POROSIDADES

Dissertação do programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PPGEM, do Centro de Ciências Tecnológicas da Universidade do Estado de Santa Catarina, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de Mestre em Engenharia Mecânica

Orientador: Prof. Dr. Paulo Sergio Berving Zdanski

JOINVILLE

2019

Ficha catalográfica elaborada pelo programa de geração automática da
Biblioteca Setorial do CCT/UESC,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Leal, Thiago

AVALIAÇÃO NUMÉRICA-EXPERIMENTAL DO
PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO DE ALUMÍNIO COM
PREDIÇÃO DE POROSIDADE / Thiago Leal. -- 2019.
123 p.

Orientador: Paulo Sergio Berving Zdanski
Dissertação (mestrado) -- Universidade do Estado de
Santa Catarina, Centro de Ciências Tecnológicas, Programa
de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Joinville, 2019.

1. Solidificação. 2. Entalpia-porosidade. 3. Porosidade. 4.
Fundição de Alumínio. 5. Rechupe. I. Zdanski, Paulo Sergio
Berving . II. Universidade do Estado de Santa Catarina,
Centro de Ciências Tecnológicas, Programa de
Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.

**Avaliação Numérica-Experimental do Processo de Solidificação de Alumínio
com Predição de Porosidades**

por

Thiago Schwinden Leal

Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título de

MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA

Área de concentração em “Modelagem e Simulação Numérica”
e aprovada em sua forma final pelo

CURSO DE MESTRADO ACADÊMICO EM ENGENHARIA MECÂNICA
DO CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS DA
UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA.

Banca Examinadora:



Prof. Dr. Paulo Sergio Berving Zdanski
CCT/UDESC (Orientador/Presidente)



Prof. Dr. Roberto Wolf Francisco Junior
CCT/UDESC



Prof. Dr. Eduardo Luís Gaertner
Pesquisador Huangshi Dongbei
Electrical Appliance Co

Joinville,SC, 19 de fevereiro de 2019.

Dedico este trabalho a Deus e a minha família.

AGRADECIMENTOS

A todos que contribuíram para desenvolvimento do presente trabalho, principalmente:

Ao meu orientador Paulo Sérgio Berving Zdanski;

Aos colegas de trabalho Fernando Andre Lindroth Dauner, Samuel Santos Borges e Thiago Piazero de Carvalho pelas contribuições significativas.

Aos demais colegas da Empresa WEG.

Aos professores e colegas do curso de Mestrado em Engenharia Mecânica da UDESC.

À UDESC.

RESUMO

Os avanços na redução de defeitos em fundição constituem um desafio constante para a indústria metal mecânica. Dentre estes destaca-se um defeito causado por contração volumétrica do material fundido devido a mudança de fase, ao qual atribui-se o nome de rechupe. Tendo este cenário em vista, o presente trabalho traz uma análise numérico-experimental do processo de solidificação e formação de porosidade por contração volumétrica (rechupe) em um componente fundido para a qual utilizou-se um molde em aço de corpo cônico com dimensões reduzidas de forma a acomodar 150 g de alumínio puro, tal que o molde apresenta uma face aberta abrangendo toda a sua porção superior de forma que a superfície do metal fique em contato com o ambiente nesta região. Para a simulação da solidificação empregou-se o método de entalpia-porosidade e para avaliação da contração da superfície livre do líquido utilizou-se o método VOF (*Volume Of Fluid*) utilizado para avaliação de fronteiras móveis entre fluidos multifásicos. Em ambas simulações se utilizou o programa comercial ANSYS FLUENT® como ferramenta de análise. Além da comparação das temperaturas do processo e da contração da superfície da peça, outros resultados importantes como: taxa de resfriamento, gradiente térmico e velocidade de solidificação também são abordados com boa aproximação entre os resultados numéricos e experimentais.

Palavras chave: Solidificação, Entalpia-porosidade, Porosidade, VOF, Fundição de Alumínio, Rechupe.

ABSTRACT

The reduction of casting defects are a constant challenge for the metalworking industry. Among these, an important defect caused by volumetric contraction of the molten material is highlighted, which is called the shrinkage. With this scenario in view, the present work presents a numerical-experimental analysis of the solidification process and formation of shrinkage in a molten component made on a steel mold with a conical body and reduced dimensions to accommodate 150 g of pure aluminum such that the mold has an open face covering its entire upper portion where the metal surface is in contact with the environment in this region. For the solidification simulation, the enthalpy-porosity method was used and to evaluate the contraction of the free surface of the liquid the VOF (Volume Of Fluid) method was used. In both simulations the commercial program ANSYS FLUENT® was used as an analysis tool. In addition, to the comparison of the process temperatures and the contraction of the workpiece surface, other important results such as: cooling rate, thermal gradient and speed of solidification are also approached with a good approximation between numerical and experimental results.

Keywords: Solidification, Enthalpy-porosity, Porosity, VOF, Aluminum Casting.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Produção brasileira de metais não ferrosos em 2016 [10^3 ton]	27
Figura 2 - Principais defeitos em fundição.....	29
Figura 3 - Representação da energia livre para diferentes fases do material	33
Figura 4 - Curva de resfriamento de um material puro	34
Figura 5 - Temperatura vs Entalpia na solidificação.....	35
Figura 6 - Curva de resfriamento de um material a partir de uma temperatura superior a T_f apresentando super resfriamento	36
Figura 7 - Processo de nucleação e crescimento dos grãos até a solidificação completa	37
Figura 8 - Tipos de interface sólido/líquido: (a) rugosa ou difusa; (b) lisa ou facetada.....	38
Figura 9 - Curva de resfriamento de uma liga metálica	38
Figura 10 - Diferentes formações nas interfaces Sólido/Líquido	39
Figura 11 - Variação da densidade no material em função da temperatura	39
Figura 12 - Processo de formação de porosidade por contração.....	40
Figura 13 - Efeito do intervalo de solidificação na formação de porosidades.....	41
Figura 14 – Quadro com intervalo de solidificação – Alumínio e Ligas	42
Figura 15 - Tipos de porosidades em um componente fundido.....	42
Figura 16 - Representação da transferência de calor em um processo de solidificação.....	44
Figura 17 - Representação da zona pastosa ou <i>mushy zone</i>	45
Figura 18 - Representação da transferência de calor na interface metal/molde	46
Figura 19 – Exemplo de resultado numérico/experimental para contração.....	49
Figura 20 – Resultado numérico de cavidade aberta por contração volumétrica	50
Figura 21 - Resultado numérico (à esquerda) e experimental (à direita) da contração da superfície do material apresentado por Beech (1998).....	50
Figura 22 - Formação de poros apresentada por Reis et al. (2007) utilizando critério de pressão crítica no domínio.	51
Figura 23 - Geometria empregada na análise numérico/experimental.....	52
Figura 24 - Desenho esquemático das grandezas avaliadas no caso de estudo.....	53
Figura 25 - Ocorrência da <i>mushy zone</i> em função da variação da entalpia ΔH	58

Figura 26 - Exemplificação da variação de "B"	60
Figura 27 - Ilustração de duas fases separadas por uma interface em uma célula ..	63
Figura 28 - Esquema de reconstrução geométrica representando a interface entre os fluidos real (a esquerda) e reconstruído pelo método empregado no Ansys Fluent (à direita).....	66
Figura 29 - Representação do Volume de Controle e Superfície de Controle	67
Figura 30 – Discretização em volumes de controle	67
Figura 31 - Exemplo de domínio computacional unidimensional	70
Figura 32 - Malha computacional unidimensional referente ao VC.....	71
Figura 33 - Esquema Upwind	72
Figura 34 - Esquema de solução para o caso de solidificação	74
Figura 35 - Solução segregada no Fluent.....	75
Figura 36 - Cavidade térmica.....	79
Figura 37 – Representação das vetorial da movimentação do fluido sob influência da mudança de fase do material obtida para diferentes trabalhos (t = 1000 s)	80
Figura 38 - Comparação dos resultados das linhas Solido e Liquido entre o presente trabalho e Voller e Prakash (1987)	81
Figura 39 – Representação das isotermas em t = 1000s – Comparação dos resultados para diferentes trabalhos	81
Figura 40 - Comparação das linhas Solido e Líquido para diferentes tamanhos de malha: 10x10, 20x20 e 40x40 elementos.	82
Figura 41 - Comparação dos campos de velocidades para diferentes malhas no instante t=1000 s (10x10 à esquerda, 20x20 ao centro e 40 x40 à direita)	83
Figura 42 - Molde em aço SAE 1045 construído para a experimentação.....	84
Figura 43 - Forno tipo mufla (à esquerda) e cadinho cerâmico (à direita)	84
Figura 44 - Sistema de aquisição de dados ADS1800	85
Figura 45 - Termopar com junta nua (à esquerda) e termopar encapsulado (à direita)	85
Figura 46 - Configurações testadas. Configuração A, com sensores expostos (à esquerda) e configuração B, com sensores inseridos de um corpo metálico (à direita)	86
Figura 47 - Resultados do experimento de tempo de resposta dos sensores.	87

Figura 48 -Termopar empregado nos experimentos mostrando o detalhe do revestimento e junta exposta.....	87
Figura 49 - Posicionamento dos termopares.....	88
Figura 50 - Visão geral do experimento.....	88
Figura 51 - Propriedades térmicas para o alumínio puro - condutividade térmica (k), calor específico (C_p), densidade (ρ).....	89
Figura 52 - Representação da área superficial externa do molde (A_{sup})	92
Figura 53 - Representação da área superficial interna (A_{cont})	93
Figura 54 - Foto do vazamento do metal líquido no molde.....	94
Figura 55 - Evolução da temperatura para os termopares TC1, TC2, TC4 e TC3 para o intervalo de 1000 s	95
Figura 56 - Evolução da temperatura para os termopares TC1, TC2, TC3 e TC4 durante o preenchimento da cavidade	96
Figura 57 - Evolução da temperatura para os termopares TC1, TC2, TC3 e TC4 no intervalo de 60 s	97
Figura 58 - Análise da frente de solidificação através dos termopares TC1, TC2, TC3 e TC4.....	98
Figura 59 - Coeficiente convectivo externo ao molde obtido experimentalmente.....	99
Figura 60 - Resistencia de contato entre metal/molde obtido experimentalmente	99
Figura 61 - Condição de contorno de temperatura para análise da solidificação	101
Figura 62 - Domínio computacional com malha 5 mm (à esquerda) e 1 mm (à direita)	102
Figura 63 - Comparação entre os resíduos em função da malha e passo de tempo	103
Figura 64 - Comparação entre as temperaturas em função da malha e passo de tempo	103
Figura 65 - Comparação da fração sólida em seção transversal para malha com 5mm e Δt de 1 s (à esquerda) e malha com 1 mm e Δt de 0.1 s (à direita) em um mesmo instante de tempo da simulação.	104
Figura 66 - Campo de velocidades no interior do líquido para um tempo de 2 s.....	105
Figura 67 - Comparação numérico/experimental dos resultados no ponto TC3 para um intervalo de 900 s	105

Figura 68 - Comparação numérico/experimental dos resultados no ponto TC2 para um intervalo de 900 s	106
Figura 69 - Comparação numérico/experimental para termopar central (TC3).....	107
Figura 70 - Comparação numérico/experimental para termopar central (TC2).....	107
Figura 71 - ilustração gráfica da obtenção do gradiente térmico	109
Figura 72 – Exemplo de curva de resfriamento para um metal puro registrada por três termopares (TP1, TP2 e TP3).....	109
Figura 73 - Registro do início da solidificação local experimental registrada pelos termopares TC2 e TC3	110
Figura 74 - Registro do início da solidificação local numérica para os pontos TC2 e TC3.....	110
Figura 75 - Ilustração da flutuação da leitura do termopar.....	111
Figura 76 - Tempo de início de solidificação experimental	112
Figura 77 - Tempo de início de solidificação numérica	112
Figura 78 - Gráfico da posição dos pontos em função do tempo de solidificação ..	113
Figura 79 - Comparação numérico/experimental para o sensor TC2 incluindo a faixa de erro dos termopares.....	114
Figura 80 - Comparação numérico/experimental para o sensor TC3 incluindo a faixa de erro dos termopares.....	115
Figura 81 - Comparação numérico/experimental do gradiente térmico G na frente de solidificação	116
Figura 82 - Comparação numérico/experimental da taxa de resfriamento T na frente de solidificação	116
Figura 83- Domínio 3D de simulação inicial com alumínio e ar e malha com 24 mil elementos	117
Figura 84 - Evolução da fração líquida para o primeiro caso com VOF rodado.....	118
Figura 85 - Gráfico de resíduo para rodada com VOF, Δt 0.1s e malha 1 mm	118
Figura 86 - Modificação do domínio para aumentar a estabilidade do caso	119
Figura 87 - Início do processo com solidificação próximo à parede	120
Figura 88 - Ponto TC02 na região de mudança de fase com porosidade em formação	120
Figura 89 - Última região a solidificar no topo do molde	121
Figura 90 - Comparação numérico/experimental da contração da superfície livre da peça.....	122

Figura 91 - Borda na peça experimental	122
Figura 92 - Formação do filme de oxido antes do vazamento (à esquerda) e após o vazamento (à direita).....	123

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Parâmetros utilizados para simulação em cavidade quadrada propostos por VOLLER E PRAKASH (1987).....	79
Tabela 2 - Dependência de malha para fração sólida após tempo de 250 s.....	82
Tabela 3 - Constantes para função polinomial para obtenção das propriedades do alumínio em função da temperatura	90
Tabela 4 - Setup do experimento	94
Tabela 5 - Coleta dos parâmetros de temperatura inicial do molde e temperatura inicial do alumínio empregados na simulação numérica	100
Tabela 6 - Condições de contorno para a simulação da solidificação.....	102
Tabela 7 - Registro dos inícios da solidificação ($T_s = T_{sólido}$) localmente nos pontos de correspondentes aos termopares TC2 e TC3.....	113
Tabela 8 - Velocidade da frente solidificação calculadas	114
Tabela 9 - Comparação numérico/experimental para os parâmetros térmicos de solidificação	115
Tabela 10 - Propriedades do ar empregadas na simulação	117

LISTA DE SIMBOLOS

A	Área
A_{sup}	Área superficial
A_{cont}	Área de contato entre molde e peça
a	Coeficiente do sistema linear
α	Razão de variação volumétrica
β	Coeficiente de expansão térmica
b	Termo fonte do sistema linear
c_1	Coeficiente de polinômio
c_2	Coeficiente de polinômio
c_3	Coeficiente de polinômio
C_p	Calor específico a pressão constante.
d_V	Volume infinitesimal
E	Energia interna do corpo
f_l	Fração líquida
f_s	Fração sólida
f_{V1}	Fração volumétrica da fase 1
f_{V2}	Fração volumétrica da fase 2
g	Aceleração da gravidade
G_L	Energia livre interna no líquido
G_S	Energia livre interna no sólido
h	Entalpia Sensível
H	Entalpia
h_i	Coeficiente convectivo na interface
h_{ref}	Entalpia de referência
ΔH	Variação de entalpia
k	Condutividade térmica
k_{eff}	Condutividade térmica efetiva compartilhada por duas ou mais fases
K	Permeabilidade do meio
L	Calor latente

l	Comprimento
\dot{m}	Fluxo mássico
nb	Nós vizinhos ao volume de controle
\bar{p}	Pressão estática.
q	Fluxo de calor
Q	Quantidade de calor
\dot{Q}	Taxa de transferência de calor
R_{cont}	Resistência térmica de contato
ρ	Massa específica do material
ρ_0	Massa específica de referência
ρ_s	Massa específica do material no estado sólido
ρ_L	Massa específica do material no estado líquido
S	Entropia
S_S	Entropia média no sólido
S_L	Entropia média no líquido
S_{qm}	Termo fonte para equação da conservação de quantidade de movimento
S_h	Termo fonte para equação da conservação de energia
ΔS	Variação de entropia
T	Temperatura
T_f	Temperatura de fusão
T_S	Temperatura média no sólido
T_L	Temperatura média no líquido
T_M	Temperatura média na superfície externa
T_O	Temperatura média do meio
T_V	Temperatura de vazamento do material líquido
T_{Smolde}	Temperatura na superfície molde na obtida na região da interface com a peça
T_{Smetal}	Temperatura na superfície da peça na obtida na região da interface com o molde
ΔT	Variação de temperatura
ΔT_{sup}	Diferença de temperatura entre a superfície do molde a temperatura do ar externo

T_{ref}	Temperatura de referência
t_{SL}	Tempo correspondente ao intervalo de solidificação
Vol	Volume
V_0	Volume inicial
V_s	Volume sólido
V_L	Volume líquido
ΔV	Varição volumétrica
u	Velocidade na direção x
v	Velocidade na direção y
w	Velocidade na direção z
\bar{u}_{ij}	Componente de velocidade média.
u_{ij}'	Flutuações de velocidades.
t	Tempo
X, Y, Z	Coordenada do sistema global
\mathbf{n}	Vetor unitário normal
x_{ijk}	Componentes dos eixos cartesianos.
u_{ij}	Componente de velocidade instantânea.
μ	Viscosidade dinâmica
Δf_L	Varição da fração líquida
\emptyset	Variável genérica escalar
Γ_{\emptyset}	Coeficiente difusivo relacionado a \emptyset
φ	Variável genérica escalar
∇_{\emptyset}	Gradiente da variável genérica

Subscri

tos

i, j	Notação indicial
up	Referente ao valor à montante

Lista de operadores e símbolos especiais

\approx	Aproximadamente igual
$\partial/\partial t$	Derivada parcial em relação ao tempo
$\partial/\partial x_i$	Derivada parcial em relação às coordenadas generalizadas
∇^2	Operador divergente do gradiente

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	27
1.1	MOTIVAÇÃO	29
1.2	OBJETIVO	30
1.3	ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	31
2	REVISÃO DA LITERATURA	32
2.1	SOLIDIFICAÇÃO	32
2.1.1	<i>Transferência de calor na Solidificação</i>	43
2.1.1.1	<i>Zona Pastosa ou “mushy zone”</i>	45
2.1.1.2	<i>Transferência de calor entre metal e molde</i>	45
2.2	INTRODUÇÃO AO MODELAMENTO MATEMÁTICO	47
2.2.1	<i>Introdução ao modelamento da mudança de fase</i>	47
2.2.2	<i>Introdução ao modelamento da porosidade por contração (rechupes)</i>	48
2.3	DEFINIÇÃO DO PROBLEMA	51
3.	METODOLOGIA	52
3.1	DEFINIÇÃO DA GEOMETRIA A SER UTILIZADA	52
3.2	EQUAÇÕES DE GOVERNO	54
3.2.1	<i>Equação de conservação da massa</i>	54
3.2.2	<i>Equação de conservação da quantidade de movimento</i>	54
3.2.3	<i>Equação de conservação de energia</i>	55
3.2.4	<i>Método da Entalpia</i>	55
3.2.5	<i>Equações de governo com termos fonte aplicados ao método de entalpia-porosidade</i>	56
3.2.6	<i>Modelamento da superfície livre do fluido</i>	61
3.2.6.1	<i>Conservação de momento aplicado a técnica VOF</i>	64
3.2.6.2	<i>Conservação de energia aplicada a técnica VOF</i>	64
3.2.6.3	<i>Esquema de reconstrução da interface VOF</i>	65
4	MÉTODO DO VOLUMES FINITOS	67
4.1	DISCRETIZAÇÃO E MÉTODOS DE SOLUÇÃO	68
4.1.1	<i>Discretização das equações de governo</i>	69
4.1.2	<i>Discretização para mudança de fase pelo método da entalpia</i>	73
4.1.3	<i>Acoplamento pressão velocidade</i>	75

4.1.4	<i>Método de Solução para o sistema algébrico</i>	76
5	VALIDAÇÃO NUMÉRICA	78
5.1	ESTUDO COMPARATIVO COM LITERATURA UTILIZANDO ANSYS FLUENT	78
6	ANÁLISE EXPERIMENTAL	84
6.1	MATERIAIS E MÉTODOS EMPREGADOS NA ANÁLISE EXPERIMENTAL	84
6.1.1	<i>Análise da resposta dinâmica dos sensores de temperatura</i>	85
6.2	PROPRIEDADES TÉRMICAS DO ALUMÍNIO PURO	89
6.3	PARÂMETROS DE SIMULAÇÃO OBTIDOS EXPERIMENTALMENTE	90
7	RESULTADOS E DISCUSSÕES	94
7.1	EXPERIMENTO	94
7.2	SIMULAÇÃO NUMÉRICA	100
7.2.1	<i>Simulação numérica do processo de solidificação</i>	100
7.2.1.1	Condições de contorno	101
7.2.1.2	Análise de sensibilidade de malha	102
7.3	COMPARAÇÃO NUMÉRICO/ EXPERIMENTAL DOS CAMPOS DE TEMPERATURA	105
7.4	PARÂMETROS TÉRMICOS DE SOLIDIFICAÇÃO.....	107
7.4.1	<i>Determinação dos Parâmetros Térmicos de Solidificação</i>	108
7.4.2	<i>Obtenção dos Parâmetros Térmicos de Solidificação</i>	109
7.5	SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE AVALIAÇÃO DA POROSIDADE POR CONTRAÇÃO VOLUMÉTRICA	116
7.5.1	<i>Comparação numérico/ experimental da contração volumétrica</i>	119
8	CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA PESQUISA FUTURAS	124
	REFERÊNCIAS	126

1 INTRODUÇÃO

É sabido que os estudo dos processos de solidificação são de grande importância para os campos da engenharia, tais como: congelamento de alimentos, soldagem, fundição de metais e ligas metálicas. No campo metalúrgico praticamente todos os componentes metálicos, em alguma fase do seu processamento, passam por um processo de fusão e solidificação, por exemplo na fabricação de peças fundidas ou na produção de lingotes para posterior aplicação de processos como conformação ou usinagem. Tal fato torna o processo de fundição de metais e ligas metálicas um dos principais processos de fabricação dentro da indústria.

De acordo com Anuário Estatístico do Setor Metalúrgico (2017, p17),

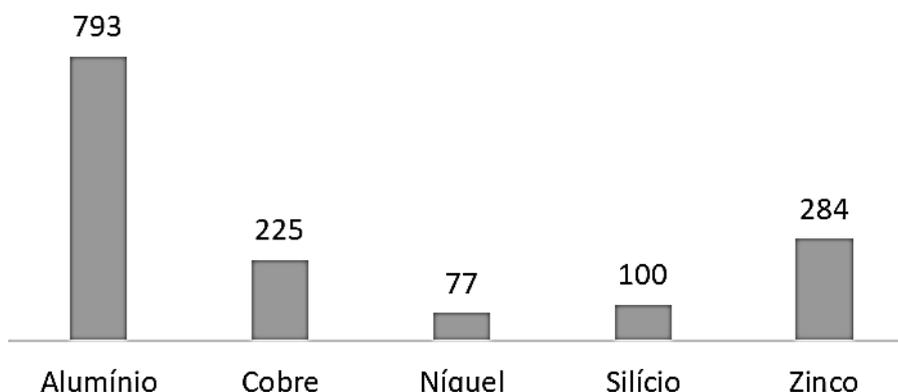
O setor apresenta expressiva importância no cenário econômico brasileiro, com vasta cadeia produtiva dos segmentos ligados à metalurgia, usinagem e produção de manufaturados metálicos, sendo a base de outras atividades relevantes para o país, como a indústria automobilística, construção civil e bens de capital.

Em 2016, o PIB da metalurgia totalizou cerca de US\$ 40,7 bilhões participando com 1,3% do PIB brasileiro e 5,4% do PIB da Indústria.

As exportações de produtos da transformação dos metálicos (incluídos os compostos químicos), em 2016, totalizaram US\$ 17,6 bilhões, e importações de US\$ 6,6 bilhões.

Tratando-se especificamente dos metais não ferrosos a Figura 1 mostra uma estratificação dos volumes de produção brasileira para o ano de 2016, onde pode-se notar um volume bastante expressivo para o alumínio.

Figura 1 - Produção brasileira de metais não ferrosos em 2016 [10³ ton]



Fonte: Elaborado pelo autor (2018), com base no Anuário Estatístico do Setor Metalúrgico (2017, p13)

O uso elevado do alumínio pode ser justificado pelas inúmeras vantagens na sua adoção, dentre as quais pode-se citar:

- Elevada resistência a corrosão e agentes químicos;
- Elevada condutividade térmica;
- Baixa densidade;
- Facilidade de processamento (temperaturas de fusão menores);
- Elevada condutividade elétrica;
- Possibilidade de produção de inúmeras ligas.

O alumínio é utilizado na indústria normalmente na forma de liga metálica com o objetivo de incrementar suas propriedades, que vão desde melhorar o processamento do material até propriedades úteis à aplicação dos componentes, tais como resistência mecânica e resistência a elementos químicos (FELBERBAUM 2010). Dentro deste universo, o alumínio aparece como excelente opção para inúmeras aplicações.

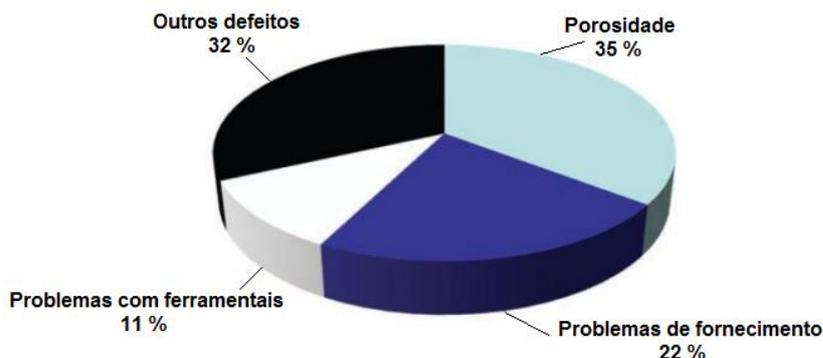
Dentre os métodos de processamento mais comuns destaca-se a fundição que, de acordo com Sata (2010) apresenta como vantagem a fabricação de geometrias complexas ao passo que acarreta em uma série de defeitos tais como:

- Preenchimento incompleto da cavidade do molde;
- Aprisionamento de gases;
- Inclusões sólidas;
- Porosidade por contração (Rechupes);
- Trincas devido a contração térmica.

Apesar de ser um processo muito antigo, este ainda é objeto de estudo em vários setores da engenharia uma vez que há uma infinidade de ligas, processos e aplicações que, por sua vez, geram uma infinidade de cenários onde torna-se difícil compreender e dominar totalmente os resultados obtidos. Sata (2010) afirma que o efeito dessas variáveis é bastante complexo e carece primeiramente de uma compreensão adequada do processo de solidificação, que por sua vez constitui-se como objeto de estudo deste trabalho.

Estudos voltados a fundição sob pressão, por exemplo, revelam que, dentre as principais reclamações envolvendo produtos fundidos, a porosidade é um fator de grande relevância (ver Figura 2).

Figura 2 - Principais defeitos em fundição



Fonte: Adaptado pelo autor a partir de Twarog, 2011 apud Nandakumar, 2014, p. 20

Tal relevância não se expressa apenas no número de ocorrências de defeito mas também pode ser observada no impacto que tal defeito gera no produto final. Como exemplo pode-se citar o caso da liga de alumínio ASTG03 (Al, Si7%, Mg0,3%), onde uma porosidade volumétrica de 1% pode acarretar em uma redução de 50% no limite de resistência a fadiga e 20% no limite de ruptura do material quando comparado ao mesmo material isento de falhas, conforme Sata 2010, apud J.Y Buffiere, 2000, p.2.

Por fim, cabe ressaltar que avanços rápidos na compreensão da física da solidificação foram possíveis com o aumento das pesquisas envolvendo a modelagem matemática desse fenômeno e que, apesar das complexidades envolvidas, as simulações do processo de solidificação e predição de falhas tem levado a indústria de fundição de metal a altos níveis de sofisticação.

1.1 MOTIVAÇÃO

O estudo da solidificação utilizando ferramentas numéricas é bastante conhecido no meio científico. Tal afirmação pode ser constatada a partir das inúmeras contribuições que são citadas ao longo do presente trabalho. Da mesma forma pode-se dizer a respeito da investigação da porosidade em fundição de metais.

Apesar de tais contribuições, ainda são grandes as reclamações voltadas à existência de defeitos em peças fundidas, o que indica que há um campo ainda carente de pesquisadores, engenheiros e técnicos que busquem soluções continuamente. Partindo-se desse ponto, o presente trabalho tem o intuito de permitir a discussão acerca do tema, aumentando a parcela de contribuições da tentativa de tornar as empresas cada vez mais produtivas e com qualidade cada vez maior agregada aos seus produtos.

1.2 OBJETIVO

Avaliando-se os aspectos anteriormente citados, observa-se a necessidade continua de estudos voltados a compreensão e predição destes defeitos em componentes fundidos.

Tendo em vista a importância do alumínio no campo industrial optou-se por utilizá-lo como objeto de investigação neste trabalho. Os objetivos então são definidos como:

- Realizar uma análise numérico-experimental do processo de solidificação de um corpo de alumínio aplicando o método da entalpia-porosidade utilizando o programa computacional comercial ANSYS FLUENT®;
- Aplicar uma metodologia para predição de porosidade integrando o uso de programa ANSYS FLUENT® utilizando modelamento de superfície livre do líquido por meio do método VOF (*Volume Of Fluid*).
- Comparar os resultados numéricos de solidificação e porosidades com os resultados experimentais.

Cabe ressaltar que o termo porosidade pode ser empregado para descrever inúmeros defeitos que geram na peça poros ou vazios (ausência de material). No presente estudo o termo porosidade, quando descrito, tratará especificamente da contração volumétrica do material que é comumente chamado de rechupe.

1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

A dissertação está estruturada em 8 capítulos, sendo que no presente capítulo faz-se uma introdução de forma a contextualizar a importância do assunto ao leitor bem como a apresentação dos objetivos do presente trabalho.

O capítulo 2 traz uma revisão da literatura a respeito do processo de solidificação, abordando conceitos importantes que serão utilizados no decorrer do trabalho. Este capítulo reúne ainda os princípios de transferência de calor na solidificação, faz uma introdução ao seu modelamento matemático e traz uma introdução ao modelamento das porosidades.

O capítulo 3 apresenta a definição do caso de estudado e aprofunda o modelamento matemático, trazendo as equações de governo necessárias para a solução dos problemas propostos no trabalho que são o estudo da solidificação e a análise da porosidade.

O capítulo 4 apresenta a discretização das equações de governo e os métodos de solução disponíveis no programa comercial para a solução dos equacionamentos apresentados no capítulo 3.

O capítulo 5 traz uma validação da abordagem escolhida de entalpia-porosidade empregada para a análise da solidificação, utilizando resultados de literatura para comparação com os resultados obtidos no programa ANSYS FLUENT® juntamente com as condições de contorno apropriadas.

O capítulo 6 aborda com maior profundidade os materiais e métodos experimentais empregados.

O capítulo 7 apresenta os resultados numéricos e experimentais e traz as comparações numérico-experimentais realizadas.

Por fim, o capítulo 8 faz um fechamento do trabalho tecendo as conclusões obtidas e traz adicionalmente as sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO DA LITERATURA

Neste capítulo serão abordados os principais aspectos envolvendo os processos de solidificação e formação de porosidades que são necessários para a compreensão do estudo proposto.

2.1 SOLIDIFICAÇÃO

Registros de estudos de soluções para problemas de solidificação são apresentados já no século XIX, como é o caso dos chamados problemas de Stefan, que consistem em problemas dependentes do tempo onde a posição do contorno deve ser determinada como uma função do tempo e do espaço.

Conforme Santos (2001), a solidificação pode ser entendida como o processo de transformação da fase líquida em fase sólida devido a extração de calor em regime transiente entre metal líquido, molde e ambiente, sendo que o resultado desse processo será determinado pelas características do molde, liga metálica e condições de contorno existentes.

De acordo com Garcia (2007), a solidificação é descrita como um processo de transferência de calor em regime transiente onde um corpo deverá liberar energia na forma de calor latente para que o processo de mudança de fase ocorra.

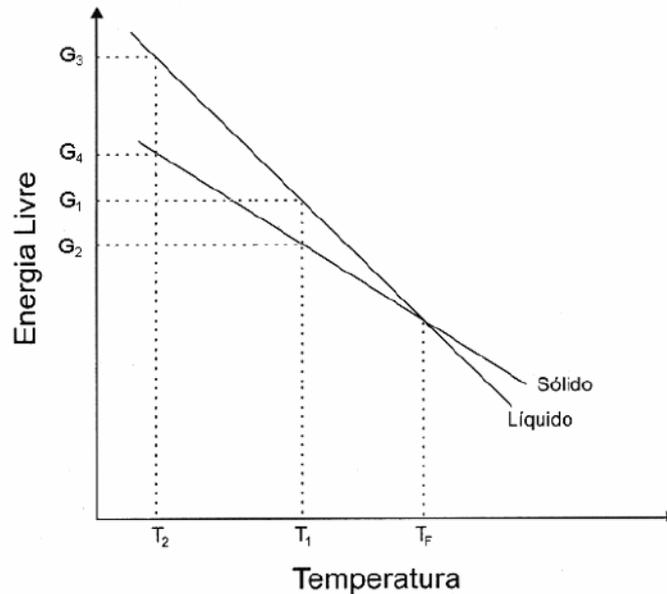
A solidificação, conforme Santos (2006), pode ser entendida como a mudança de fase do estado líquido para o sólido devido à redução da energia livre do meio. A fase sólida, por apresentar menor energia livre é, portanto, mais estável. Para que a solidificação ocorra, é necessário que haja liberação de determinada quantidade de calor latente ocasionando uma redução de energia que, por sua vez, reduz a agitação das moléculas até níveis em que o material se torna sólido.

De acordo com Beskow (2008) o ponto de fusão pode ser definido como a temperatura em que a fase líquida e sólida apresentam energias livres iguais. Ou seja, possuem a mesma capacidade de realizar trabalho.

$$G_L = G_S \tag{2.1}$$

onde G_L corresponde à energia livre interna no líquido e G_S à energia livre interna no sólido. A Figura 3 ilustra esta afirmação.

Figura 3 - Representação da energia livre para diferentes fases do material



Fonte: Adaptado de Garcia, 2001 apud Beskow, 2008, p. 32

A energia livre existente em cada fase é descrita na equação (2.2)

$$G = E - T S_e + p V_{ol} \quad (2.2)$$

Onde G é a energia livre no meio, E corresponde à energia interna da fase, T é a temperatura absoluta, S corresponde à entropia do meio, p é a pressão e V_{ol} é o volume da fase.

A entalpia de cada fase é definida como:

$$H = E + p V_{ol} \quad (2.3)$$

Onde H corresponde à entalpia.

Substituindo-se a equação (2.3) em (2.2) temos que:

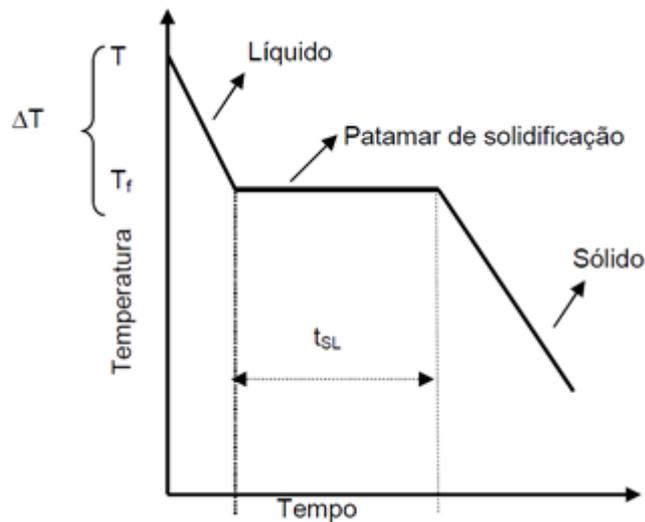
$$G = H - T S_e \quad (2.4)$$

Com base na afirmação de que as energias livres correspondentes à parte sólida e líquida são iguais na temperatura de fusão, a equação (2.4) pode ser reescrita como:

$$H_S - T_S S_{eS} = H_L - T_L S_{eL} \quad (2.5)$$

Uma substância pura a uma determinada temperatura T_f pode, portanto, existir, em condições de equilíbrio termodinâmico, tanto na forma sólida quanto na forma líquida. Essa temperatura é conhecida como ponto de fusão da substância que é o ponto em que os dois estados podem coexistir em equilíbrio. Acima dessa temperatura o material é líquido e abaixo é sólido. A Figura 4 mostra uma curva de resfriamento de uma substância pura onde esta condição é ilustrada.

Figura 4 - Curva de resfriamento de um material puro



Fonte: Adaptado de Beskow (2008)

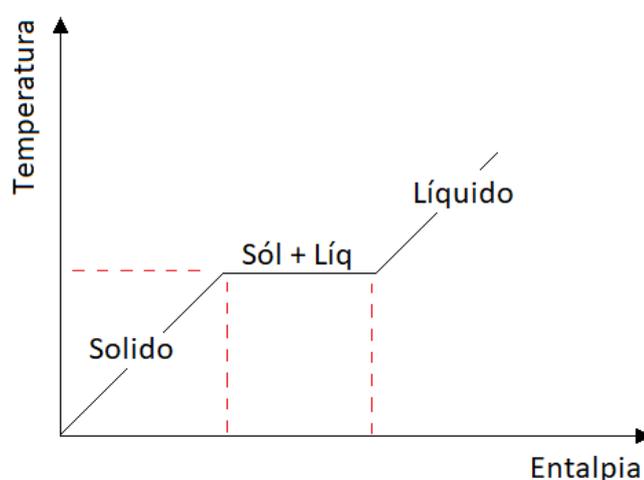
Por sua vez, a variação da entalpia ΔH corresponde a quantidade de calor latente L devido à mudança de fase e a diferença de entropia entre as fases ΔS mostra a variação em ordenação microscópica que ocorre pela transformação de um líquido em sólido, portanto a equação (2.5) pode ser reescrita como:

$$\Delta S_e = \frac{L}{T_f} \quad (2.6)$$

A equação (2.6) evidencia que a reordenação que ocorre pela transformação de um líquido em sólido pode ser quantificada pela relação existente entre calor latente e o ponto de fusão.

Em resumo, não é possível descrever precisamente todo o processo de solidificação utilizando-se apenas dos valores de temperatura devido ao fato de inúmeros materiais apresentarem temperatura constante ao longo da mudança de fase. Faz-se necessária, portanto, a escolha de outros parâmetros que ainda apresentem variação durante a mudança de fase, neste caso a entalpia surge como opção pois seu valor sofre variações mesmo durante a mudança de fase, conforme ilustrado na Figura 5.

Figura 5 - Temperatura vs. Entalpia na solidificação

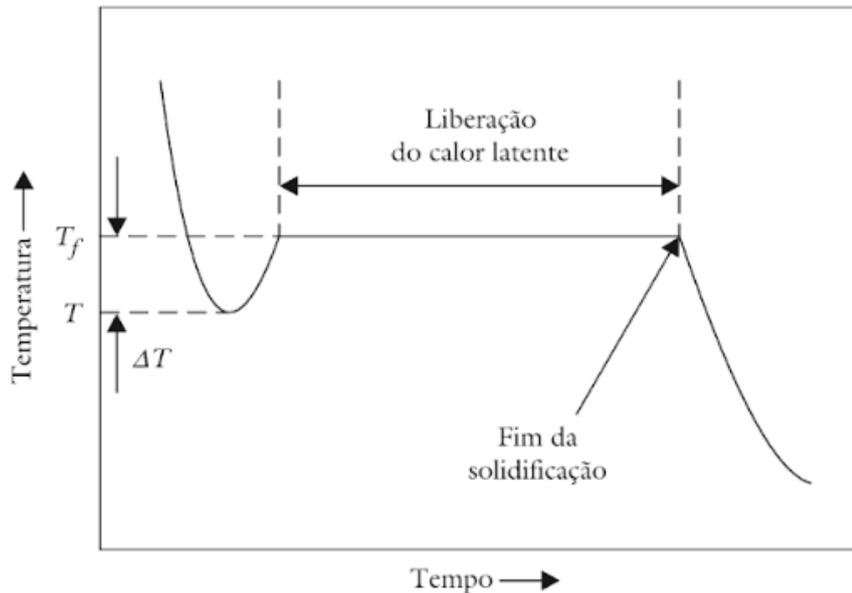


Fonte: O próprio autor (2019)

Essa compreensão se faz necessária para o entendimento da abordagem numérica utilizada neste trabalho, que traz um método de entalpia para avaliação da solidificação e será abordado mais adiante.

Conforme Santos (2006), o processo de nucleação exige que o metal líquido, seja levado a uma temperatura menor que a de fusão para que o processo se inicie. A essa diferença entre a temperatura de fusão e a temperatura necessária para vencer a barreira energética e iniciar o processo dá-se o nome de super-resfriamento. A Figura 6 ilustra esta condição para um metal puro, onde pode-se notar um resfriamento ΔT abaixo da temperatura de fusão T_f para iniciar a nucleação sólida, seguido de um aquecimento até a temperatura de fusão devido a liberação e calor latente que se mantém, por sua vez, até o final da solidificação.

Figura 6 - Curva de resfriamento de um material a partir de uma temperatura superior a T_f apresentando super resfriamento

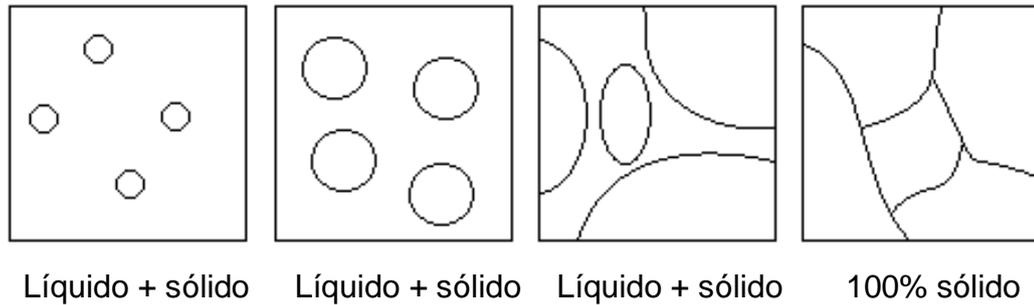


Fonte: Adaptado de Santos (2006)

Ainda de acordo com Santos (2006), este super-resfriamento pode variar de frações de grau até dezenas, dependendo do material, massa e condições de nucleação. Em condições normais os metais tipicamente utilizados na indústria exigem super-resfriamentos muito pequenos, muito próximos a temperatura de fusão. Neste caso, a curva de resfriamento passa a ser simplificada conforme mostrado na Figura 4, anteriormente.

Conforme Garcia (2007), do ponto de vista microscópico a solidificação pode ser entendida como um processo de duas etapas sucessivas: nucleação e crescimento de grãos, que resultam na transformação da fase do material de líquida para sólida. Durante o processo de nucleação aparecem no interior do líquido pequenas partículas da nova fase, neste caso sólida, a partir das quais prossegue o processo de crescimento de grãos até a solidificação completa da peça, conforme ilustrado na Figura 7.

Figura 7 - Processo de nucleação e crescimento dos grãos até a solidificação completa



Fonte: O próprio autor (2018)

Quando o sólido é formado dentro do próprio líquido sem que haja a interferência ou contribuição energética de elementos ou agentes estranhos ao sistema metal líquido/metal sólido, diz-se que a nucleação é homogênea (GARCIA, 2001). Do contrário a nucleação será chamada heterogênea.

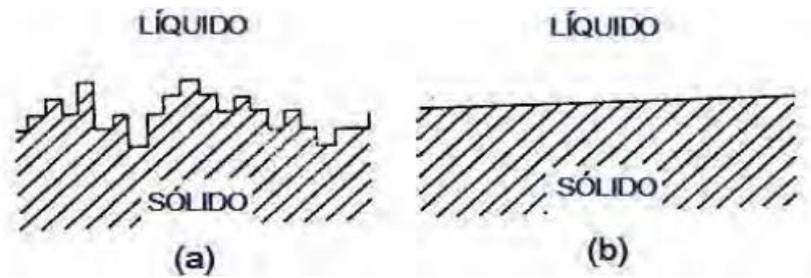
Na prática, em processos industriais a nucleação acontece de forma heterogênea, causada pelo resfriamento mais acentuado nas paredes do molde, existência elementos de liga ou impurezas que possam existir no metal.

De acordo com Campos Filho (1978), com o núcleo sólido formado, passa-se a uma fase de crescimento que depende da facilidade que os átomos encontram para se ligar na interface de crescimento. Pode-se destacar dois tipos de interface sólido/líquido:

- Interface Rugosa ou Difusa: é quando a transição ocorre ao longo de uma série de camadas atômicas;
- Interface Lisa, Plana ou Facetada: caracteriza-se pela separação entre a fase sólida e a fase líquida por meio de uma faixa abrupta, nítida e plana em nível atômico.

Na interface difusa, os átomos são ordenados à medida que encontram posições apropriadas no reticulado e até que todo o calor latente tenha sido liberado. Na interface lisa admite-se que a transição líquido/sólido ocorra em uma única camada atômica, embora na realidade da solidificação essa transição ocorra provavelmente em uma faixa de algumas camadas atômicas. A Figura 8 ilustra diferentes interfaces de crescimento onde podem ser observados os aspectos citados anteriormente.

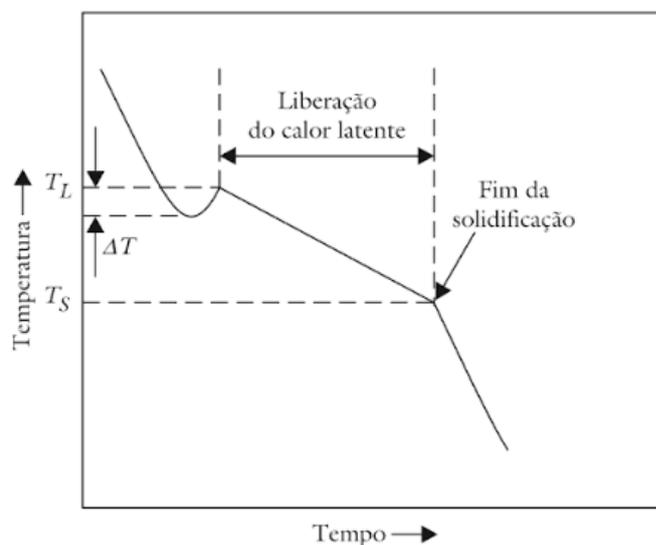
Figura 8 - Tipos de interface: (a) rugosa ou difusa; (b) lisa, plana ou facetada.



Fonte: Adaptados de Toledo, 2013 apud GARCIA ,2007, p-42.

A solidificação de ligas metálicas é ainda mais complexa que a solidificação de metais puros. Devido ao fato de as ligas conterem elementos de liga adicionados ao metal base, todo o processo de solidificação irá ocorrer em uma faixa de temperatura (ver Figura 9) e não a uma temperatura constante, conforme mostrado anteriormente na Figura 6. A esta faixa de temperatura dá-se o nome de intervalo de solidificação. Ressalta-se que neste caso, ocorrerá a formação de interfaces difusas na transição sólido/líquido.

Figura 9 - Curva de resfriamento de uma liga metálica

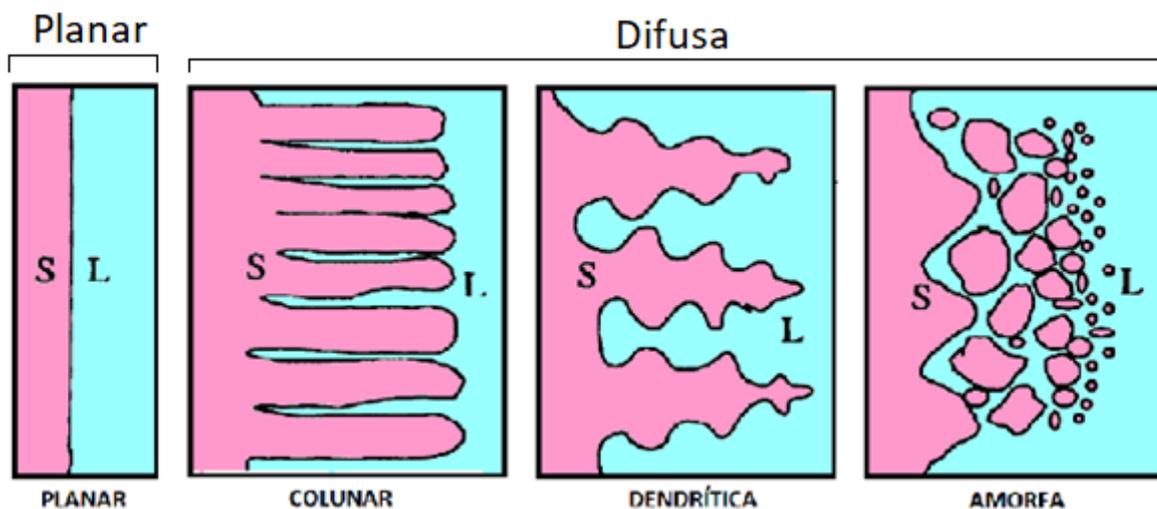


Fonte: Adaptado de Santos (2006)

A propagação da frente de solidificação ocorre com formatos que dependem das condições de resfriamento e composição do material. A Figura 10 ilustra estas diferentes interfaces. Ressalta-se que tais formações na região de transição não são objeto de estudo no presente trabalho. Sua existência no processo de solidificação

será abordada matematicamente como uma zona de transição, que será detalhada nos itens seguintes.

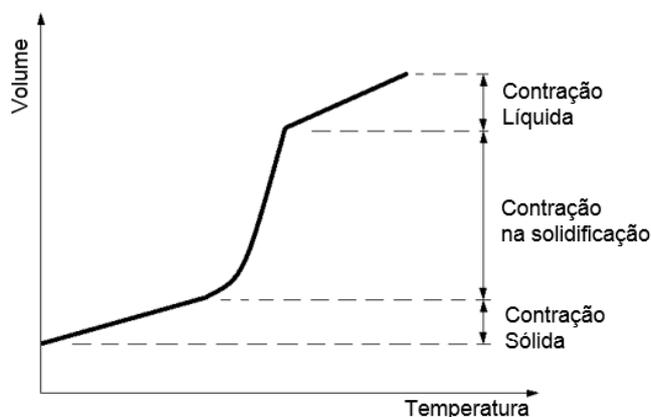
Figura 10 - Diferentes formações nas interfaces Sólido/Líquido



Fonte: Adaptado de Odone et al. (2014)

O processo de transição entre líquido e sólido implica ao material a alteração de suas propriedades, sendo a densidade um dos principais aspectos para a geração de defeitos na peça acabada. A dilatação volumétrica em função da temperatura é um efeito intrínseco ao material e, portanto, ocorre no material líquido assim como no material já solidificado, porém este efeito é mais pronunciado na transição entre fases. A Figura 11 exemplifica estas variações citadas anteriormente.

Figura 11 - Variação da densidade no material em função da temperatura



Fonte: O próprio autor (2019)

De acordo com Timothy (1999) as contrações volumétricas na transição sólido/líquido variam entre 3 a 8% para o alumínio enquanto Trovant e Argyropoulos (1995) informam um valor de contração aproximada de 1% na fase líquida, 1 a 10% na transição de fase e um valor desprezível para a contração sólida de metais em geral.

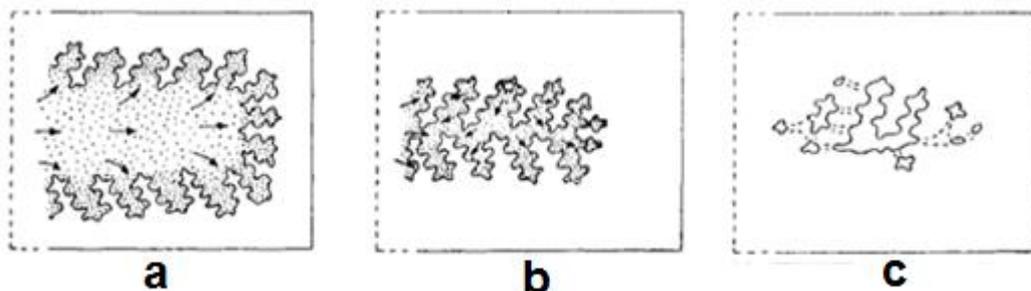
De modo geral, a qualidade da peça fundida depende de uma série de fatores que variam desde o material avaliado até própria forma da peça. A contração líquida, no entanto, não gera um problema significativo tendo em vista que em um sistema de fundição normal o metal é alimentado de forma contínua para dentro da cavidade do molde. Esta característica de realimentação tende a minimizar o impacto da contração enquanto o metal na cavidade esfria e se contrai.

Com a redução da temperatura do material, inicia a transição sólido/líquido e quantidades significativas de contração volumétrica tendem a ocorrer.

Lee (2001) comenta que, dependendo da forma com que o corpo solidifica haverá uma obstrução do fluxo de metal líquido para algumas regiões impedindo a compensação da contração e, portanto, haverá formação de porosidade.

À medida que o metal se solidifica e encolhe, o vazio de encolhimento é continuamente preenchido com metal líquido. À medida que as regiões mais frias completam sua solidificação, diminuem as chances de o líquido adicional realimentar os vazios de contração, conforme mostrado na Figura 12.

Figura 12 - Processo de formação de porosidade por contração



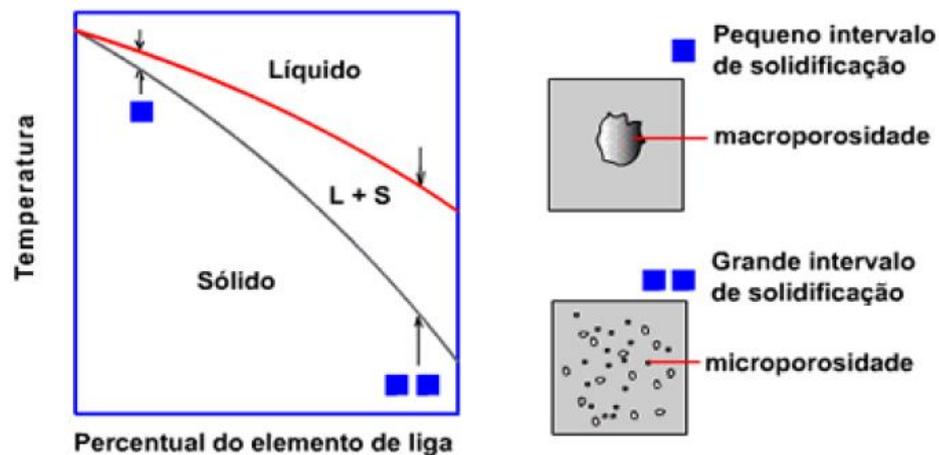
Fonte : Adaptado de Lee (1990)

Observando a Figura 12.a vê-se o metal ainda na fase líquida na região mais central, enquanto as regiões próximas a parede apresentam-se solidificadas. A frente de solidificação avança à medida que a temperatura vai sendo reduzida (Figura 12.b). As setas nas figuras indicam a realimentação por metal líquido para as regiões em

solidificação devido a contração volumétrica do material. Caso a alimentação de material líquido seja interrompida (por exemplo com a obstrução precoce do canal de alimentação) a realimentação de metal líquido será comprometida e a contração do metal não poderá ser compensada resultando no vazio (porosidade) na peça (Figura 12.c).

Um fator importante para a determinação do tipo de porosidade é o intervalo de solidificação do material, tal que ligas metálicas com pequeno intervalo de solidificação tendem a gerar macroporosidades enquanto ligas com grande intervalo de solidificação tendem a gerar microporosidades.

Figura 13 - Efeito do intervalo de solidificação na formação de porosidades.



Fonte: Anuário estatístico do setor metalúrgico brasileiro (2017)

Metais e ligas com pequenas faixas de temperaturas de soldificação, como metais puros e ligas eutéticas tendem a formar grandes cavidades na peça, enquanto ligas com grandes intervalos solidificação, que possuem uma ampla faixa de temperaturas sobre as quais o material está em um estado de interface difusa tendem a apresentar pequenos, mas numerosos, poros de retração dispersos na peça, conforme mostrado na Figura 13.

O quadro mostrado na Figura 14 mostra o intervalo de solidificação para diferentes ligas de alumínio. Pode-se observar que a inclusão de elementos de liga gera grande impacto no comportamento do material e, portanto, nos possíveis defeitos encontrados na peça.

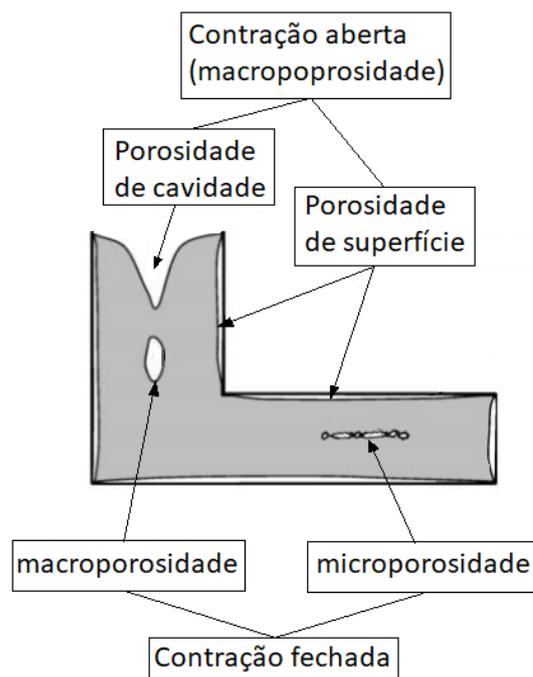
Figura 14 – Quadro com intervalo de solidificação – Alumínio e Ligas

Liga	Faixa de solidificação aproximada (°C)		
Al 99.5	660 - 657	3°	Faixa de solidificação curta
Al - Si 12	575 - 565	10°	
Al -Si 12 Cu	575 - 565	10°	
Al-Si5Cu3	580 - 520	60°	Faixa de solidificação longa
Al-Si7 Mg	615 - 550	50°	

Fonte: Adaptado pelo próprio autor a partir de Santhi (2018)

A formação das porosidades pode apresentar-se de diferentes formas no componente fundido, conforme abordado por Stefanescu (2005).

Figura 15 - Tipos de porosidades em um componente fundido



Fonte: Adaptado de Stefanescu (2005).

Stefanescu (2005) ainda cita que a formação das porosidades abertas, ou seja, em contato com a atmosfera, estão mais relacionadas à contração do material enquanto as porosidades fechadas estão mais relacionadas ao crescimento de grãos do material e acúmulo de gases. Tal fato tem validade no caso de componentes fundidos onde há uma superfície livre como por exemplo a fundição por gravidade que constitui o processo onde o material líquido é vazado por uma abertura na parte

superior do molde, preenche gradativamente a cavidade por ação da gravidade e o canal de alimentação permanece sob condição de pressão atmosférica.

Stefanescu (2005) observa ainda que a macroporosidade em cavidade fechada também poderá ocorrer por efeito da contração do material no caso de processos de fundição sob pressão, por exemplo, onde, devido a presença de um molde metálico, cria-se uma casca sólida devido ao rápido resfriamento que impede a formação de cavidades abertas.

Por fim, pode-se dizer que a forma, quantidade e posição das porosidades estão relacionadas à uma série de fatores tais como:

- Propriedades térmicas do material fundido;
- Propriedades do molde;
- Geometria da peça;
- Contaminantes;
- Falhas de processo de fabricação.

Ressalta-se que o presente trabalho traz uma abordagem voltada à contração volumétrica como objeto de estudo e não tem por objetivo explorar todos os mecanismos de geração de falhas em peças fundidas. A exclusão da microporosidade por gases do presente trabalho deu-se devido à complexidade dos fenômenos físicos envolvidos bem como a dificuldades de validação experimental.

2.1.1 Transferência de calor na Solidificação

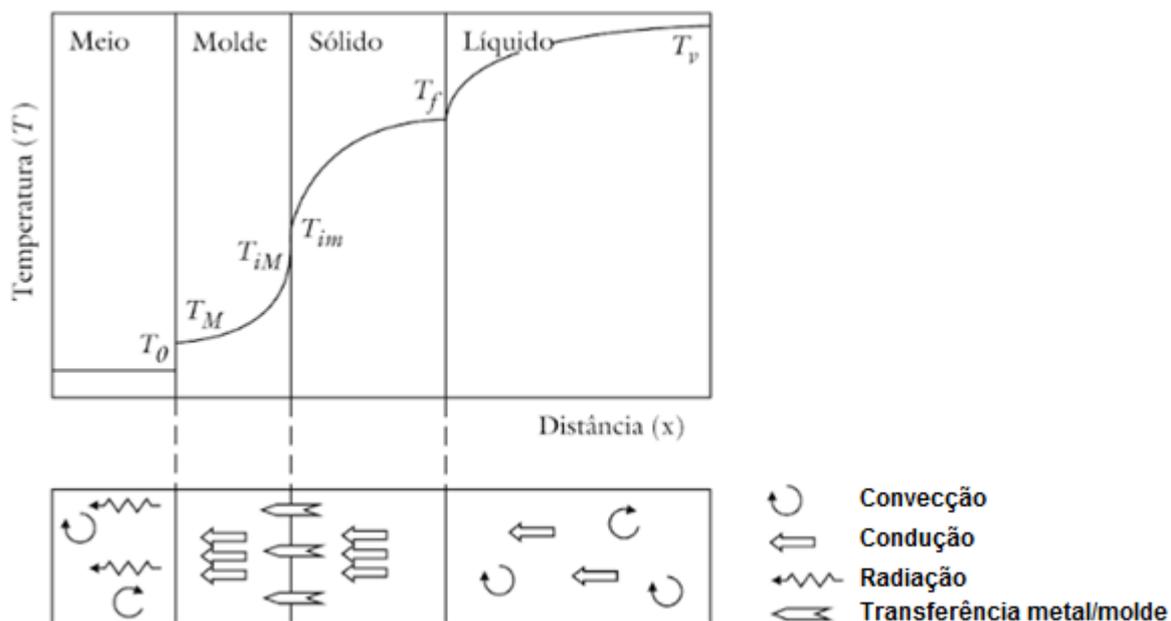
Conforme apresentado anteriormente, onde abordaram-se aspectos metalúrgicos da solidificação, destaca-se como um aspecto de grande importância a forma da interface existente entre o sólido e o líquido durante os processos de solidificação do material. Esta interface durante o processo de resfriamento do material move-se com o tempo e tal efeito é governado pela taxa com que o calor latente é liberado durante o processo. Isso significa que a localização da interface de solidificação será definida por um problema de transferência de calor no sistema.

É sabido que se tem diferentes formas de transferência de calor que são: condução, convecção e radiação. Conforme Beskow (2008), dentro do processo de

solidificação dos metais as três formas citadas podem ocorrer tal que a condução ocorre no interior do molde e no interior do material submetido à solidificação, que pode estar sólido ou líquido. A convecção ocorre entre uma superfície e um fluido quando eles se encontram em temperaturas diferentes e em movimento relativo. Tal processo irá existir entre a superfície externa do molde e o meio ambiente, e nas correntes convectivas no interior do metal líquido. O fenômeno da radiação ocorre em toda a região externa da peça pela emissão de calor na forma de ondas eletromagnéticas. No processo de solidificação a radiação está relacionada com a perda de calor entre molde e ambiente ou então entre metal e ambiente quando o mesmo se encontra exposto.

Essas parcelas de transferência de calor são representadas na Figura 16 onde T_0 representa a temperatura do meio, T_M a temperatura da superfície externa do molde, T_{iM} a temperatura externa do metal que solidifica, T_f a temperatura de fusão do metal e T_v a temperatura de vazamento do metal.

Figura 16 - Representação da transferência de calor em um processo de solidificação



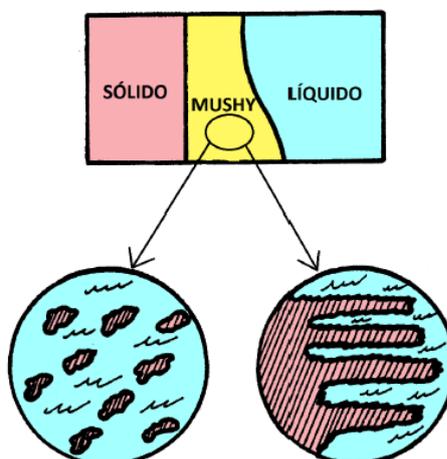
Fonte: Adaptado de Santos (2001)

Dentro desse processo de transferência de calor alguns aspectos serão estratificados e apresentados a seguir. Estes serão de grande importância para a contextualizar as variáveis adotadas no presente trabalho.

2.1.1.1 Zona Pastosa ou “mushy zone”

Tomando-se a Figura 16, especificamente na região de transição sólido/líquido, observa-se a representação desta transição por uma linha dividindo ambos domínios. Conforme apresentado na Figura 10, esta região pode apresentar diferentes formas e, portanto, diferentes propriedades, porém, tendo-se em vista que a análise desta não é foco em nosso estudo, conforme já mencionado, a mesma será tratada a partir deste ponto do trabalho apenas como zona pastosa ou *mushy zone* que é ilustrada na Figura 17.

Figura 17 - Representação da zona pastosa ou *mushy zone*



Fonte: Adaptado de Odone et al. (2014)

2.1.1.2 Transferência de calor entre metal e molde

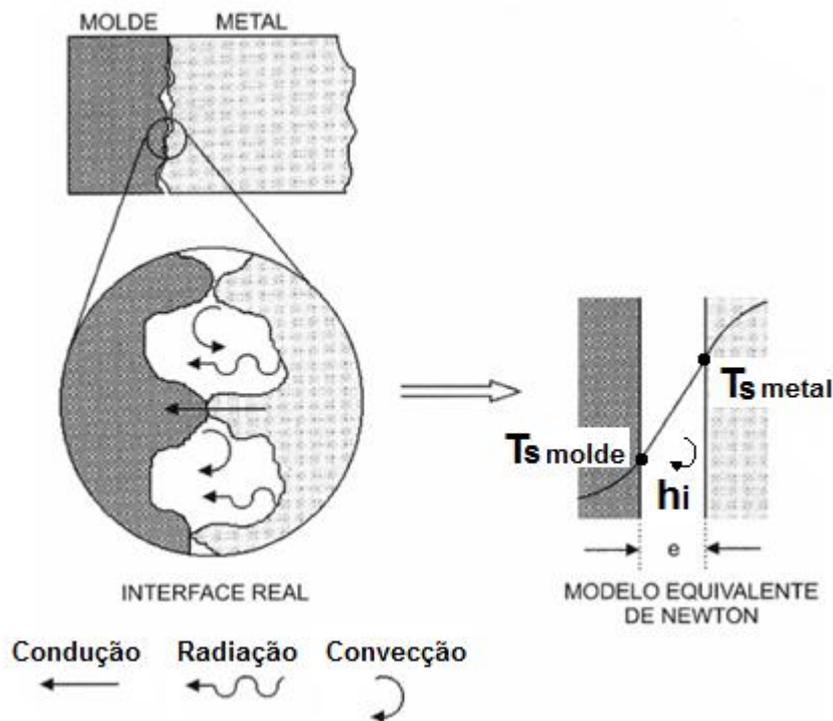
Um aspecto de grande relevância na extração do calor, principalmente em moldes metálicos onde a extração de calor é bastante acentuada, é a resistência de contato entre o metal e o molde que o contém. Conforme Beskow 2008, apud Prasana Kumar, 1991, quando o metal entra em contato com o molde há uma resistência ao fluxo de calor durante a solidificação da peça. Tal resistência é resultado de uma combinação de fatores tais como:

- Molhabilidade incompleta devido a diferença de afinidade entre molde e metal;
- Rugosidade interna do molde;

- Uso de desmoldantes;
- Contração do metal após a solidificação gerando uma separação física entre peça e molde.

De acordo com Garcia (2001), esta região apresenta transferência de calor por condução, devido aos pontos de contato físico, por convecção, geradas pelos gases aprisionados na interface, e por radiação nas regiões de afastamento, conforme ilustrado na Figura 18.

Figura 18 - Representação da transferência de calor na interface metal/molde



Fonte: Adaptados de Garcia (2001)

Jabbari (2006) e Santos (2001), apresentam trabalhos voltados ao tratamento das interfaces metal/molde onde empregam abordagens simplificadoras utilizando o modelo de Newton mostrado na Figura 18. Nesta abordagem, o fluxo de calor entre as superfícies é simplificado por um espaçamento com uma resistência global e é dado pela equação (2.7)

$$q_N = h_i (T_{s_{metal}} - T_{s_{molde}}) \quad (2.7)$$

onde: q_N corresponde ao fluxo de calor, h_i corresponde ao coeficiente de transferência metal-molde, T_{is} e T_{im} são, respectivamente, a temperatura interna da superfície do metal e a temperatura interna da superfície do molde.

2.2 INTRODUÇÃO AO MODELAMENTO MATEMÁTICO

Este item aborda inicialmente alguns aspectos introdutórios importantes para a compreensão dos modelos empregados na realização do estudo.

2.2.1 Introdução ao modelamento da mudança de fase

É amplamente aceito que o uso de um modelo computacional que simule o fenômeno de um processo de fundição contribui para a redução de tempo e recursos durante o projeto. No entanto, a atividade de simular o processo de fundição completo, incluindo a análise de microestrutura e formação de defeitos, não apresenta solução fácil.

Em problemas práticos de solidificação as propriedades termofísicas podem variar de acordo com a fase do material, temperatura e concentração de elementos de liga. Além disso, os mecanismos de transferência de calor (convecção, condução e radiação) podem acontecer simultaneamente.

A modelagem matemática analítica e/ou numérica torna, em muitos casos, as análises mais econômicas quando comparadas com as técnicas experimentais, favorecendo a compreensão dos processos bem como a tomada de decisões de projeto. Além disso, estas soluções podem fornecer uma visão física mais profunda para o problema em questão.

Embora os métodos analíticos possam oferecer uma solução exata e matematicamente elegante, devido às suas limitações esses tipos de soluções abordam, principalmente, os casos unidimensionais de uma região infinita ou semi-infinita, traz condições iniciais e de contorno simplificadas e propriedades térmicas constantes.

Em diferentes trabalhos que abordam simulações do processo de fundição é comum o emprego de simplificações de modo a obter soluções mais estáveis e mais rápidas, tais como a eliminação da etapa do preenchimento da cavidade do molde assumindo-se um preenchimento instantâneo, como é o caso de Voller e Prakash (1987), que trabalharam apenas o método de solução para evolução da frente de

solidificação com malha fixa. Em outro trabalho descrito por Trovant e Argyropoulos (1995) o estudo se deu negligenciando-se as correntes convectivas no interior do líquido bem como os efeitos da transferência de calor por radiação. Verma et. al. (2015) faz uma avaliação da solidificação em um molde de cavidade cúbica utilizando modelamento bifásico ar-líquido acoplado a simulação da solidificação com o modelo de tratamento de interface chamado *Volume of Fluid* (VOF).

Segundo Wile et. al. (2010), de forma geral, uma análise completa envolvendo a avaliação da solidificação de um componente envolve:

- Prever o preenchimento com metal líquido;
- Estabelecer a distribuição de temperatura no molde e no metal líquido;
- Descrever como esta distribuição de temperatura muda a partir da solidificação;
- Avaliar a composição química local como resultado da segregação;
- Prever o tamanho e a forma dos grãos;
- Prever a distribuição de gases dentro da peça;
- Prever o espaçamento dendrítico secundário;
- Descrever as distorções da peça conforme ela solidifica-se;
- Prever a distribuição de tensões residuais dentro da fundição;
- Mapear os valores mínimos de propriedades mecânicas.

Segundo Barkhudarov (1995) esta lista ainda não contempla todas as possíveis análises existentes no processo de fundição, por isso, este processo de avaliação torna-se bastante complexo, o que conduz a necessidade de simplificações.

2.2.2 Introdução ao modelamento da porosidade por contração (rechupes)

Do ponto de vista da simulação da porosidade por contração sólido-líquido, conhecido como rechupe (ver Figura 12), as primeiras tentativas numéricas para prever esse defeito foram baseadas na existência de bolsas de metal líquido isoladas na peça. Embora este método forneça uma indicação de onde a porosidade se forma, o tamanho real e a forma das cavidades de retração apresentavam difícil previsão (BARKHUDAROV 1995).

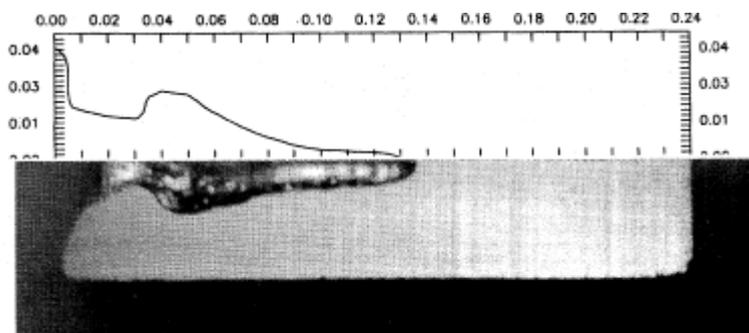
Mmafuku e Chijjiwa (1983) desenvolveram um método baseado na conservação de massa na região das cavidades de metal líquido isoladas. A contração

total do volume é calculada a partir do somatório da contração de volume de controle numérico. A análise é feita baseando-se na fração sólida presente na zona isolada a partir do momento em que a essa região não é mais alimentada por metal líquido. Caso a fração sólida esteja abaixo de um valor crítico esta zona é considerada com potencial para geração de falha.

Inúmeros esforços tem sido realizados na tentativa de modelar os defeitos relacionados a contração do material. Stefanescu (2005) apresenta uma grande revisão dos métodos de detecção de porosidades. O autor cita, por exemplo, as funções critérios, que são modelos empíricos para avaliação de defeitos de porosidade com base em uma relação com o gradiente de temperatura, dentre estes o mais conhecido é o critério de Niyama (NIYAMA et. al. 1982) que permite identificar local mais provável para defeitos de encolhimento.

Outros trabalhos baseiam-se na solução da transferência de calor e conservação da massa para avaliar os vazios na superfície da peça, como Trovant e Argyropoulos (1995) que propuseram um modelo para o encolhimento da superfície livre do metal resultante da mudança de densidade, conforme mostrado na Figura 19.

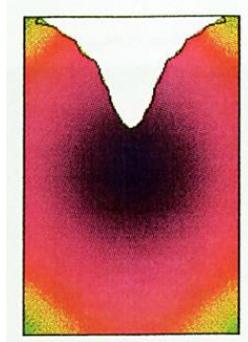
Figura 19 – Exemplo de resultado numérico/experimental para contração



Fonte: Adaptado de Trovant e Argyropoulos (1995)

Barkhudarov (1995) realizou uma avaliação da solidificação e porosidade em um corpo cilíndrico utilizando o modelo de entalpia juntamente com o algoritmo VOF para predição da formação da interface sólido-líquido por efeito da contração volumétrica. O resultado pode ser observado na Figura 20.

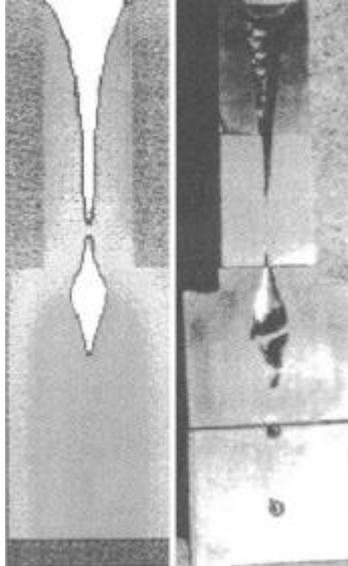
Figura 20 – Resultado numérico de cavidade aberta por contração volumétrica



Fonte: Adaptado de Barkhudarov (1995)

Beech 1998, publicou um trabalho envolvendo condução de calor entre metal e molde acoplado ao cálculo da contração volumétrica. A alteração do volume foi calculada em função do volume atualizado pela fração líquida do material (ver Figura 21).

Figura 21 - Resultado numérico (à esquerda) e experimental (à direita) da contração da superfície do material apresentado por Beech (1998).

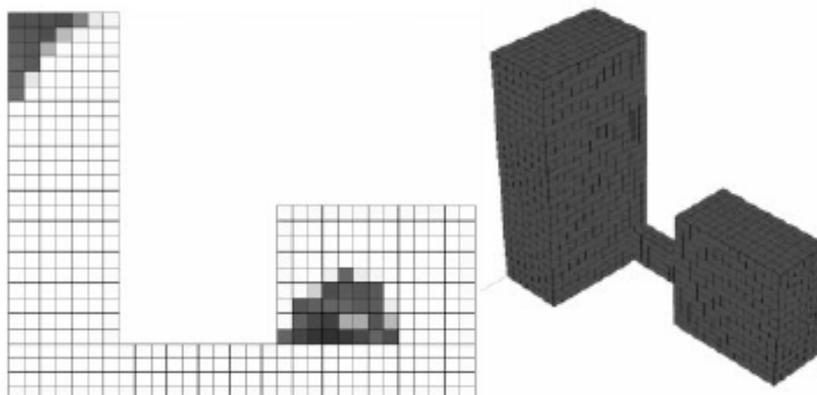


Fonte: Adaptado de Beech (1998)

Reis et al. (2007) empregaram uma análise utilizando um critério de pressão no domínio, associando a formação de porosidades às regiões líquidas isoladas por elementos em processo final de solidificação cuja pressão no meio cai à níveis críticos impedindo o fluxo de realimentação da região isolada, gerando um poro. Esta técnica

exige um acoplamento com as equações de momento uma vez que são necessários os cálculos dos campos de pressão no domínio.

Figura 22 - Formação de poros apresentada por Reis et al. (2007) utilizando critério de pressão crítica no domínio.



Fonte: Adaptado de Reis et al. (2007)

2.3 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

Conforme mencionado anteriormente, a avaliação dos problemas de fundição em uma forma completa, incluindo todas as variáveis e condições de contorno presentes no processo, é bastante complexa.

Porém, tendo em vista o interesse do presente trabalho em avaliar o processo de forma abrangente, optou-se por realizar uma avaliação numérico-experimental envolvendo a transferência de calor com modelamento da mudança de fase, modelamento do fluxo convectivo no meio líquido e contração volumétrica para observação de defeitos por rechupes. Para isso utilizou-se uma solução conjunta das equações de energia, continuidade, momento em um domínio bifásico com inclusão do método de VOF para mapeamento da superfície livre do fluido. Nesse processo, optou-se por obter alguns parâmetros necessários à simulação de forma experimental, reduzindo o tempo necessário para validações.

A seguir são apresentados de forma simplificada o problema experimental proposto bem como os fenômenos físicos envolvidos. Optou-se por apresentar previamente este cenário com o intuito de contextualizar o leitor acerca de todos os estudos que serão desenvolvidos ao longo do trabalho visando embasar a bagagem teórica necessária para resolver o problema proposto.

3 METODOLOGIA

Este capítulo traz inicialmente a geometria definida para o estudo numérico-experimental e aborda as equações de governo empregadas para a solução do problema proposto.

3.1 DEFINIÇÃO DA GEOMETRIA A SER UTILIZADA

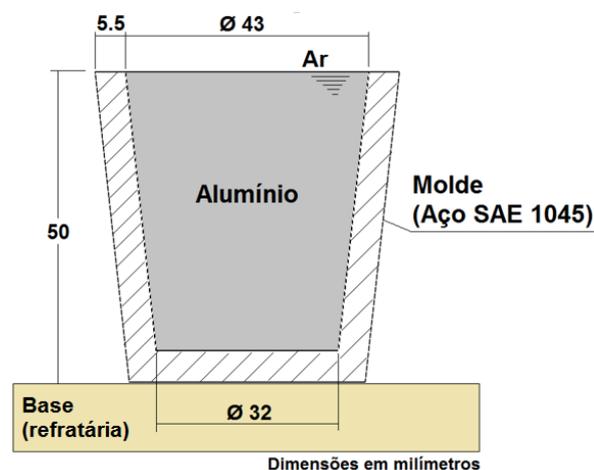
Observa-se que muitos autores, a exemplo de Voller e Prakash (1987), Trovant e Argyropoulos (1995), Barkhudarov (1995), Beskow (2008), Li (2018), descrevem experimentos utilizando geometrias simples para o emprego dos modelos matemáticos de solução e análise dos resultados, como por exemplo geometrias em 2D tais como retangulos ou em 3D tais como cilindros, cubos, placas, entre outros.

Pode-se notar que não há na literatura uma geometria “padrão” para a unificação dos trabalhos, sendo livre a definição da geometria por parte dos autores.

Sendo assim, optou-se por desenvolver o caso de estudo tridimensional utilizando uma geometria simplificada que apresentasse uma superfície livre de modo a permitir a avaliação da evolução da contração volumétrica no material.

Escolheu-se então a geometria apresentada na Figura 23, que é constituída pela região descrita por “Alumínio”, que compreende a porção metálica a ser fundida, e pelos demais elementos que são a “Base refratária” e o “Molde (Aço SAE 1045)” que formam o conjunto necessário à obtenção da peça pelo processo de fundição.

Figura 23 - Geometria empregada na análise numérico/experimental



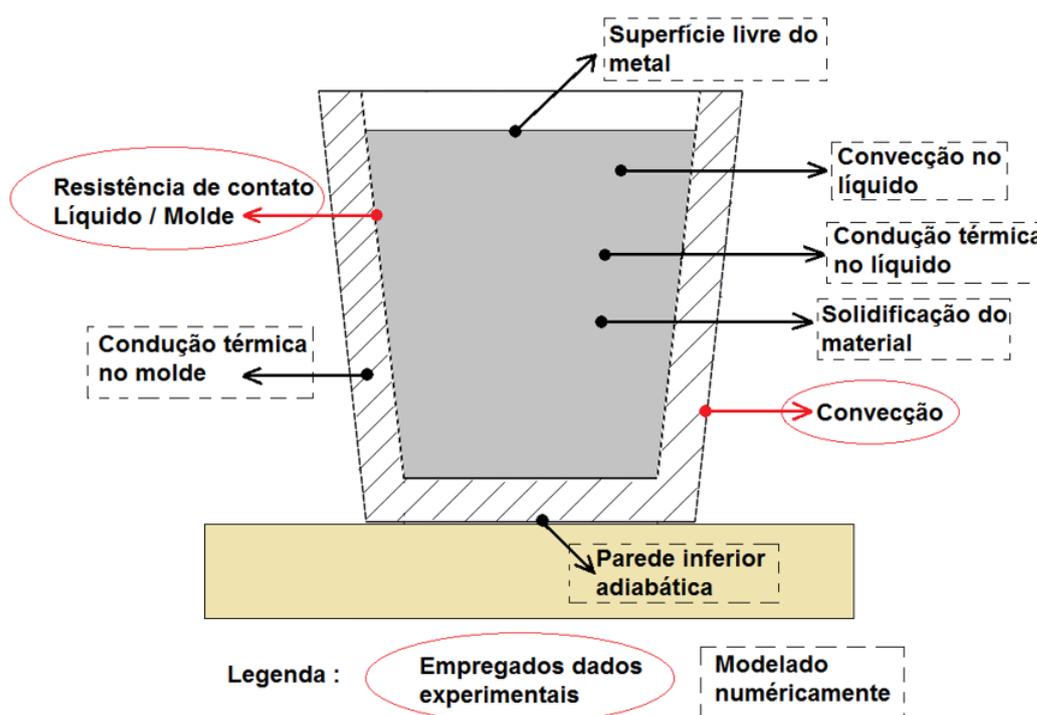
Fonte: O próprio autor (2019)

Ressalta-se que, por questões de simplificação, o modelo poderia ser resolvido empregando-se uma abordagem 2D porém, tendo-se em vista que o modelamento em 3D constituía opção computacionalmente viável, optou-se por empregar esta abordagem.

Conforme apresentado anteriormente na definição da solidificação, a solução de um problema desta natureza apresenta como principal aspecto a solução da transferência de calor em regime transiente. Apesar de correta, esta definição pode conduzir o leitor à percepção de que a solução é baseada apenas na resolução do campo de temperatura no domínio, porém, o caso estudado apresenta correntes convectivas no interior do líquido devido a variação da densidade do material em função da temperatura. Tal efeito gera, portanto, a necessidade de obter também uma solução das equações da conservação da quantidade de movimento e massa para o sistema.

A Figura 24 traz uma representação dos fenômenos que são abordados no presente trabalho. A mesma figura ainda destaca os parâmetros de convecção externa ao molde bem como a resistência de contato líquido-molde os quais optou-se por obtê-los experimentalmente.

Figura 24 - Desenho esquemático das grandezas avaliadas no caso de estudo



Em resumo, optou-se por uma abordagem com as seguintes etapas:

- Avaliar a transferência de calor no metal e molde;
- Resolver a liberação de calor latente durante a mudança de fase;
- Avaliar a convecção interna do fluido na parte líquida do metal;
- Avaliar a contração do material.

Os próximos itens abordam as equações de governos necessárias para a resolução dos mecanismos destacados anteriormente.

3.2 EQUAÇÕES DE GOVERNO

A seguir são apresentadas as equações de governo para o escoamento de fluidos e de transferência de calor utilizadas para o modelamento do processo de solidificação.

3.2.1 Equação de conservação da massa

A lei de conservação da massa estabelece que a mesma não pode ser destruída ou criada. Trazendo-se este conceito para um volume de controle infinitesimal pode-se dizer que seu volume, dV , a sua massa específica, ρ , podem variar com o tempo, porém a sua massa total, ρdV , deverá permanecer inalterada.

A equação da conservação da massa é descrita por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (3.1)$$

Onde x, y, z são as coordenadas do sistema global e u, v, w são as componentes de velocidade.

3.2.2 Equação de conservação da quantidade de movimento

A segunda lei de Newton mostra que a taxa de variação da quantidade de movimento de uma partícula corresponde a soma de todas as forças que atuam sobre a partícula. Tais forças podem ser de superfície ou forças de corpo.

A equação de conservação da quantidade de movimento a ser satisfeita por qualquer material, seja este fluido ou sólido é descrita por:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + S_{qm} = 0 \quad (3.2)$$

Os índices $i, j, k = 1, 2, 3, u$ correspondem à velocidade da partícula, t é o tempo, ρ é a massa específica do fluido, p é a pressão estática, μ é a viscosidade dinâmica do fluido e S_{qm} é o termo fonte da equação da quantidade de movimento

3.2.3 Equação de conservação de energia

De acordo com a 1ª lei da termodinâmica estabelece-se que: para uma partícula de fluido a taxa de variação da energia desta é igual a soma da taxa total de calor adicionado à partícula com a taxa total de trabalho realizado sobre esta. Tal relação é descrita por:

$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho c_p u_j T)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + S_h \quad (3.3)$$

onde c_p corresponde ao calor específico, k representa a condutividade S_h é o termo fonte.

3.2.4 Método da Entalpia

A resolução numérica dos problemas de mudança de fase pode ser dividida em método de malha adaptativa e malha fixa. No método de malha adaptativa o equacionamento utilizado no processo de mudança de fase é aplicado separadamente para cada fase. Em função desse aspecto um equacionamento adicional deve ser aplicado para descrever a transição entre sólido e líquido. Além disso, a malha deve passar por um processo de “adaptação” ao fenômeno, ou seja, a cada passo de tempo da simulação a malha é refeita de forma a acompanhar a evolução da frente de solidificação. No método de malha fixa uma mesma formulação das equações é feita para ambas as fases e a transição entre sólido e líquido é computada utilizando-se um termo fonte apropriado para modelar esse processo. O presente trabalho adota o

método da entalpia para o modelamento da mudança de fase utilizando o conceito de malha fixa.

Um aspecto importante na solidificação é que o modelo permita computar adequadamente as velocidades do escoamento de forma a aplicar a velocidade “zero” à partícula solidificada. Tal efeito é proporcionado por meio do emprego de termos fonte adequados às equações de conservação da quantidade de movimento e estes são baseados em modelos de pseudo-porosidades formulados a partir da lei de Darcy que descreve o fluxo de um fluido em escoamento através de meios porosos, conforme proposto por Voller e Prakash (1987). Neste método as velocidades da partícula são computadas avaliando-se a fração líquida local para definir as regiões solidificadas. Odone (2014) destaca que este método é vantajoso sob o ponto de vista de que é capaz de captar a transição de fase tanto para materiais com mudança de fase isotérmica (ver Figura 6) e frente de solidificação plana (ver Figura 10) quanto materiais com mudança de fase que ocorrem em uma faixa de temperatura (ver Figura 9) que, por sua vez, apresentam interface difusa (ver Figura 10).

A escolha do método de entalpia-porosidade se deu em função da disponibilidade de um código computacional comercial (ANSYS FLUENT®) para a execução das análises numéricas.

3.2.5 Equações de governo com termos fonte aplicados ao método de entalpia-porosidade

Conforme abordado anteriormente, algumas considerações a respeito dos termos fonte das equações de energia e quantidade de movimento devem ser aplicadas visando a correta avaliação do processo de solidificação.

Sabe-se que a entalpia sensível do material pode ser descrita pela equação (3.4). Tal valor corresponde a parcela de calor que é transferido no sistema resultando na variação da temperatura no meio líquido e no meio sólido, fora do intervalo de solidificação.

$$h = \int_{T_{ref}}^T c_p(T) dT \quad (3.4)$$

onde c_p é o calor específico a pressão constante e T_{ref} corresponde à temperatura de referência do sistema.

Conforme descrito no item 2.1, a variação da entalpia ΔH corresponde a quantidade de calor latente L que ocorre devido à mudança de fase, que por sua vez é função da temperatura,

$$\Delta H = f(T) \quad (3.5)$$

sendo que esta função é válida para para o intervalo $0 < \Delta H < L$, que compreende a perda de calor durante a mudança de fase. Portanto a variação total da entalpia H do material desde o início do processo de preenchimento da peça, com o líquido superaquecido, até o término do processo, com a peça já totalmente solidificada e em temperaturas abaixo da temperatura de fusão T_f , é descrita por:

$$H = h + \Delta H \quad (3.6)$$

O termo fonte S_h mostrado na equação (3.3) pode então ser reescrito de modo a introduzir a variação da entalpia para o modelamento da mudança de fase.

$$S_h = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Delta H) - \nabla \cdot (\rho\vec{V}\Delta H) \quad (3.7)$$

Um dos principais aspectos que devem ser obtidos na simulação de mudança de fase é a compreensão da porção da célula que está no estado sólido ou líquido. Para valores de calor latente total igual a 0 entende-se que material está sólido, mesmo o material estando na temperatura de fusão. Quando o calor latente assume o valor L , significa que o material está totalmente líquido mesmo na temperatura de fusão.

O termo utilizado para descrever esta característica é a fração líquida f_L que representa o percentual da célula que esta sendo ocupada por material no estado líquido e é empregado juntamente à variação da entalpia de modo a controlar a participação do termo fonte em cada célula.

$$\Delta H = L \times f_L \quad (3.8)$$

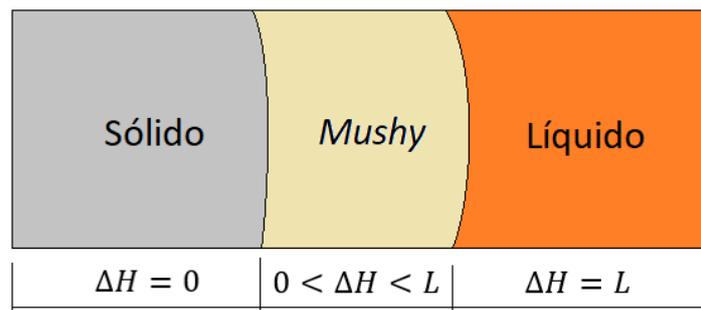
Portanto, quaisquer partículas cujo termo fonte satisfaça a condição $0 < \Delta H < L$, caracteriza a existência da *mushy zone* naquela região, ou seja, caracteriza a existência de material em processo de mudança de fase.

Dessa relação mostrada na equação (3.8) tem-se portanto que:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \text{Se } f_L = 0, T \leq T_s, & \text{em que } \Delta H = 0 \\ \text{Se } 0 < f_L < 1, T_s < T < T_L, & \text{em que } 0 < \Delta H < L \\ \text{Se } f_L = 1, T \geq T_L, & \text{em que } \Delta H = L \end{array} \right\} \quad (3.9)$$

A Figura 25 ilustra as regiões mostradas na equação (3.9).

Figura 25 - Ocorrência da *mushy zone* em função da variação da entalpia ΔH



Fonte: o próprio autor (2018)

Da relação (3.8) define-se uma equação que permite obter a fração líquida a partir do campo de temperatura, tal que:

$$f_L = \frac{\Delta H}{L} \quad (3.10)$$

onde:

$$f_L \left\{ \begin{array}{ll} 0, \text{ se } T \leq T_s & (\text{sólido}) \\ \frac{T - T_s}{T_L - T_s} & (\text{mushy zone}) \\ 1, \text{ se } T \geq T_L & (\text{Líquido}) \end{array} \right\} \quad (3.11)$$

Do ponto de vista da avaliação da velocidade das partículas na transição sólido-líquido, o método aplicado no presente trabalho e abordado previamente no item 3.2.4, baseia-se no modelo de pseudo-porosidades obtidos da lei de Darcy, tal que as equações de conservação da quantidade de movimento recebem termos fonte adequados a esta aplicação e se utilizam também da fração líquida para a identificação da *mushy zone*.

A lei de Darcy para o meio poroso descreve que (ROCHA 2003):

$$\vec{V} = -\frac{K}{\mu} \nabla p \quad (3.12)$$

onde K corresponde a permeabilidade do meio. Segundo Voller e Prakash (1987) a medida que a porosidade diminui e, portanto, a permeabilidade diminui, os valores de velocidade também diminuem até atingirem um valor zero na solidificação.

A equação de Carman e Kozeny é uma relação utilizada para calcular a queda de pressão de um fluido em escoamento através de um leito de corpos sólidos. Esta equação escrita em função da fração líquida adquire a forma mostrada na equação (3.13).

$$\nabla p = -C \frac{(1-f_L)^2}{f_L^3} \vec{V} \quad (3.13)$$

onde C corresponde a uma constante de correção e permite obter o termo fonte de forma que a *zona mushy* pode ser relacionada a um meio poroso. Dessa maneira descrevem-se os termos fonte para as equações de movimento S_u e S_v como:

$$S_u = B_u = -C \frac{(1-f_L)^2}{f_L^3 + q} u \quad (3.14)$$

$$S_v = B_v + S_b = -C \frac{(1-f_L)^2}{f_L^3 + q} w + S_b \quad (3.15)$$

onde C é uma constante que depende do tipo de porosidade S_b é o termo de flutuabilidade utilizado para introduzir no termo fonte o efeito da convecção natural na

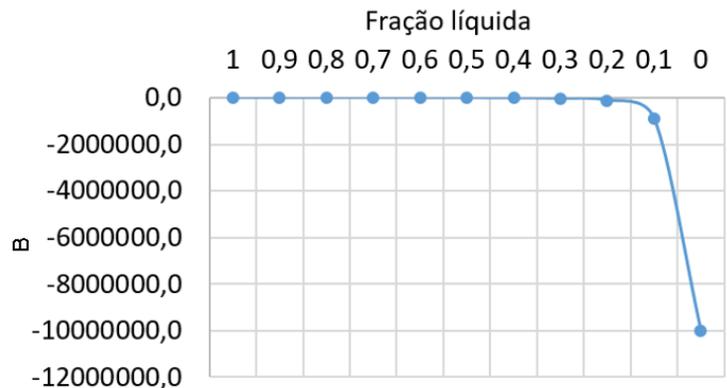
porção líquida do domínio, q é um valor pequeno utilizado para evitar divisão por zero na equação quando a fração líquida for igual a 1. O valor de B é definido por:

$$B = -C \frac{(1-f_L)^2}{f_L^3+q} \quad (3.16)$$

O valor de B varia de zero até um valor grande em função da fração líquida. Na porção líquida o valor de B , torna-se zero e a equação de momento é calcula normalmente para o material totalmente líquido. A medida que o valor de B aumenta, o valor do termo fonte torna-se relevante para o cálculo e, portanto a relação de meio poroso de Darcy torna-se aplicável. A medida que a fração líquida se aproxima de zero (material sólido) o valor de B torna-se muito grande, fazendo com que a equação de governo seja dominada pelo termo fonte, forçando a velocidade a um valor próximos de zero. A Figura 26 mostra um exemplo da variação de B para um caso com $C=1000$ e $q=0,0001$, onde pode-se observar o efeito anteriormente abordado.

Figura 26 - Exemplificação da variação de "B"

C	fL	q	B
1000	1	0,0001	0,0
1000	0,9	0,0001	-260,6
1000	0,8	0,0001	-703,0
1000	0,7	0,0001	-1486,4
1000	0,6	0,0001	-2961,6
1000	0,5	0,0001	-5995,2
1000	0,4	0,0001	-13104,5
1000	0,3	0,0001	-33579,3
1000	0,2	0,0001	-118518,5
1000	0,1	0,0001	-900000,0
1000	0	0,0001	-10000000,0



Fonte: o próprio autor (2019)

Para o termo S_b existente na equação de quantidade de movimento para a componente v , conforme abordado por Voller e Prakash (1987), assume-se a aproximação de Boussinesq (FERZIGER, 2002). Nesta aproximação, a densidade do fluido é função da temperatura, porém sua variação só é relevante no termo de empuxo. Neste caso a densidade é tratada como um valor constante em todas as equações utilizadas para resolver o problema, exceto para o termo de força de corpo

na equação de conservação de quantidade de movimento linear, onde a densidade varia linearmente com a temperatura.

O termo S_b é então descrito por:

$$S_b = \frac{\rho g \beta (h - h_{ref})}{c} \quad (3.17)$$

onde β é o coeficiente de expansão térmica e h_{ref} é o valor de referência para o calor sensível e g é a aceleração da gravidade.

Por fim, as equações de momento (3.2) e energia (3.3) são reescritas tridimensionalmente de forma a avaliar o processo de mudança de fase com a presença de correntes convectivas presentes no fluido. Destaca-se a presença do termo com aproximação de Boussinesq na equação (3.20) para computar o efeito gravitacional na convecção interna no líquido.

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} u) - \nabla \cdot (\mu \nabla u) = -\frac{\partial p}{\partial x} - C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3 + q} u \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} v) - \nabla \cdot (\mu \nabla v) = -\frac{\partial p}{\partial y} - C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3 + q} v \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} w) - \nabla \cdot (\alpha \nabla w) = -\frac{\partial p}{\partial y} - C \frac{(1 - f_L)^2}{f_L^3 + q} w + \frac{\rho g \beta (h - h_{ref})}{c} \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V} h) - \nabla \cdot (\alpha \nabla h) = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho \Delta H) - \nabla \cdot (\rho \overline{\vec{V} \Delta H}) \quad (3.21)$$

3.2.6 Modelamento da superfície livre do fluido

O método *Volume of Fluid* (VOF) é utilizado para reconstrução de interfaces e tem sido usado extensivamente para tratar problemas com interfaces líquido-gás. A gama de áreas que utilizam este métodos de solução para o problema de advecção de interfaces é muito abrangente. Alguns exemplos colunas de bolhas em líquidos, misturas óleo-gás no interior de tubulações, jatos de líquido, flutuação de plataforma e navios, processos de fundição de metais, entre outros.

Atualmente a maioria dos códigos de dinâmica dos fluidos computacional usa o método de volume de fluido (VOF) para a etapa de advecção da interface, inclusive o programa ANSYS FLUENT®, empregado neste trabalho.

Uma particularidade deste método é que o mesmo não é comum para problemas de solidificação pelo fato de que instabilidades numéricas foram muitas vezes experimentadas devido as condições abruptas para a temperatura nas interfaces, conforme comenta Reitzle (2016). Porém, a natureza transiente da superfície livre do material durante encolhimento pode ser analisada utilizando a metodologia VOF.

Nesta metodologia, a interface entre os fluidos é representada através das *frações de volume* de um dos fluidos em células computacionais. A advecção é feita redistribuindo o conteúdo desse fluido entre as células adjacentes, movendo-o pelas faces da malha.

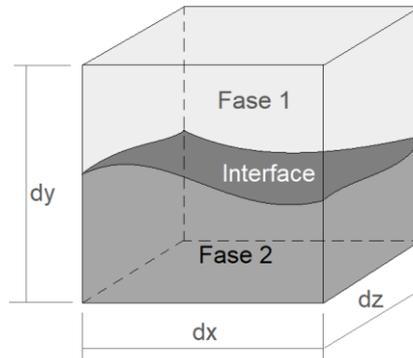
A formulação VOF baseia-se no fato de que dois ou mais fluidos (ou fases) não são interpenetrantes. De acordo com FLUENT® (2015) esta técnica permite modelar dois ou mais fluidos resolvendo um único conjunto de equações de momento e rastreando a fração de volume de cada um dos fluidos em todo o domínio. Todos os volumes de controle devem ser preenchidos com uma única fase de fluido ou uma combinação de fases. Para cada fase adicional ao modelo é adicionada uma variável para a fração volumétrica desta nova fase em cada célula computacional, sendo assim, as propriedades em qualquer célula podem assumir valores de uma ou outra fase, dependendo dos valores da fração volumétrica correspondente.

Assumindo um domínio com 2 fases, representadas por f_1 e f_2 , e sendo f_{V1} e f_{V2} a fração volumétrica de cada fase respectivamente, as mesmas podem ser caracterizada como:

$$\begin{aligned}
 & \text{Se } f_{V1} = 0, \quad \text{Célula não contém } f_1 \\
 & \text{Se } 0 < f_{V1} < 1, \quad \text{Célula contém uma interface entre as fases presentes} \\
 & \text{Se } f_{V1} = 1, \quad \text{Célula contém apenas } f_1
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

A Figura 27 exemplifica uma célula que contém uma interface presente onde é satisfeita a condição $0 < f_{V1} < 1$.

Figura 27 - Ilustração de duas fases separadas por uma interface em uma célula



Fonte: o próprio autor (2019)

A captura da interface é realizada pela solução da equação da continuidade para a fração volumétrica.

$$\frac{\partial f_V}{\partial t} + u \frac{\partial f_V}{\partial x} + v \frac{\partial f_V}{\partial y} + w \frac{\partial f_V}{\partial z} = 0 \quad (3.23)$$

As propriedades de transporte são determinadas pela presença de cada fase no volume de controle. Por exemplo, em um sistema de duas fases, f_1 e f_2 e a fração volumétrica da fase 2 está sendo analisada, então a densidade da célula pode ser computada por:

$$\rho = f_{V2} \rho_2 + (1 - f_{V2}) \rho_1 \quad (3.24)$$

De forma geral, para um sistema de “n” fases, a densidade obtida a partir da fração volumétrica obtem a forma da equação (3.25)

$$\rho = \sum f_n \rho_n \quad (3.25)$$

As demais propriedades, tais como viscosidade e condutividade térmica, são obtidas da mesma forma, com exceção do calor específico c_p e entalpia h obtidos conforme apresentado nas equações (3.26) e (3.27) respectivamente.

$$c_p = \frac{\sum f_n \rho_n c_{p_n}}{\sum f_n \rho_n} \quad (3.26)$$

$$h_n = \frac{\sum f_n \rho_n h_n}{\sum f_n \rho_n} \quad (3.27)$$

3.2.6.1 Conservação de momento aplicado a técnica VOF

Uma equação de momento é resolvida em todo o domínio unificando todas as fases. O campo de velocidade então é obtido a partir da interação entre as fases. A equação de conservação de momento mostrada depende das frações de volume de todas as fases em função da densidade ρ e viscosidade μ .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \rho g + F_j \quad (3.28)$$

onde F é um termo fonte para representar forças de campo.

De acordo com FLUENT® (2015), uma limitação dessa abordagem com uma equação compartilhada para ambas as fases é que nos casos em que existem grandes diferenças de velocidade ou grandes diferenças de viscosidade entre as fases, a precisão dos resultados para o campo de velocidades e a convergência do caso podem ser afetadas gerando erros elevados.

3.2.6.2 Conservação de energia aplicada a técnica VOF

Da mesma forma que a equação de conservação de momento, a equação de entalpia é descrita para ambas as fases simultaneamente por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_{eff} \frac{\partial T_i}{\partial x_j} \right) + S_h \quad (3.29)$$

Onde p é a pressão estática, k_{eff} é a condutividade térmica efetiva compartilhada pelas fases, conforme abordado anteriormente, e S_h é o termo fonte, que pode ser

utilizado para aplicar ao domínio fontes de calor provenientes de radiação externa e reações químicas.

Um aspecto importante é ressaltado por FLUENT® (2015) aborda que:

Assim como no campo de velocidade, a precisão da temperatura próxima à interface é limitada nos casos em que existem grandes diferenças de temperatura entre as fases. Tais problemas também surgem em casos onde as propriedades variam em várias ordens de grandeza. Por exemplo, se um modelo inclui metal líquido em combinação com o ar, as condutividades dos materiais podem diferir em até quatro ordens de grandeza. Essas grandes discrepâncias nas propriedades levam a conjuntos de equações com coeficientes anisotrópicos, que por sua vez podem levar a limitações de convergência e precisão

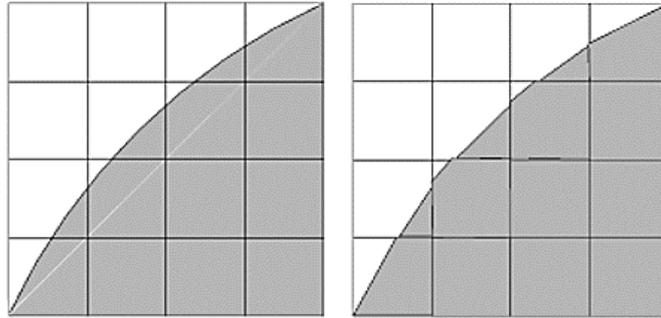
Na realização das simulações para o presente trabalho constatou-se grande dificuldade principalmente para a obtenção de convergência e estabilidade nas simulações, que precisaram ser contornadas com avanços temporais bastante reduzidos. Estes pontos serão melhor explorados no capítulo de apresentação dos resultados.

3.2.6.3 Esquema de reconstrução da interface VOF

Quando a célula contém duas fases utiliza-se o esquema de reconstrução geométrica de modo a representar graficamente esta interface. No ANSYS FLUENT®, o esquema de reconstrução empregado assume que a interface entre dois fluidos tem uma inclinação linear dentro de cada célula.

Conforme FLUENT® (2015), o primeiro passo no esquema de reconstrução é calcular a posição da interface linear em relação ao centro de cada célula parcialmente preenchida a partir das informações a respeito da fração de volume e suas derivadas na célula. A próxima etapa é calcular a quantidade advectiva de fluido através de cada face usando a representação da interface linear computada e informações sobre a distribuição de velocidade normal e tangencial na face. O último passo é calcular a fração de volume em cada célula usando o balanço de fluxos calculado durante a etapa anterior.

Figura 28 - Esquema de reconstrução geométrica representando a interface entre os fluidos real (a esquerda) e reconstruído pelo método empregado no ANSYS FLUENT (à direita)

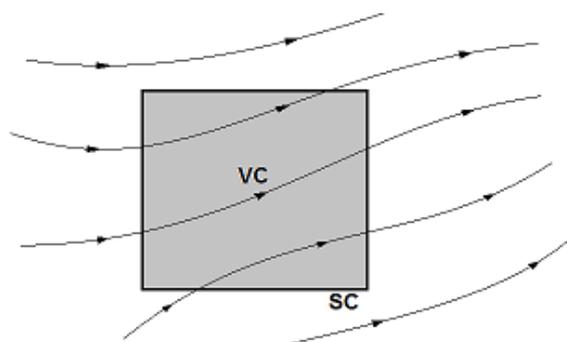


Fonte: FLUENT (2015)

4 MÉTODO DO VOLUMES FINITOS

Este capítulo aborda a discretização das equações de governo utilizando o método dos volumes finitos. Para ilustrar esse processo toma-se, por exemplo, um domínio de interesse, dentro do qual insere-se um volume de controle (VC) cujas superfícies externas recebem o nome de superfície de controle (SC).

Figura 29 - Representação do Volume de Controle e Superfície de Controle

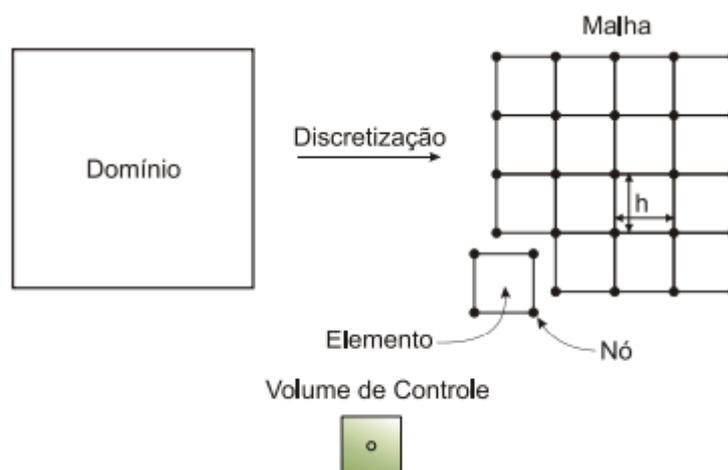


Fonte: o próprio autor (2019)

Aplica-se ao volume de controle e à superfície de controle as leis de conservação de forma que nessas regiões tais leis são válidas.

Neste método as variáveis que descrevem o fenômeno estudado são calculadas no centro de cada volume. Os VCs por sua vez são interligados por nós que formam um agrupamento denominado malha, conforme ilustrado na Figura 30.

Figura 30 – Discretização em volumes de controle



Fonte: Adaptado de Rezende (2008)

No método dos volumes finitos emprega-se comumente a abordagem Euleriana, onde o VC é considerado fixo, isto é, material flui através do volume de controle e da superfície de controle.

Os princípios de conservação da massa, quantidade de movimento e energia são a base da modelagem matemática para a maioria dos problemas envolvendo análises de dinâmica dos fluidos computacional. O objetivo do método de discretização é substituir as equações de governo diferenciais por equações algébricas que deverão fornecer o valor das grandezas avaliadas em pontos discretos. A partir dos valores calculados nos centros dos volumes de controle obtém-se uma solução que é transportada para o restante do domínio.

Uma análise envolvendo o método dos volumes finitos engloba:

- Decompor o domínio em volumes de controle;
- Obter as equações integrais de conservação para cada VC;
- Obter a aproximação numérica das integrais;
- Aproximar os valores das variáveis nas faces;
- Definir as condições de contorno;
- Montar e resolver o sistema algébrico obtido.

O sistema de equações é resolvido e como resultado obtêm-se respostas como pressão, temperatura, velocidade, além de outras grandezas cujas equações tenham sido discretizadas.

Para a realização dos estudos referentes ao presente trabalho optou-se por utilizar o programa comercial ANSYS FLUENT® devido a disponibilidade do mesmo bem como a existência dos modelos utilizado no presente trabalho já implementados no código computacional.

4.1 DISCRETIZAÇÃO E MÉTODOS DE SOLUÇÃO

Após a introdução ao método de volume finitos, são abordados a seguir a definição dos fluxos no volume de controle de forma bem como a discretização das equações de governo, antes de solucionar o problema.

4.1.1 Discretização das equações de governo

De forma geral, as equações de governo podem ser escritas em função de uma variável genérica de modo que uma equação possa representar a forma conservativa de equações abordadas anteriormente. Para tal equação dá-se o nome de equação de transporte escrita em função de uma variável ϕ .

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{V}_\phi) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) + S_\phi \quad (4.1)$$

onde ϕ é a variável de interesse, Γ é o coeficiente de difusão (para a equação de momento este termo representará a viscosidade e para a equação de energia representará a condutividade) e S_ϕ é o termo fonte associado à variável ϕ .

Na equação (4.1) o primeiro termo transiente $\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}$ representa a variação de ϕ no elemento, o termo advectivo $\nabla \cdot (\rho\vec{V}_\phi)$ representa o fluxo de ϕ para fora do elemento, o termo $\nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi)$ representa a variação de ϕ devido a difusão no elemento e o termo dissipativo S_ϕ representa a variação de ϕ devido as fontes internas no elemento.

Conforme abordado anteriormente, o FLUENT® simula uma equação geral de transporte discretizada em uma equação algébrica que pode ser resolvida. Essa discretização é obtida a partir integração da equação de transporte para um volume de controle (VC).

Integrando-se a equação (4.1) no VC tem-se:

$$\int_{VC} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_{VC} \nabla \cdot (\rho\vec{V}_\phi) dV = \int_{VC} \nabla \cdot (\Gamma\nabla\phi) dV + \int_{VC} S_\phi dV \quad (4.2)$$

Conforme comentado por Inácio (2018), a partir do teorema da divergência de Gauss, que mostra que a soma de todas as fontes no VC subtraída da soma de todos os sumidouros corresponde ao valor do fluxo líquido saindo do VC, algumas integrais de volume podem ser representadas por integrais de superfície. Portanto, a equação (4.2) é reescrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{VC} \rho \phi dV \right) + \int_A \vec{n} \cdot (\rho \vec{V}_\phi) dA = \int_A \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla_\phi) dA + \int_{VC} S_\phi dV \quad (4.3)$$

onde \vec{n} é o vetor normal a superfície de controle apontando para fora do elemento, dA indica a magnitude do elemento de área da superfície de controle. Tal equação é aplicada a cada elemento do VC

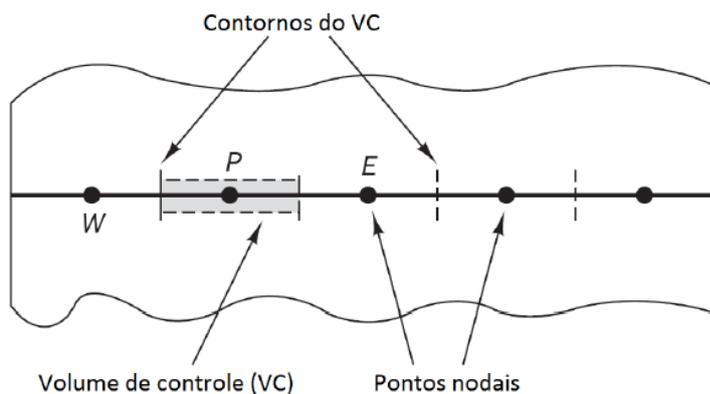
A equação anterior é utilizada para solução de fenômenos em regime permanente, porém o presente trabalho aborda a solidificação, que se trata de um fenômeno transiente. Para a resolução de problemas transientes, faz-se necessário realizar a integração sobre um intervalo de tempo Δt de forma a obter a evolução temporal da grandeza estudada.

A equação mostra a equação (4.3) escrita com termos transientes.

$$\int_{\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{VC} \rho \phi dV \right) dt + \int_{\Delta t} \int_A \vec{n} \cdot (\rho \vec{V}_\phi) dA dt = \int_{\Delta t} \int_A \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla_\phi) dA dt + \int_{\Delta t} \int_{VC} S_\phi dV dt \quad (4.4)$$

Definido o equacionamento, uma etapa importante na resolução do caso de volumes finitos é a geração de um domínio computacional formado por um conjunto finito de pontos discretos onde as variáveis do problema deverão ser calculadas. A Figura 31 mostra um exemplo de malha computacional unidimensional onde W , E e P são pontos quaisquer do sistema e o VC é construído em torno do ponto P .

Figura 31 - Exemplo de domínio computacional unidimensional

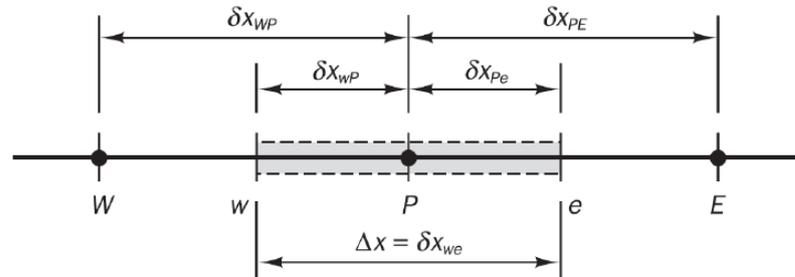


Fonte: ODONE (2014)

A Figura 32 mostra as fronteiras em torno do ponto P , tais que o ponto w é equidistante de W (West) e P , e o ponto e é equidistante de P e E (East). O

comprimento do volume de controle será representado por $\Delta x = \delta x_{we}$, e as distâncias δx_{WP} , δx_{PE} , δx_{wP} , δx_{Pe} são os comprimentos característicos do VC.

Figura 32 - Malha computacional unidimensional referente ao VC



Fonte: ODONE (2014)

Conforme apresentado anteriormente, as integrais de volume são discretizadas dentro de cada volume de controle, localizados no centro de cada elemento, e o resultados é então distribuído para os volumes de controle adjacentes.

Conforme Xavier 2011, considerando-se para o caso unidimensional mostrado na Figura 32, que a variação temporal de $\rho\phi$ no ponto P não depende do volume de controle em particular, a equação (4.3) integrada nas faces opostas do volume de controle mostrado na Figura 32 resume-se a forma descrita na equação (4.5).

$$\frac{\partial(\rho\phi)_P}{\partial t} \Delta V + (\rho u A \phi)_e - (\rho u A \phi)_w = \left(\Gamma A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w + \bar{S} \Delta V \quad (4.5)$$

onde A é a área da face do volume de controle, ΔV é o volume do elemento, \bar{S} é o valor médio do termo fonte no volume de controle. Destaca-se que o termo fonte em função ϕ é representado por um valor médio no VC e é obtido a partir da propriedade em cada ponto da malha, representado por:

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

Para que os fluxos das partes difusivas e convectiva possam ser obtidos pela diferença entre as faces opostas é necessário obter o valor de ϕ nas faces do VC, uma vez que os valores discretos da variável genérica são obtidos e armazenados nos centros do volume de controle. Para esta tarefa utilizam-se funções de

Cabe ressaltar que em regiões onde a solução possui variações rápidas nas propriedades do escoamento um esquema de segunda ordem causa oscilações, entretanto para um esquema de primeira ordem, erros de difusão numérica são introduzidos na solução (MALISKA, 2004).

4.1.2 Discretização para mudança de fase pelo método da entalpia

Tendo em vista que o presente trabalho aborda o processo de mudança de fase, a discretização das equações deve levar em conta também os termos fonte apresentados nas equações de governo (3.18) à (3.21) específicos para modelar adequadamente as mudanças de velocidade e temperatura durante a solidificação.

Integrando-se o termo B da equação (3.16) no volume de controle no intervalo $t + \Delta t$ tem-se um meio pelo qual o valor de B é inserido na equação de momento permitindo assim a correlação entre os campos de velocidade à medida que ocorre a solidificação do material.

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} (B_u) dV dt = \int_t^{t+\Delta t} [(B_{u_e}) \Delta x \Delta y] dt = (B_{u_e}) \Delta x \Delta y \Delta t \quad (4.9)$$

Fazendo-se a mesma integração da equação (4.9) para o termo B_v , mostrado na equação (3.15) tem-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} (B_v) dV dt = \int_t^{t+\Delta t} [(B_{v_n}) \Delta x \Delta y] dt = (B_{v_n}) \Delta x \Delta y \Delta t \quad (4.10)$$

Integrando-se o termo fonte S_b da equação (3.15) no volume de controle tem-se que:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} (S_b) dV dt &= \int_t^{t+\Delta t} [(S_b]_P) \Delta x \Delta y] dt = (S_b]_P) \Delta x \Delta y \Delta t \\ &= \frac{\rho g \beta (h - h_{ref})}{c} \end{aligned} \quad (4.11)$$

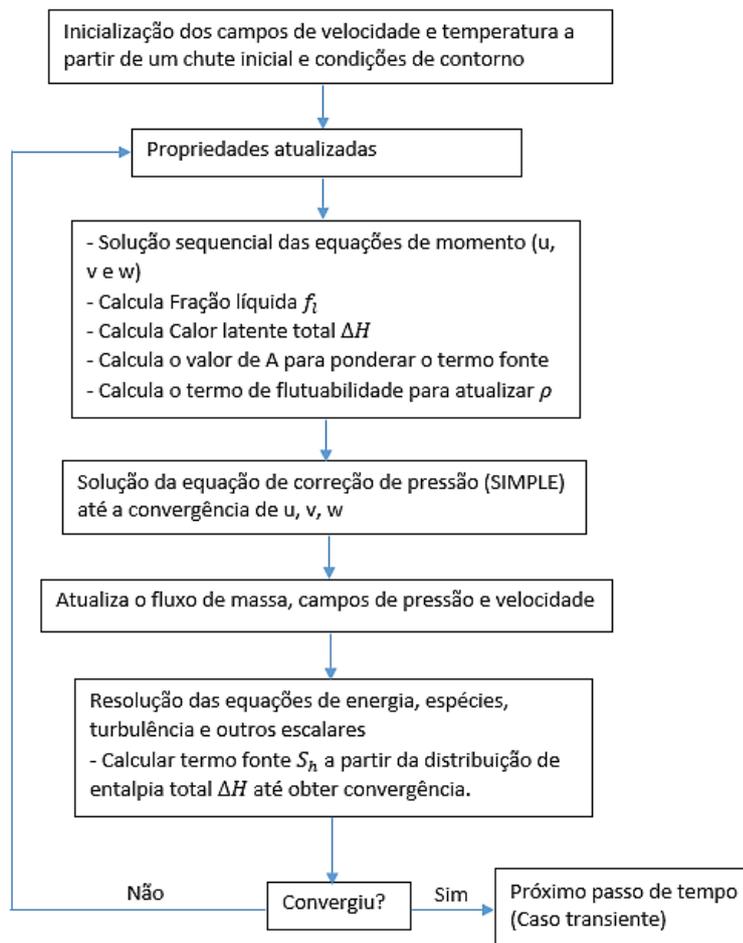
O termo fonte da equação de conservação de energia, que é detalhado na equação (3.7) para um problema de mudança de fase também necessita ser integrado no volume de controle conforme apresentado a seguir.

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} -\frac{\partial}{\partial t} (\rho \Delta H) dV dt = a_p^0 (\Delta H_p^0 - \Delta H_p) \quad (4.12)$$

onde $a_p^0 = \rho \Delta V / \Delta t$.

Ao longo do processo de simulação os valores da entalpia total, ΔH , bem como a entalpia sensível, h , necessitam ser resolvidos no instante $t + \Delta t$. A solução da equação da conservação de energia passa a ser realizada de forma iterativa até que o campo de ΔH e h estejam convergidos. A Figura 34 mostra o esquema de solução para o caso de solidificação.

Figura 34 - Esquema de solução para o caso de solidificação

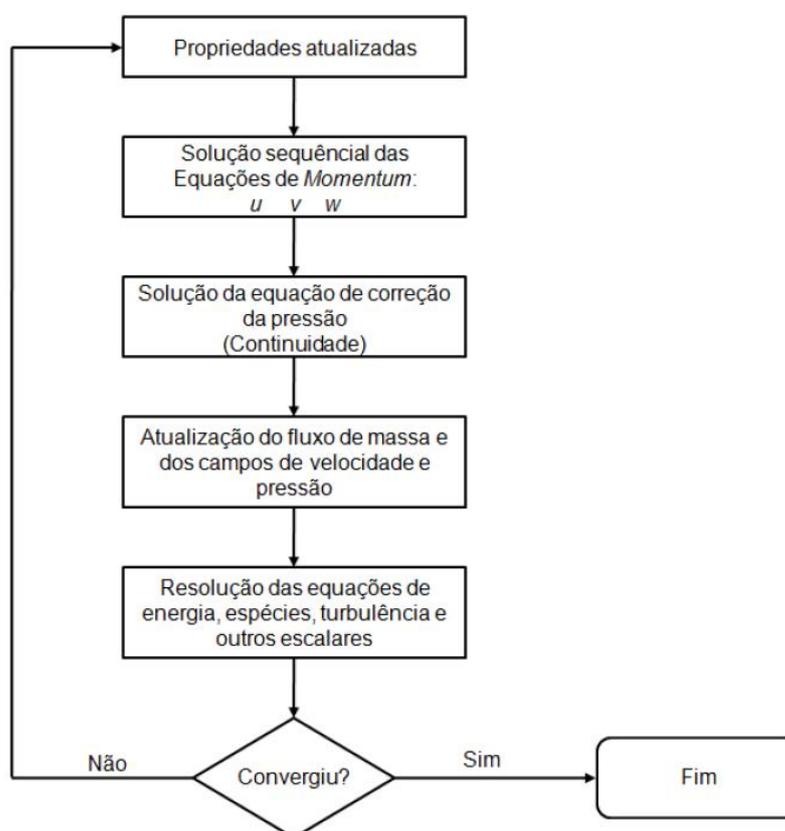


4.1.3 Acoplamento pressão velocidade

Conforme abordado anteriormente, optou-se por empregar o programa comercial ANSYS FLUENT® no desenvolvimento do presente trabalho.

Conforme documentação do programa FLUENT (2015) e também conforme abordado por Basso (2017), o algoritmo de solução do escoamento para obtenção das velocidades e temperaturas emprega uma metodologia segregada, onde as equações de governo discretizadas são resolvidas individualmente e de forma sequencial.

Figura 35 - Solução segregada no Fluent



Fonte: BASSO (2017), apud, FLUENT® (2015)

Basso (2017) ainda aponta como vantagem para este algoritmo a menor dificuldade para solução do sistema de equações, exigindo assim menor recurso computacional. Este algoritmo exige, porém, um equacionamento adicional para solucionar os campos de pressão e conseqüentemente, os campos de velocidade de forma a garantir as leis de conservação aplicadas.

No caso de escoamentos compressíveis, a equação da continuidade pode ser obtida por meio de uma equação de transporte em função da densidade e a pressão é obtida a partir da densidade e da temperatura por meio de uma equação de estado $\rho = \rho(p, T)$. No caso do escoamento incompressível a densidade ρ é constante e não é acoplada com a pressão. Neste caso um algoritmo adicional deve ser utilizado para atualizar os campos de pressão e velocidade no escoamento.

No presente trabalho utilizou-se o algoritmo SIMPLE (PATANKAR e SPALDING, 1972), através do qual os fluxos convectivos nas faces do VC são avaliados por campos arbitrários para a velocidade. A partir desses valores, um campo de pressão estimado é gerado para o cálculo das equações de momento e avaliação do novo campo de velocidades e pressão. O processo é iterativo e inicia com o “chute” inicial e evolui até a obtenção da convergência.

O algoritmo SIMPLE pode utilizado tanto para regimes permanentes quanto transientes. Caso a densidade seja mantida constante, a correção da pressão será igual para ambos regimes. Em problemas transientes, o algoritmo é executado a cada passo de tempo até a obtenção da convergência.

4.1.4 Método de Solução para o sistema algébrico

Conforme comentado por Inácio (2018), as equações de governo são transformadas em equações lineares após processo de discretização. O sistema de equações, resolvido pelo método iterativo de Gauss-Seidel, assume a forma:

$$a_p \phi_p = \sum_{nb} (a_{nb} \phi_{nb}) + b \quad (4.13)$$

onde o subscrito nb indica os nós vizinhos ao VC, b é o termo fonte, a_p é o coeficiente principal e a_{nb} são os coeficientes linearizados das células vizinhas ao VC para solução de ϕ_p .

Para a análise de convergência para as equações de governo utilizou-se da verificação dos resíduos, que podem ser obtidos através da equação (4.14).

$$R^\phi = \frac{\sum_{células} [\sum_{nb} (a_{nb} \phi_{nb}) + b - a_p \phi_p]}{\sum_{células} [a_p \phi_p]} \quad (4.14)$$

onde o operador $\sum_{celulas}$ significa que o valor entre colchetes está sendo somado para todos os volumes de controle.

Durante as simulações utilizou-se como critério para solução convergida um resíduo $R^{\phi} < 10^{-5}$

5 VALIDAÇÃO NUMÉRICA

Este capítulo traz a análise numérica de um caso bidimensional reportado em literatura envolvendo transferência de calor, convecção no metal líquido e a mudança de fase do material. Este procedimento de verificação é de grande importância pois permite validar os procedimentos de solução escolhidos para a execução do presente trabalho.

5.1 ESTUDO COMPARATIVO COM LITERATURA UTILIZANDO ANSYS FLUENT

Sabe-se que a simulação numérica permite realizar uma infinidade de estudos de fenômenos físicos, porém, encontrar os modelos e, principalmente, os parâmetros de simulação adequados tais como, condições de contorno, propriedades dos materiais, modelos numéricos, método de solução, entre outros, torna a tarefa bastante complexa e desafiadora.

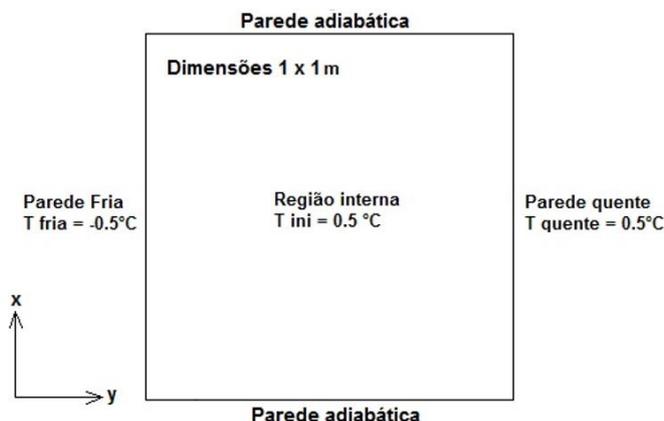
Do ponto de vista de simulação do processo de solidificação, vê-se como principal fonte de comparação o trabalho desenvolvido por Voller e Prakash (1987) que propuseram o modelo de entalpia implementado no programa comercial ANSYS FLUENT®, utilizado como ferramenta neste presente trabalho. Destaca-se que tal verificação foi abordada por outro autor (ODONE 2014), que desenvolveu um estudo numérico envolvendo mudança de fase em uma cavidade quadrada utilizando o programa comercial ANSYS FLUENT® e fez uma comparação com os resultados obtidos por Voller e Prakash (1987).

Ressalta-se que Voller e Prakash (1987) utilizaram um código de dinâmica de fluidos computacionais chamado PHOENICS®. A investigação e uso deste não é objeto do presente trabalho, porém Rameshwaran et. al. (2013) trazem uma comparação de alguns códigos computacionais, entre os quais os códigos PHOENICS® e FLUENT®, mostrando resultados bastante similares para ambos, permitindo a comparação dos resultados apresentados.

O problema é descrito por uma cavidade quadrada totalmente preenchida por um material em estado líquido cuja temperatura no instante inicial, $t = 0$, é $T_i = 0.5$. A Figura 36 mostra as condições de contorno aplicadas ao problema. As regiões superior e inferior, representadas em $x = 1$ e $x = 0$, respectivamente, apresentam condição de fluxo de calor igual a zero apresentando-se, portanto como paredes

adiabáticas. Para a geração do gradiente de temperatura para o problema, as regiões laterais representadas em $y = 0$ e $y = 1$, possuem condição de temperatura imposta.

Figura 36 - Cavity térmica



Fonte: Adaptado de Voller e Prakash (1987)

Como o intuito de se realizar uma comparação adequada entre os trabalhos apresentados por Voller e Prakash (1987) e Odone (2014) mantiveram-se os mesmos parâmetros de simulação adotados nestes estudos (ver Tabela 1).

Tabela 1 - Parâmetros utilizados para simulação em cavidade quadrada propostos por VOLLER E PRAKASH (1987)

Parâmetros	Valore aplicados	Unidade
Temperatura inicial	$T_i = 0.5$ (273,65)	°C (K)
Temperatura em $x = 0$	$T_{fria} = -0.5$ (272.65)	°C (K)
Temperatura em $x = 1$	$T_{quente} = 0.5$ (273.65)	°C (K)
Temperatura de referência	$T_{ref} = 0.5$ (273.65)	°C (K)
Dimensões da cavidade	$l = 1$	m
Densidade	$\rho = 1$	Kg/m ³
Calor específico	$cp = 1$	J/kg°C
Viscosidade	$\mu = 1$	Kg/ms
Condutividade térmica	$k = 0.001$	W/m°C
Coeficiente de expansão térmica	$\beta = 0.001$	K ⁻¹
Calor latente	$L = 5$	J/kg
Temperatura Líquido	$T_l = 0.1$ (273.25)	°C (K)
Temperatura Sólido	$T_s = -0.1$ (273.05)	°C (K)
Aceleração da gravidade	$g = 1000$	m/s ²
Número de Rayleigh	$Ra = 10^4$	
Número de Prandtl	$Pr = 10^3$	
Número de Stefan	$Ste = 5$	

Fonte: Adaptado de Voller e Prakash (1987)

Como descrito nos capítulos anteriores a respeito do modelamento matemático do problema, destaca-se que, com o intuito de introduzir o efeito da convecção natural na cavidade, assumiu-se a aproximação de Boussinesq, descrita anteriormente no item 3.2.5.

Para a implementação do caso de comparação utilizou-se uma malha uniforme 40x40 elementos com passo de tempo fixo com $\Delta t = 10 \text{ s}$.

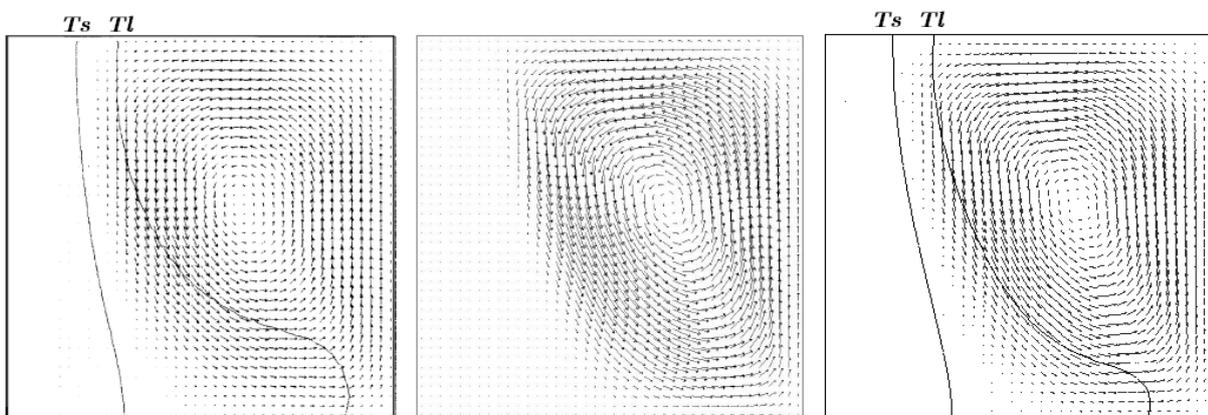
Para a solução das equações de governo utilizou-se uma abordagem totalmente implícita com discretização upwind de segunda ordem para as equações de energia e quantidade de movimento.

Como parâmetros de simulação adotou-se o algoritmo SIMPLE para acoplamento pressão e velocidade. Para a correção do campo de pressão utilizou-se o algoritmo PRESTO.

A constante para a zona pastosa (*mushy zone*) utilizou-se um valor $C = 1.6 \times 10^3$, correspondente ao valor adotado pela literatura de referência.

A Figura 37 mostra uma comparação entre as linhas de transição sólido e líquido e entre as representações vetoriais da movimentação do fluido devido à convecção natural apresentadas pelos autores de referência onde pode-se observar a boa correlação das respostas apresentadas. Ressalta-se que os resultados para as linhas sólido (T_s) e líquido (T_l) não são apresentadas por Odone (2014), em vista disso, as mesmas não são mostradas na Figura 37.

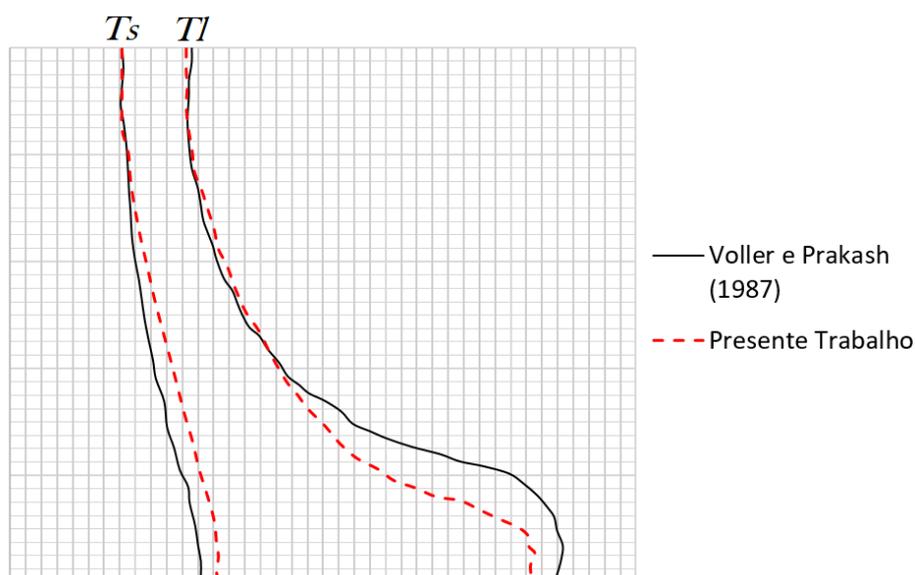
Figura 37 – Representação das vetorial da movimentação do fluido sob influência da mudança de fase do material obtida para diferentes trabalhos ($t = 1000 \text{ s}$)



Fonte: Voller e Prakash (1987) à esquerda, Odone (2014) ao centro e o próprio autor (2018) à direita.

Para uma comparação mais apurada dos resultados, a Figura 38 mostra uma sobreposição das linhas sólido e líquido obtidas com a reprodução do caso desenvolvido por Voller e Prakash (1987) e o presente trabalho.

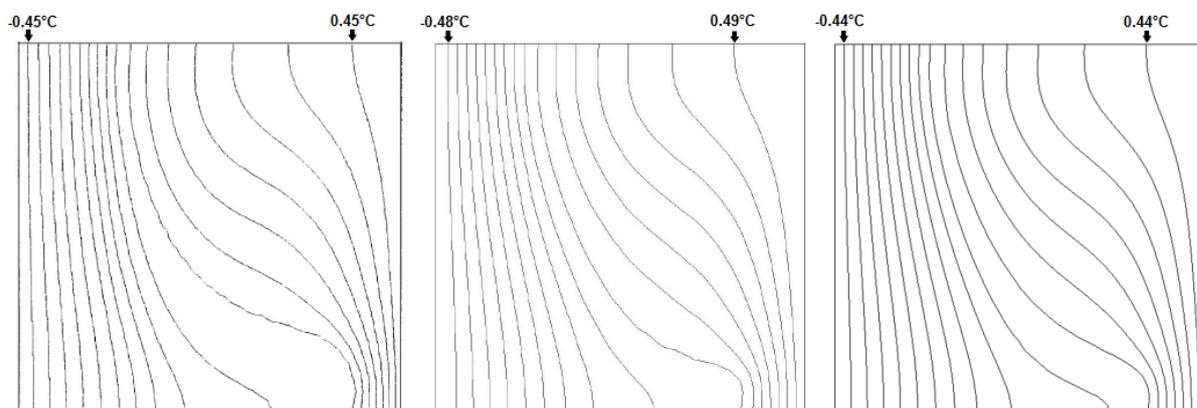
Figura 38 - Comparação dos resultados das linhas Sólido e Líquido entre o presente trabalho e Voller e Prakash (1987)



Fonte: Elaborado pelo autor (2018)

Na Figura 39 são comparadas as isotermas para o instante $t = 1000 s$, onde se observam resultados bastante similares quando comparadas as literaturas avaliadas e o presente trabalho.

Figura 39 – Representação das isotermas em $t = 1000s$ – Comparação dos resultados para diferentes trabalhos



Fonte: Voller e Prakash (1987) à esquerda, Odone (2014) ao centro e o próprio autor (2018) à direita.

Uma outra análise apresentada por VOLLER E PRAKASH (1987) traz os resultados da fração sólida para $t = 250 s$ com diferentes tamanhos de malha. Estes resultados, comparados com o presente trabalho são apresentados na Tabela 2.

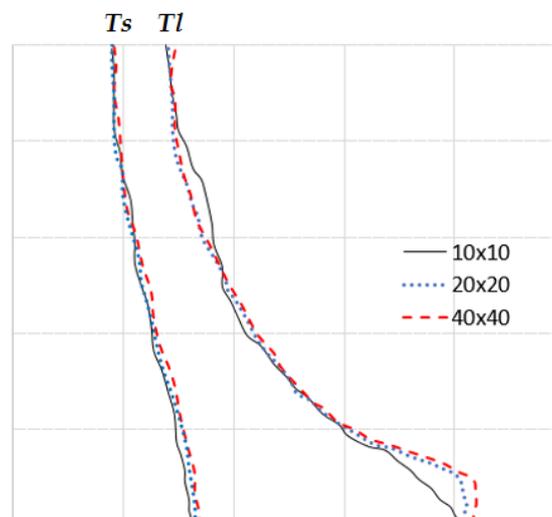
Tabela 2 - Dependência de malha para fração sólida após tempo de 250 s

Tamanho de malha	Fração Sólida para $t = 250 s$	
	Voller e Prakash (1987)	Presente trabalho
10 x 10	0.85	0.82
20 x 20	0.82	0.81
40 x 40	0.81	0.81

Fonte: Elaborado pelo autor (2018)

A Figura 40 mostra uma comparação entre os contornos da zona *mushy* para os diferentes tamanhos de malhas avaliados para $t = 1000 s$. Observa-se uma similaridade elevada dos resultados, destacando-se apenas um contorno da linha líquido mais irregular para a malha 10 x 10, provavelmente devido menor quantidade de elementos junto à frente líquida que, por sua vez, apresenta movimento devido a convecção presente nesta região. A região do contorno sólido, porém, apresenta posição e contornos muito similares, justificado pela velocidade baixa junto a região já solidificada.

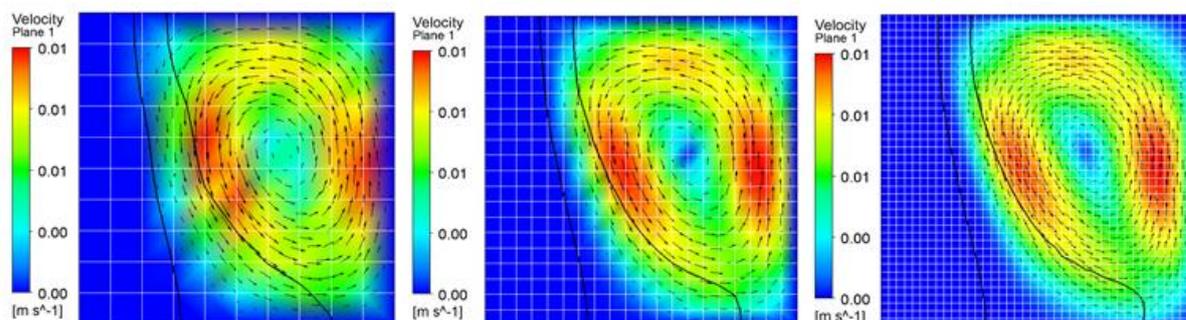
Figura 40 - Comparação das linhas Sólido e Líquido para diferentes tamanhos de malha: 10x10, 20x20 e 40x40 elementos.



Fonte: Elaborado pelo autor (2018)

Por fim, a Figura 41 mostra uma comparação dos campos de velocidades para o instante $t = 1000 \text{ s}$ para diferentes malhas utilizadas. As escalas mostradas nas imagens apresentam os limites mínimos e máximos aplicados automaticamente no pós-processamento do programa FLUENT. É possível observar uma boa concordância entre os valores de velocidades e a posição dos mesmos. O principal aspecto a ser destacado está na região de transição sólido-líquido, onde o campo de velocidades apresenta irregularidades significativas para a malha 10×10 . As demais malhas fornecem resultados satisfatórios apresentando, inclusive, mesmos resultados para frações sólida, conforme mostrado na Tabela 2.

Figura 41 - Comparação dos campos de velocidades para diferentes malhas no instante $t=1000 \text{ s}$ (10×10 à esquerda, 20×20 ao centro e 40×40 à direita)



Fonte: O próprio autor (2018)

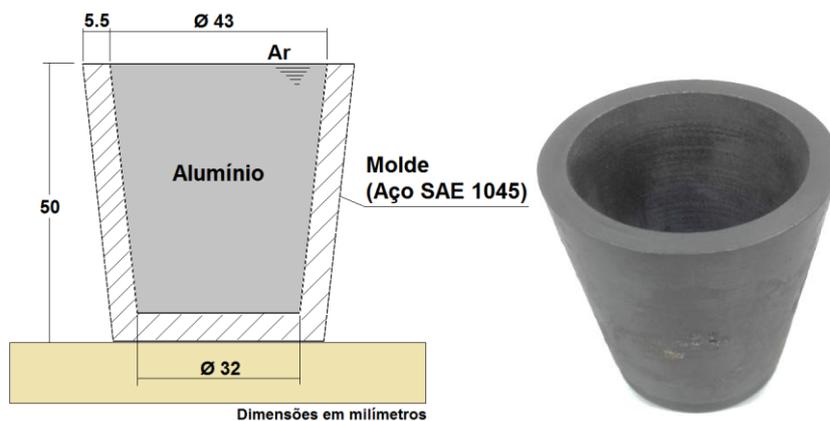
6 ANÁLISE EXPERIMENTAL

Neste capítulo são abordados os critérios utilizados nas análises experimentais e a metodologia de obtenção dos parâmetros utilizados nas análises numéricas.

6.1 MATERIAIS E MÉTODOS EMPREGADOS NA ANÁLISE EXPERIMENTAL

Para a execução das experimentais optou-se por desenvolver o caso de estudo no qual foi fabricado um molde de aço SAE 1045, cuja geometria segue apresentada na Figura 42.

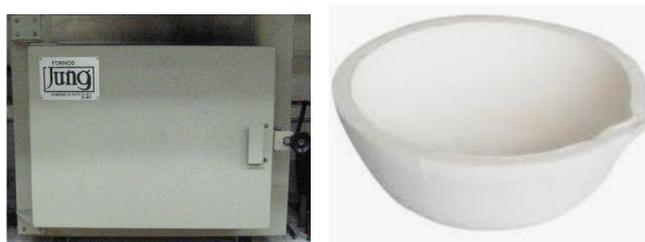
Figura 42 - Molde em aço SAE 1045 construído para a experimentação



Fonte: o próprio autor (2019)

Para a fundição do alumínio comercialmente puro, empregado nos experimentos, utilizou-se um forno tipo mufla, com capacidade para aquecimento de até 1200°C. Para o vazamento do metal no molde metálico utilizou-se um cadinho cerâmico o qual utilizou-se também como recipiente para o processo de fusão do alumínio.

Figura 43 - Forno tipo mufla (à esquerda) e cadinho cerâmico (à direita)



Fonte: o próprio autor (2019)

Para a aquisição de dados utilizou-se o módulo ADS1800 do fabricante LYNX® (ver Figura 44) que consiste em um conversor analógico/digital com 8 canais. Para a aquisição e tratamento dos dados utilizou-se o programa AqDados v.7.2 do mesmo fabricante. Como erro de medição considerou-se $\pm 0.05\%$ do valor lido.

Figura 44 - Sistema de aquisição de dados ADS1800



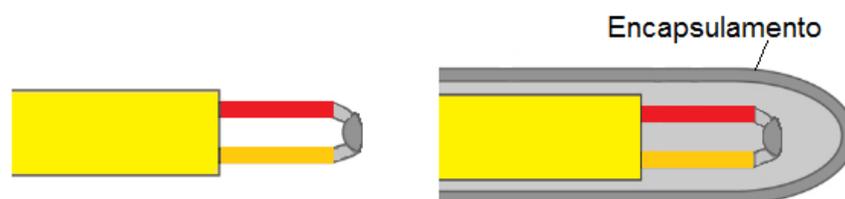
Fonte: Apresentação do produto ADS 1800. Disponível em <http://www.lynxtec.com.br/prod_ads1800.htm>. Acesso em 12 jan. 2019.

Para o monitoramento da temperatura ao longo do experimento utilizaram-se termopares tipo K (Chromel-Alumel) tendo em vista que o mesmo apresenta faixa de medição de $-270\text{ }^{\circ}\text{C}$ a $1260\text{ }^{\circ}\text{C}$, adequada para o experimento proposto. Para este termopar considerou-se um erro de $\pm 0.75\%$.

6.1.1 Análise da resposta dinâmica dos sensores de temperatura

Em relação a construção dos termopares, dispõe-se de diferentes configurações dentre as quais destacam-se os do tipo encapsulados e os com junta nua.

Figura 45 - Termopar com junta nua (à esquerda) e termopar encapsulado (à direita)



Fonte: o próprio autor (2019)

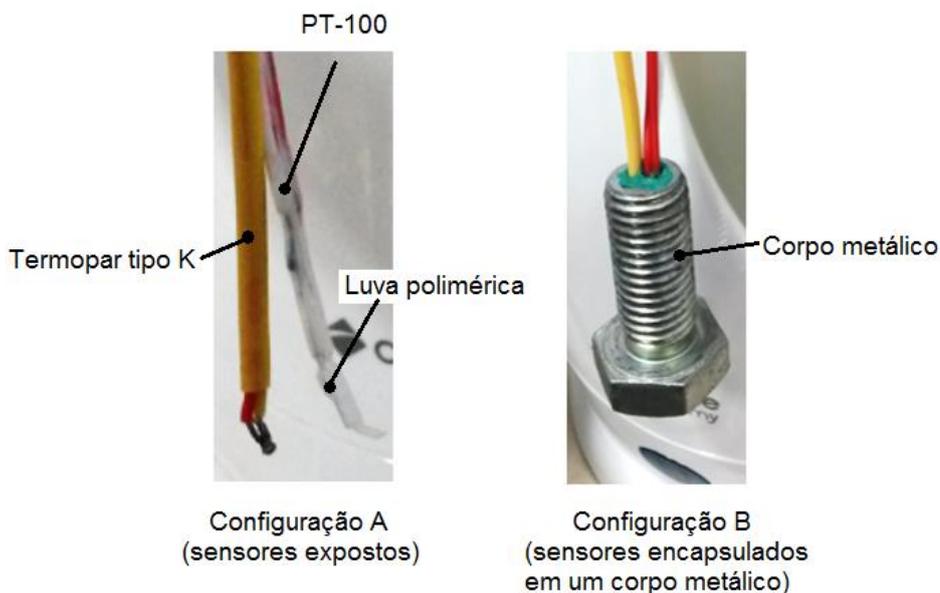
Visando esclarecer a compreensão sobre a resposta dinâmica dos termopares realizou-se um experimento para a avaliar a influência da inclusão de um corpo metálico em torno da junta do termopar. Adicionalmente optou-se por empregar ao

experimento um sensor tipo PT-100, que baseia-se no princípio da variação da resistência ôhmica em função da temperatura, cujo elemento sensor consistia de um resistor formado por um fio de níquel encapsulado em bulbo de cerâmico e recoberto com uma luva polimérica.

O experimento consistiu em submergir os sensores em um banho de água em ebulição, onde não se tinha a obtenção da temperatura da água como objetivo principal mas sim a obtenção do tempo de resposta dos sensores.

A Figura 46 mostra as configurações empregadas nos experimentos.

Figura 46 - Configurações testadas. Configuração A, com sensores expostos (à esquerda) e configuração B, com sensores inseridos de um corpo metálico (à direita)



Fonte: o próprio autor (2019)

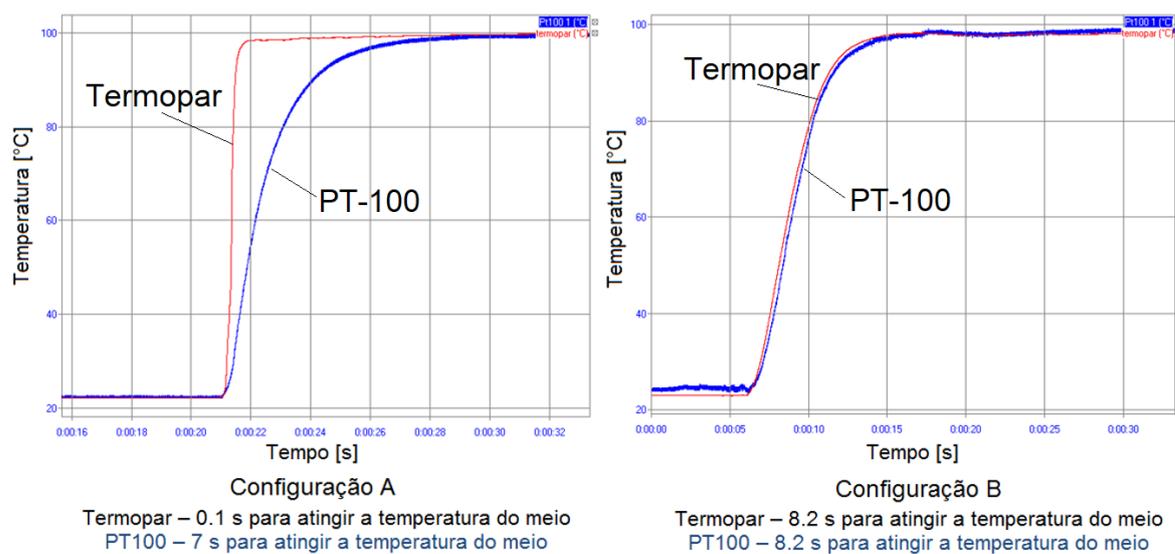
Optou-se por empregar uma taxa de aquisição de dados durante os ensaios de 25 Hz, ou seja, empregou-se uma variação de tempo entre duas medições consecutivas de 0.04 s.

Os resultados são mostrados na Figura 47. Analisando a configuração “A”, pode-se observar uma resposta dinâmica diferente entre os sensores. Enquanto o termopar tipo K eleva-se à temperatura de ebulição em aproximadamente 0.1 s, o PT-100 atinge a mesma temperatura após 7.0 s. Evidentemente que o PT-100 teve seu tempo de resposta bastante afetado pela luva de proteção, porém não foi possível a obtenção de dados sem tal luva já que não se tinha disponível um sensor fornecido sem a mesma. Avaliando-se, no entanto, a configuração “B”, vê-se que a inércia

térmica do conjunto promove uma equalização de medidas e o tempo de resposta de ambos sensores se torna igual, atingindo a temperatura de ebulição após 8.2 s.

Em função desse comportamento fica evidente a necessidade de utilização de um termopar com junta nua para garantir alta velocidade de aquisição.

Figura 47 - Resultados do experimento de tempo de resposta dos sensores.



Fonte: o próprio autor (2019)

Adicionalmente, devido a elevado ponto de fusão (660 °C) do material empregado (alumínio comercialmente puro), empregou-se um revestimento cerâmico em tornos dos termopares devido a sua baixa condutividade térmica e elevada resistência a altas temperaturas, evitando assim a degradação do revestimento e a inclusão de erros às leituras (ver Figura 48).

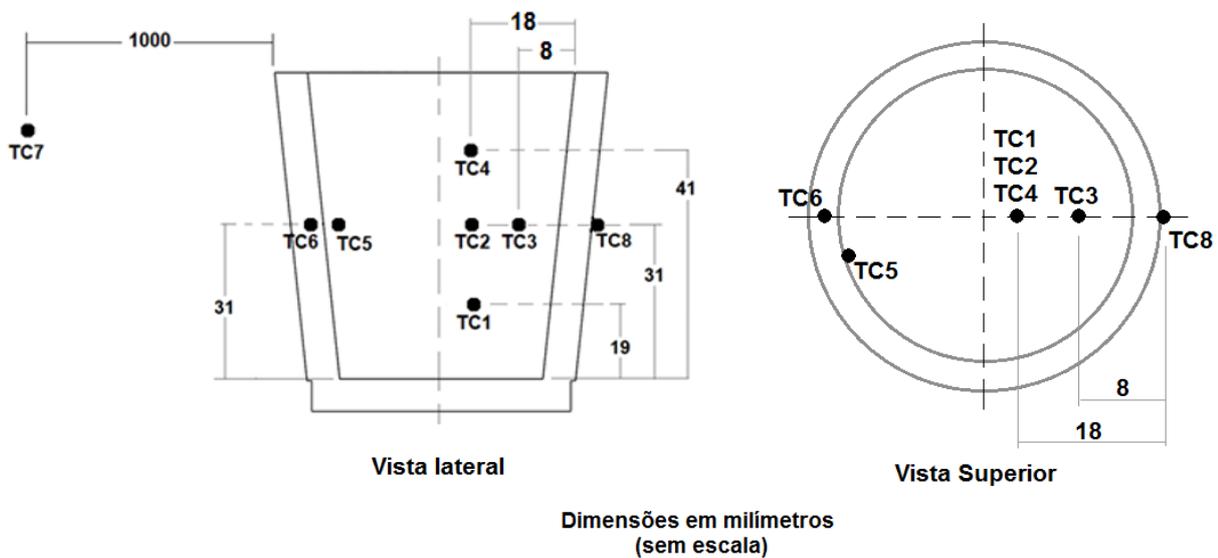
Figura 48 - Termopar empregado nos experimentos mostrando o detalhe do revestimento e junta exposta.



Fonte: o próprio autor (2019)

O posicionamento dos termopares se deu de forma a capturar a temperatura interna do metal em solidificação bem como capturar as temperaturas na região da parede do molde de forma a obter os parâmetros experimentais de resistência de contato entre molde e peça e o coeficiente convectivo na parede externa do molde. A Figura 49 ilustra o posicionamento dos termopares e a Figura 50 mostra uma visão geral do experimento.

Figura 49 - Posicionamento dos termopares



Fonte: O próprio autor (2019)

Figura 50 - Visão geral do experimento



Fonte: O próprio autor (2019)

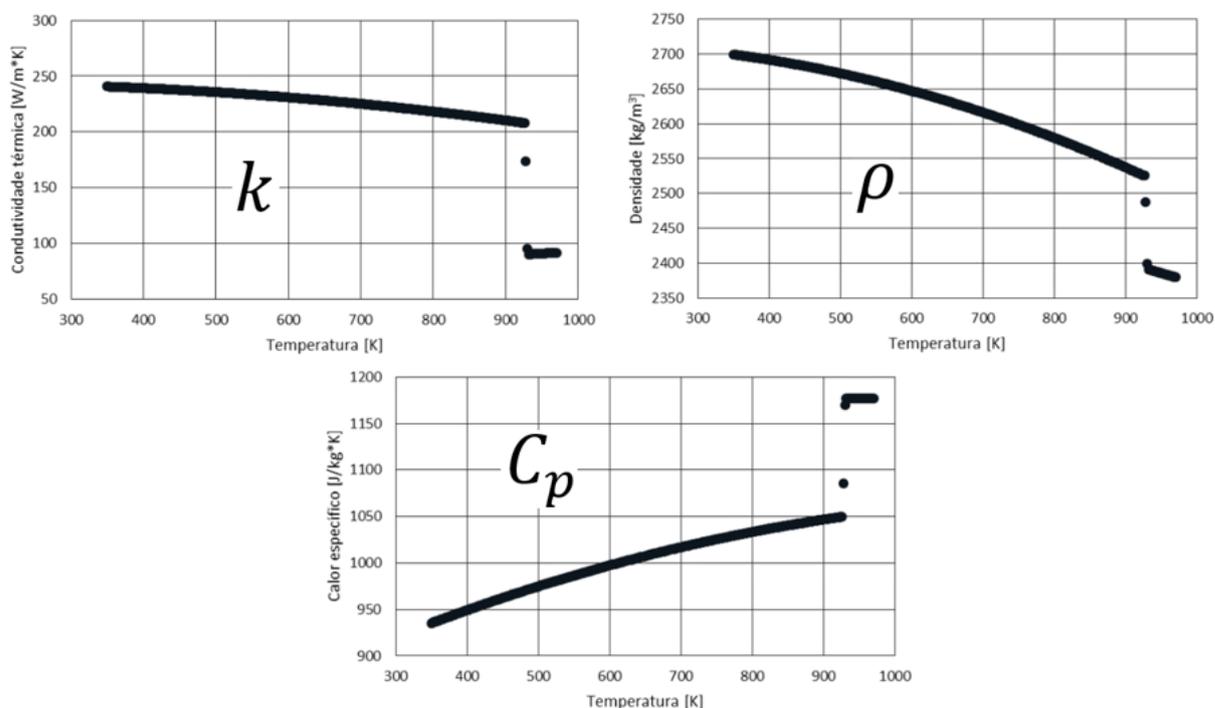
O posicionamento dos termopares na cavidade do molde se deu utilizando-se furos passantes no corpo do mesmo de modo a manter a junta do termopar posicionada nos pontos indicados na Figura 49.

Por conveniência, os resultados experimentais são mostrados nos próximos itens juntamente com os resultados das simulações.

6.2 PROPRIEDADES TÉRMICAS DO ALUMÍNIO PURO

Para a simulação é necessário especificar as propriedades térmicas do alumínio. Devido ao fato de que a variação de temperatura é elevada por tratar-se de um experimento com fusão do material e o alumínio apresentar propriedades distintas em cada fase, fez-se necessário o uso das propriedades térmicas do alumínio puro para uma faixa de temperatura de 300 K até 1400 K. Na Figura 51 são mostradas as curvas utilizadas neste trabalho para a condutividade térmica (k), calor específico (c_p), densidade (ρ).

Figura 51 - Propriedades térmicas para o alumínio puro - condutividade térmica (k), calor específico (C_p), densidade (ρ).



Fonte: Leitner et.al (2017)

Como pode ser visto, além da variação dentro de um estado sólido, existe uma grande variação das propriedades na mudança de fase. Trovant e Argyropoulos (1995) também comentam a respeito da necessidade de utilizar propriedades variáveis de forma a não comprometer a qualidade dos resultados obtidos.

Para a realização das análises numéricas modelou-se o valor para cada uma das propriedades utilizando três expressões, a primeira para o estado sólido, a segunda para a região de transição e a terceira para o estado líquido. Estas expressões são polinômios de até 2º grau com a seguinte forma:

$$f(x) = c_1 * x^2 + c_2 * x + c_3 \quad (6.1)$$

onde, c_1 , c_2 , c_3 são constantes determinadas utilizando o método de mínimos quadrados. Estas constantes são apresentadas na Tabela 3.

Tabela 3 - Constantes para função polinomial para obtenção das propriedades do alumínio em função da temperatura

Propriedade	c_1	c_2	c_3
k (sólido)	$-5.41 \cdot 10^{-5}$	$1.25 \cdot 10^{-2}$	2429.8
k (transição)	0	-39.25	3659.9
k (líquido)	$-1.00 \cdot 10^{-5}$	$5.46 \cdot 10^{-2}$	48.14
c_p (sólido)	$-1.53 \cdot 10^{-4}$	$3.95 \cdot 10^{-1}$	815.76
c_p (transição)	0	42.34	-38208.0
c_p (líquido)	0	0	1176.8
ρ (sólido)	$-2.86 \cdot 10^{-4}$	$6.28 \cdot 10^{-2}$	2712.6
ρ (transição)	0	$6.28 \cdot 10^{-2}$	43655.0
ρ (líquido)	0	-44.36	2670.0
L	0	0	396000

Fonte: Elaborado pelo próprio autor (2019) com base em Leitner et.al (2017)

6.3 PARÂMETROS DE SIMULAÇÃO OBTIDOS EXPERIMENTALMENTE

Conforme já mencionado, para realizar a definição das condições de contorno, que serão apresentadas nos itens seguintes, optou-se por quatro parâmetros necessários a serem determinados de forma empírica, são eles:

- Resistência de contato entre o alumínio e o molde;
- Coeficiente convectivo na superfície do molde;

- Temperatura inicial do molde;
- Temperatura inicial do alumínio.

Para a determinação do coeficiente convectivo na superfície do molde, considerou-se que todo o calor extraído do alumínio era transferido para o molde de aço e, a partir do molde para o ambiente externo.

Para cada intervalo de tempo da leitura, é possível relacionar a variação da temperatura do alumínio com o valor do coeficiente convectivo superficial do molde. Para isso, primeiramente é preciso determinar a quantidade de calor retirada do alumínio entre duas medições consecutivas, este valor é possível de ser obtido utilizando a equação (6.2).

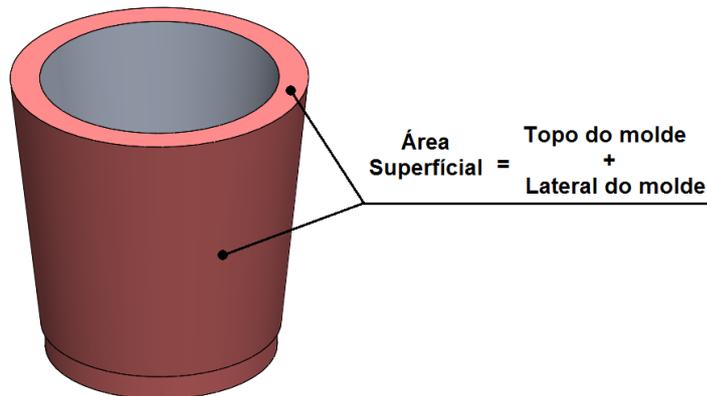
$$Q = m c_p \Delta T_t \quad (6.2)$$

onde, Q é a quantidade de calor retirado do alumínio, m é a massa de alumínio, c_p é o calor específico do alumínio, e ΔT_t é a variação de temperatura do corpo no intervalo de tempo entre leituras.

A etapa seguinte é determinar a taxa de transferência média de calor do molde para o ar externo para este intervalo de tempo. Este valor pode ser obtido através da equação

$$\dot{Q} = h A_{sup} \Delta T_{sup} \quad (6.3)$$

onde, \dot{Q} é a taxa de transferência de calor, h é o coeficiente convectivo, A_{sup} é a área superficial de troca de calor, mostrada na Figura 52, e ΔT_{sup} é a diferença entre a temperatura superficial obtida com o termopar TC8 (Figura 49) e a temperatura do ar ambiente obtida com o termopar TC7 (Figura 49).

Figura 52 - Representação da área superficial externa do molde (A_{sup})

Fonte: o próprio autor (2019)

Sabendo-se que a taxa de transferência de calor corresponde à quantidade de calor trocada por unidade de tempo e, tendo como objetivo encontrar um valor médio do coeficiente convectivo, é possível relacionar as equações (6.2) e (6.3) e obter a seguinte equação:

$$Q = \dot{Q} \Delta t \quad (6.4)$$

Substituindo as equações da quantidade de calor retirada do alumínio (6.2) e da taxa da troca de calor por convecção (6.3) na equação (6.4) e isolando o coeficiente convectivo, é possível então determinar uma expressão para o mesmo. Esta relação é apresentada na equação (6.5).

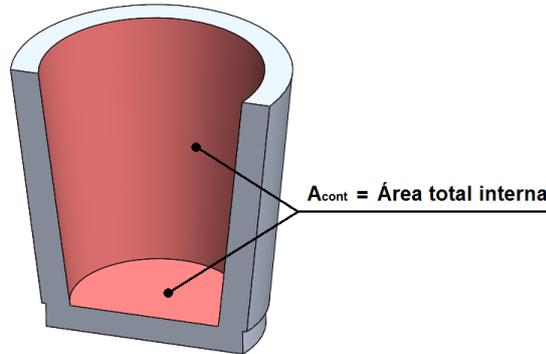
$$\bar{h} = \frac{m c_p \Delta T_t}{A_{sup} \Delta T_{sup} \Delta t} \quad (6.5)$$

Para determinar o valor da resistência de contato empregou-se uma estratégia semelhante, porém, neste caso, ao invés de utilizar a equação da taxa de transferência de calor por convecção, utilizou-se a equação da taxa de transferência de calor por condução em uma região de contato, que é apresentada a seguir.

$$\dot{Q} = \frac{A_{cont} \Delta T_{cont}}{R_{cont}} \quad (6.6)$$

onde, A_{cont} é a área de contato entre molde e alumínio, mostrada na Figura 53, ΔT_{cont} é a diferença de temperatura entre os dois corpos em contato obtida por meio dos termopares TC5 e TC6 mostrados na Figura 49), e R_{cont} é a resistência de contato.

Figura 53 - Representação da área superficial interna (A_{cont})



Fonte: o próprio autor (2019)

Assim, é possível, de forma análoga ao proposto, igualar as expressões da taxa de transferência de calor e da quantidade de calor retirada do alumínio, isolando agora a resistência de contato, assim uma equação para a resistência de contato é escrita da seguinte forma:

$$R_{cont} = \frac{A_{cont} * \Delta T_{cont} * \Delta t}{m * c_p * \Delta T_t} \quad (6.7)$$

Para determinar o valor da temperatura inicial do molde, obteve-se a média ponderada no tempo da temperatura do molde entre o momento que foi iniciada a aquisição de dados e o momento em que foi iniciado o vazamento do alumínio.

A temperatura inicial do alumínio considerada na simulação baseou-se na maior temperatura medida pelos termopares durante o preenchimento da cavidade.

A seguir são apresentados os resultados experimentais obtidos.

7 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo são apresentados os resultados experimentais e numéricos em forma conjunta possibilitando a comparação numérico-experimental proposta.

7.1 EXPERIMENTO

A Tabela 4 resume os dados referentes à preparação do experimento realizado.

Tabela 4 - Setup do experimento

Material	Alumínio Puro (99,98%)
Temperatura do forno	780 °C
Temperatura do molde	53 °C
Método de vazamento	Manual por gravidade
Tempo de vazamento	1 s
Convecção em torno do molde	Natural
Isolamento da parede do molde (laterais)	Não
Isolamento da parede inferior do molde (Fundo)	Refratário
Termopares	Tipo K
Taxa de aquisição das leituras dos termopares	25 Hz

Fonte: O próprio autor (2019)

A Figura 54 mostra o processo de vazamento em andamento.

Figura 54 - Foto do vazamento do metal líquido no molde



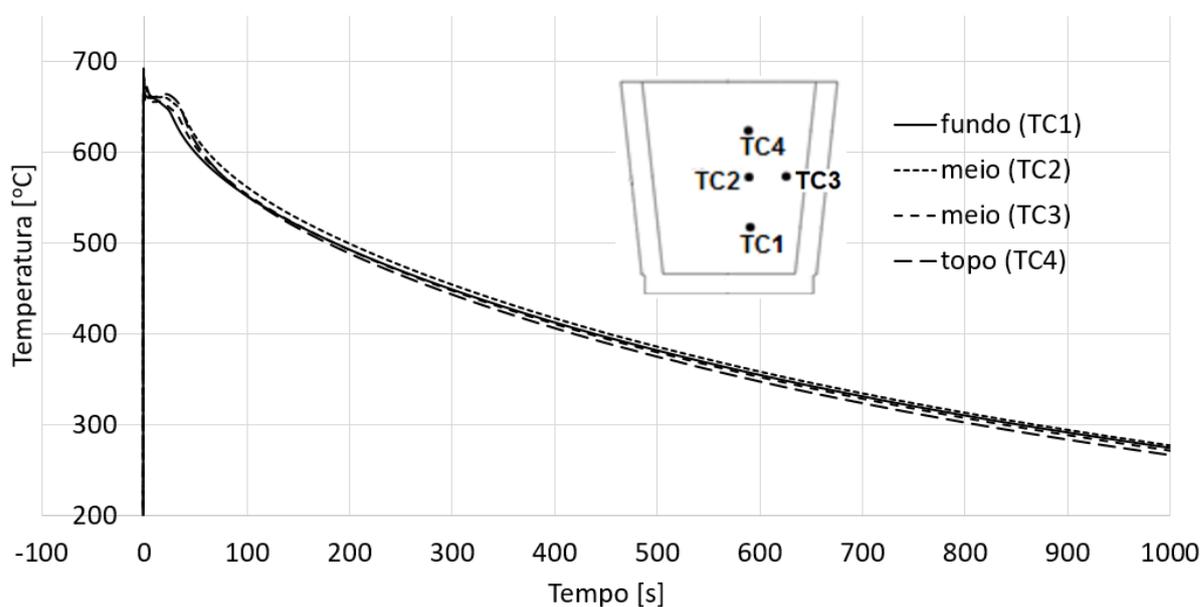
Fonte: o próprio autor (2019)

O gráfico da Figura 55 mostra as leituras obtidas nos termopares TC1, TC2, TC4 e TC3 no momento do vazamento de metal no interior da cavidade.

O gráfico da Figura 56 traz um intervalo de tempo total de 2.5s que permite acompanhar a evolução da temperatura durante o preenchimento da cavidade do molde. Neste gráfico é possível notar uma instabilidade nas leituras logo nos instantes iniciais devido à elevada movimentação do metal líquido, seguida de uma estabilização das leituras nos instantes subsequentes.

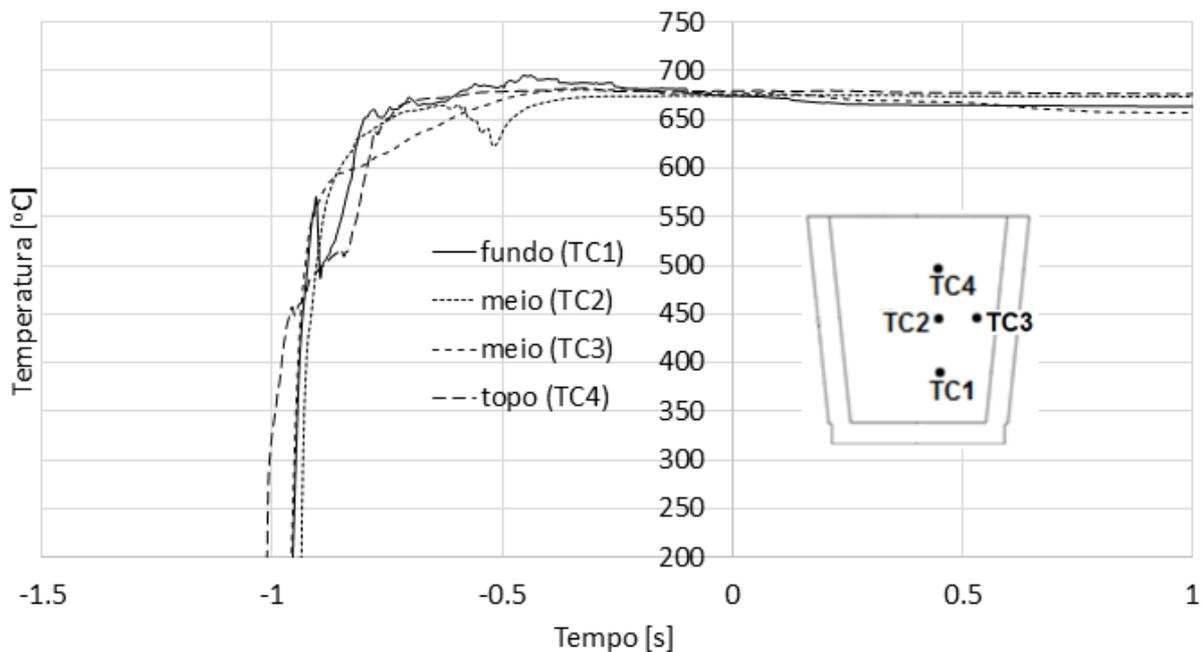
No presente trabalho optou-se por considerar como instante inicial ($t = 0$ s) o momento em que a cavidade se apresentava completamente preenchida pois para o processo de simulação numérica negligenciou-se a condição de preenchimento assumindo a condição de cavidade preenchida “instantaneamente”. Em virtude disso, momentos que antecedem o completo preenchimento da cavidade são mostrados com tempo negativo.

Figura 55 - Evolução da temperatura para os termopares TC1, TC2, TC4 e TC3 para o intervalo de 1000 s



Fonte: o próprio autor (2019)

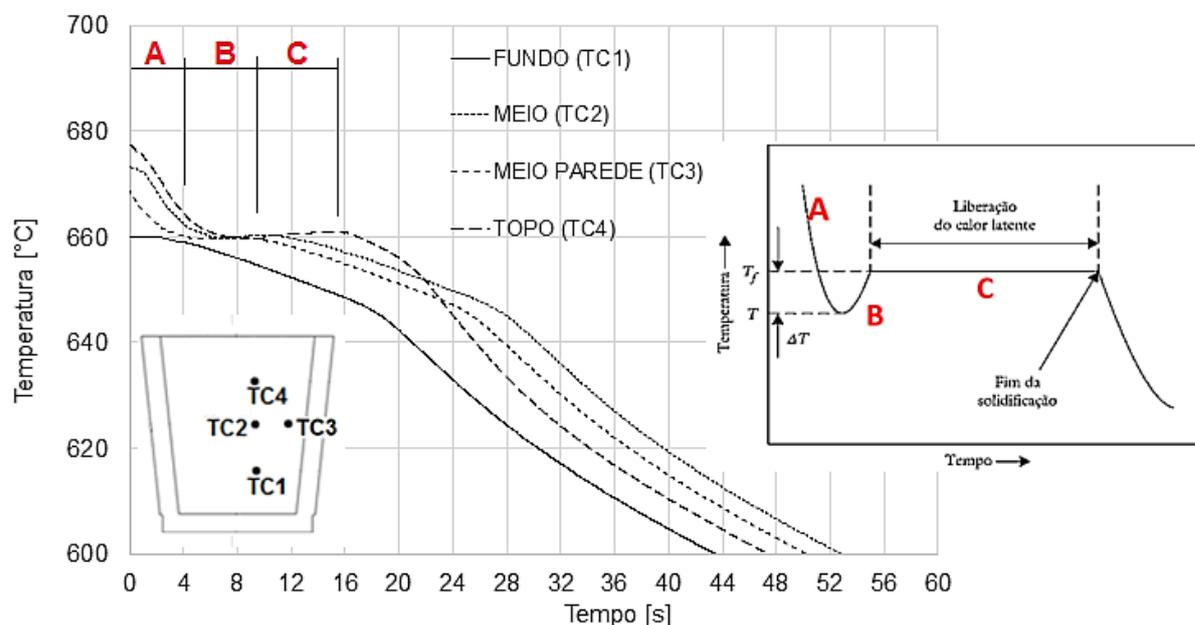
Figura 56 - Evolução da temperatura para os termopares TC1, TC2, TC3 e TC4 durante o preenchimento da cavidade



Fonte: o próprio autor (2019)

A Figura 57 mostra os instantes iniciais, após o vazamento do metal, onde inicia-se o processo de solidificação. Nesta figura pode-se observar que o termopar TC1, posicionado no fundo do molde apresentou comportamento diferente dos demais termopares. Devido ao fato de este ponto (TC1) possuir maior proximidade com as paredes inferior e lateral, entende-se que este ponto apresenta uma maior extração de calor e, portanto, uma solidificação mais rápida, justificando a leitura com temperaturas inferiores já nos instantes iniciais. Ainda na Figura 57 pode-se observar alguns aspectos comentados no item 2.1 e evidenciados na Figura 6 como a temperatura de super-aquecimento (trecho A do gráfico), a temperatura de super-resfriamento onde inicia-se a nucleação (trecho B do gráfico) e a temperatura de liberação do calor latente (trecho C do gráfico).

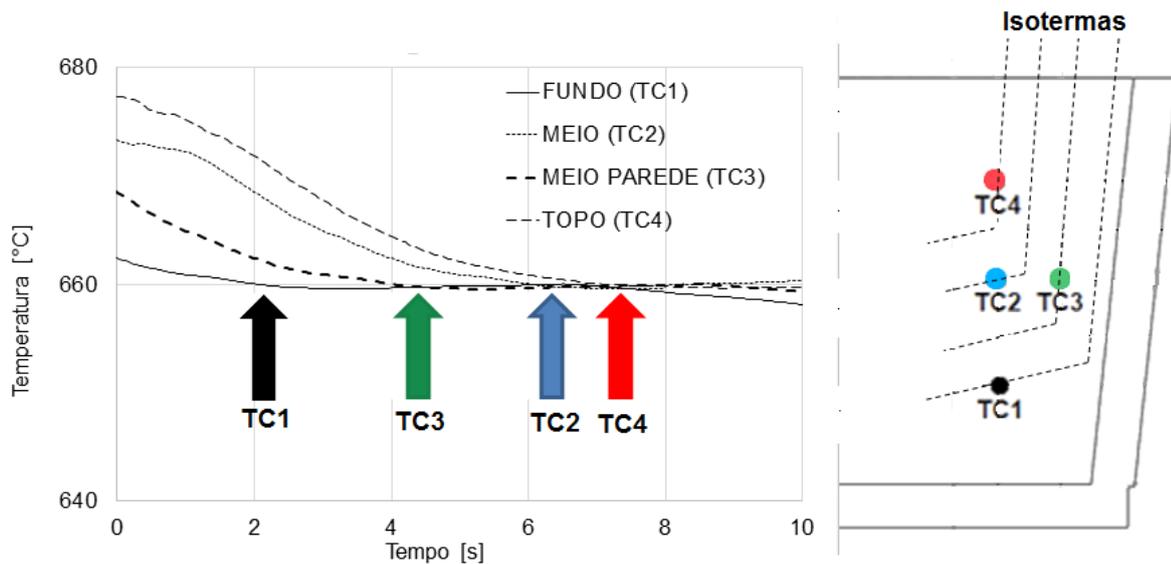
Figura 57 - Evolução da temperatura para os termopares TC1, TC2, TC3 e TC4 no intervalo de 60 s



Fonte: o próprio autor (2019)

A Figura 58 mostra as leituras dos termopares TC1, TC2, TC3 e TC4 para os instantes iniciais após o preenchimento completo da cavidade. Em uma análise ainda simplista que considera o início do processo de solidificação quando a temperatura atinge um patamar de solidificação, que corresponde ao momento em que esta se torna constante e seu valor atinge 660°C (solidificação do alumínio empregado), pode-se observar, desconsiderando-se ainda os erros dos termopares, a evolução da frente de solidificação a partir da análise dos resultados de temperatura juntamente com o tempo transcorrido do processo.

Figura 58 - Análise da frente de solidificação através dos termopares TC1, TC2, TC3 e TC4



Fonte: o próprio autor (2019)

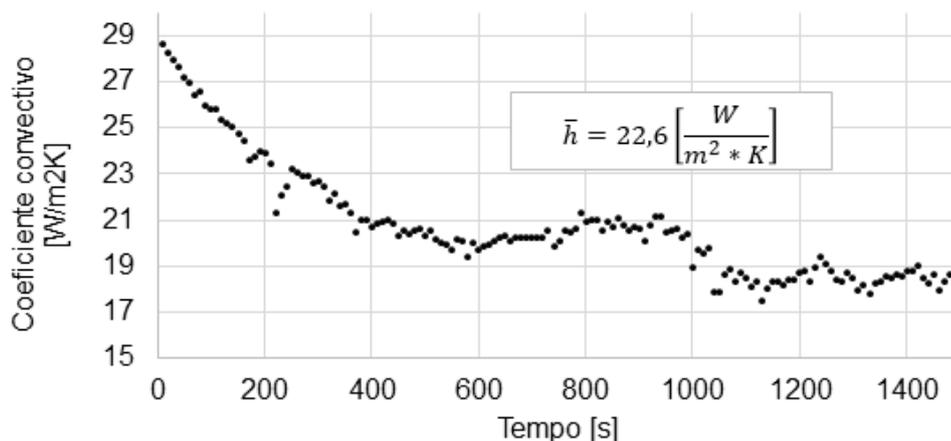
A partir da Figura 58 pode-se constatar, sem o uso da simulação numérica, que a direção de solidificação tem início nas paredes e progride para a região central em direção ao centro da peça.

No item 7.4, alguns parâmetros de processo como por exemplo a velocidade da frente de solidificação, que podem ser obtidos a partir da distância entre os termopares e o tempo de solidificação local, são abordados e os dados numéricos e experimentais são comparados.

Realizado o vazamento do molde e obtidas as temperaturas ao longo do processo obtiveram-se os parâmetros experimentais previamente explanados no item 6.3, que são o coeficiente convectivo na parede do molde, a resistência de contato metal-molde, a temperatura inicial do molde e a temperatura inicial do alumínio para serem adotados como condições de contorno para o problema numérico.

A Figura 59 mostra o gráfico obtido para o coeficiente convectivo h , obtido a partir tratamento dos dados. Observa-se que houve uma maior troca de calor no início do experimento, sendo que após 400 segundos o valor do coeficiente convectivo manteve-se próximo de $20 \text{ W/m}^2\text{K}$.

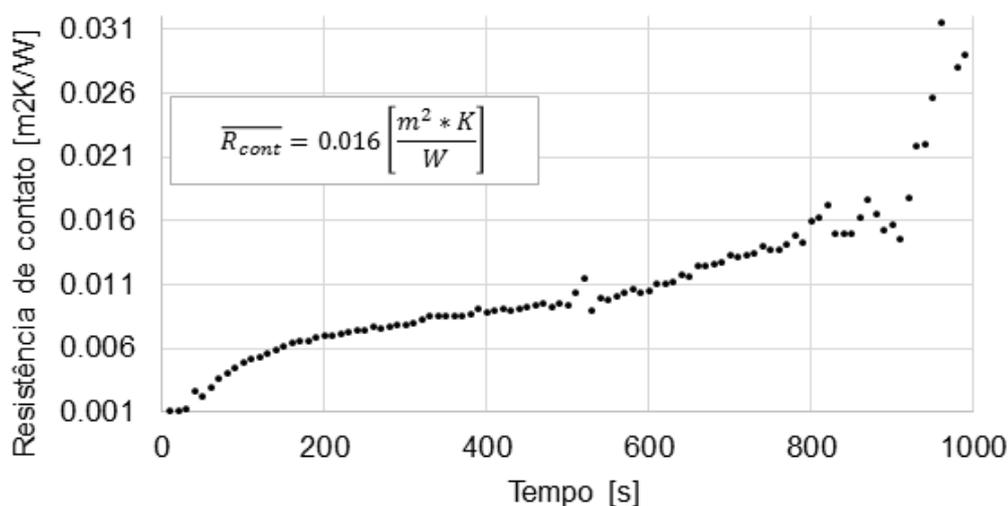
Figura 59 - Coeficiente convectivo externo ao molde obtido experimentalmente



Fonte: o próprio autor (2019)

A Figura 60 mostra o gráfico obtido para a resistência de contato entre metal e molde. Pode-se notar que o valor da resistência de contato entre o alumínio e o molde apresenta oscilações maiores após o tempo de 800 segundos. Algumas hipóteses tais como a variação da pressão de contato devido a contração do metal gerando um afastamento entre peça e a parede molde bem como a formação de óxidos nesta região constituem as possíveis causas para a oscilação nos resultados. No presente trabalho a exploração destas hipóteses não se constituiu como foco dos estudos, portanto, apesar das variações observadas nos valores do coeficiente convectivo e da resistência de contato, optou-se por utilizar para o processo de simulação os valores médios, \bar{h} e $\overline{R_{cont}}$ apresentados nos gráficos para estas grandezas.

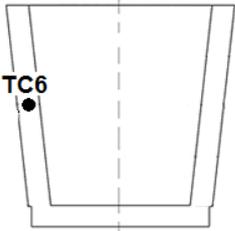
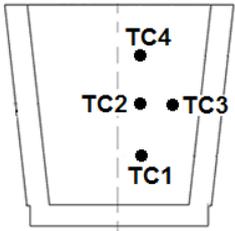
Figura 60 - Resistência de contato entre metal/molde obtido experimentalmente



Fonte: o próprio autor (2019)

Para a obtenção das temperaturas iniciais do molde e do alumínio optou-se pela coleta das informações conforme apresentado na Tabela 5.

Tabela 5 - Coleta dos parâmetros de temperatura inicial do molde e temperatura inicial do alumínio empregados na simulação numérica

Parâmetro	Sensores utilizados	Instante adotado	Valor adotado
Temperatura inicial do molde [°C]		1 s antes do vazamento do metal	51,3 °C
Temperatura inicial do alumínio [°C]		Maior temperatura observada na cavidade ao final do vazamento	680,0 °C

Fonte: o próprio autor (2019)

7.2 SIMULAÇÃO NUMÉRICA

A seguir são apresentados os aspectos gerais das simulações numéricas realizadas. Conforme já exposto, o presente trabalho aborda o processo de solidificação juntamente com a avaliação da contração volumétrica do material.

Por uma questão de ordenação do conteúdo e tendo em vista que tais avaliações possuem algumas implicações distintas do ponto de vista de configuração do programa ANSYS FLUENT®, os resultados de solidificação e porosidade são apresentados separadamente de forma a facilitar a compreensão por parte do leitor.

7.2.1 Simulação numérica do processo de solidificação

Inicialmente são expostas as condições de contorno empregadas, em seguida são apresentadas as definições de malha adotadas e por fim são apresentadas as comparações entre os resultados numéricos e experimentais.

7.2.1.1 Condições de contorno

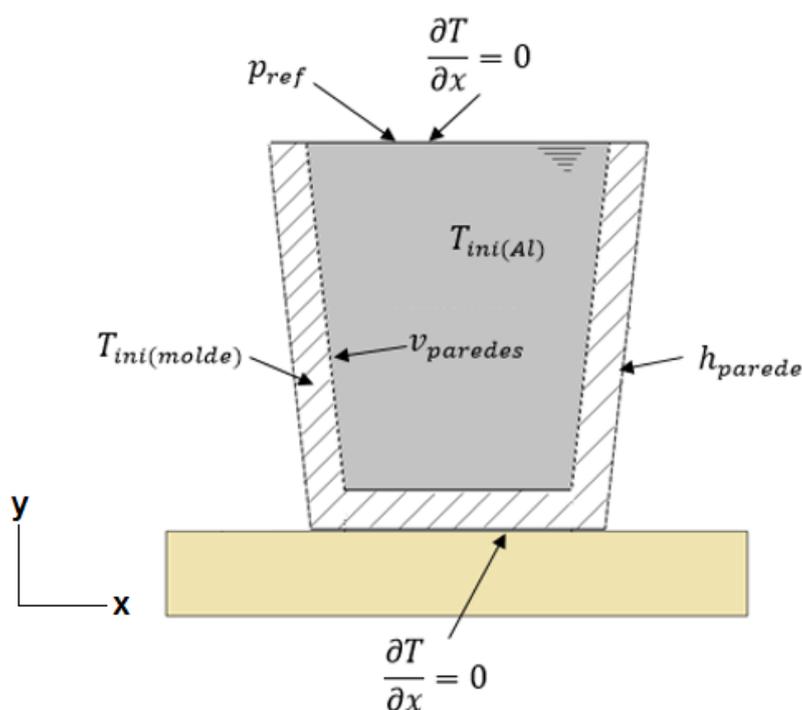
O modelamento das condições de contorno do domínio numérico deve levar em conta as condições necessárias para reproduzir as características existentes no processo real de tal forma que a simulação seja capaz de representar o fenômeno físico envolvido.

Ressalta-se que se adotaram algumas simplificações visando acelerar o processo de simulação bem como eliminar algumas variáveis cuja influência teriam impacto reduzido nos resultados, tais como:

- Processo de vazamento do molde não avaliado, portanto assumiu-se um “preenchimento” instantâneo da cavidade.
- Temperaturas iniciais uniformemente aplicadas em cada domínio;
- Paredes internas e externas isentas de atrito e rugosidades;

A principais condições de contorno envolvem a definição do domínio de simulação e as características em cada região tais como: temperatura, velocidades, campos de pressão e propriedades dos materiais.

Figura 61 - Condição de contorno de temperatura para análise da solidificação



Fonte: o próprio autor (2019)

Tabela 6 - Condições de contorno para a simulação da solidificação

Temperatura inicial do molde $T_{ini(molde)}$	51.3 °C
Temperatura inicial do alumínio $T_{ini(Al)}$	680 °C
Convecção em torno do molde h_{parede}	22.6 W/mK
Pressão de referência na superfície do alumínio p_{ref}	1 atm
Velocidades nas paredes $v_{paredes} (u, v, w)$	zero
Densidade do aço (molde) ρ_{molde}	8030 kg/m ³
Calor específico do aço (molde) $C_p (molde)$	482 J/kgK
Condutividade térmica do aço (molde) $k (molde)$	60 W/mK
Densidade do alumínio ρ_{al}	Ver item 6.2
Calor específico do alumínio $C_p(al)$	Ver item 6.2
Condutividade térmica do alumínio $k (al)$	Ver item 6.2
Calor Latente $L (al)$	Ver item 6.2
Temperatura Sólido (alumínio) $T_s (al)$	654°C
Temperatura Líquido (alumínio) $T_l (al)$	657°C

Fonte: o próprio autor (2019)

7.2.1.2 Análise de sensibilidade de malha

Visando obter uma preparação adequada para a simulação do caso proposto, realizou-se um estudo da influência do tamanho da malha mantendo-se uma discretização de segunda ordem para as equações de energia, momento e formulação transiente. A Figura 62 mostra as malhas empregadas.

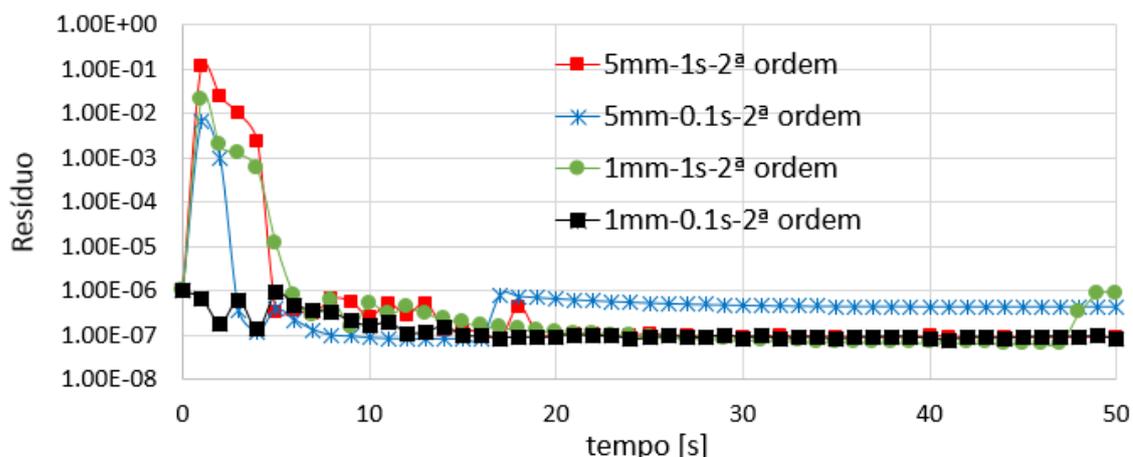
Figura 62 - Domínio computacional com malha 5 mm (à esquerda) e 1 mm (à direita)



Fonte: o próprio autor (2019)

Para a comparação dos resultados optou-se por avaliar os resíduos de simulação em cada condição que são mostrados na Figura 63 variando-se o tamanho de malha e passo de tempo.

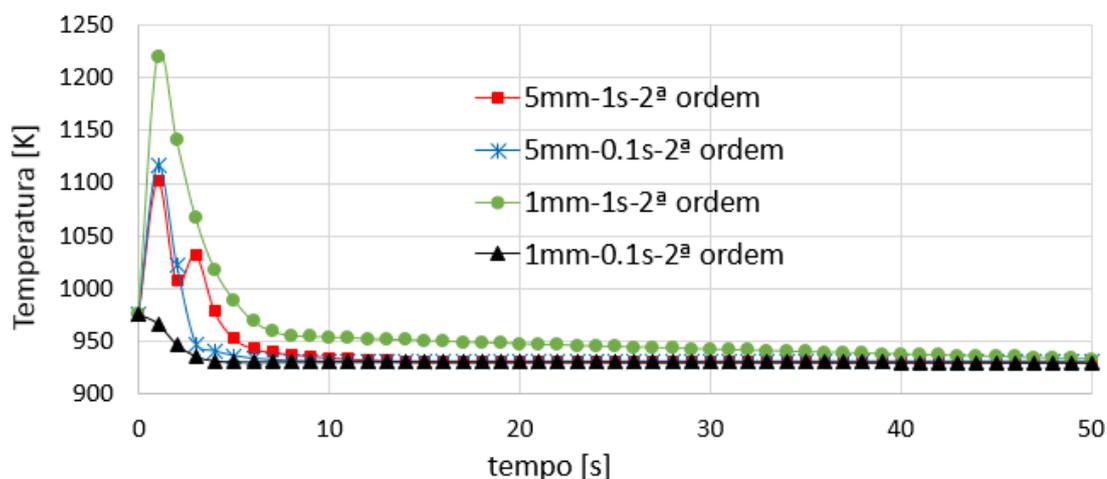
Figura 63 - Comparação entre os resíduos em função da malha e passo de tempo



Fonte: o próprio autor (2019)

Pode-se observar resíduos mais elevados nos instantes iniciais da simulação para as duas condições com malhas mais grossieras (5 mm) e também para a condição de malha refinada (1mm) com o emprego de um passo de tempo mais elevado (1 s). Pelo fato de o fenômeno em estudo ser transiente e os resultados ao longo das iterações dependerem dos passos anteriores, é desejado que os resíduos sejam mantidos em toda a evolução da simulação. Para ilustrar essa necessidade a Figura 64 mostra uma comparação semelhante a apresentada na Figura 63 porém mostra os resultados de temperatura obtidos para as mesmas configurações simuladas.

Figura 64 - Comparação entre as temperaturas em função da malha e passo de tempo



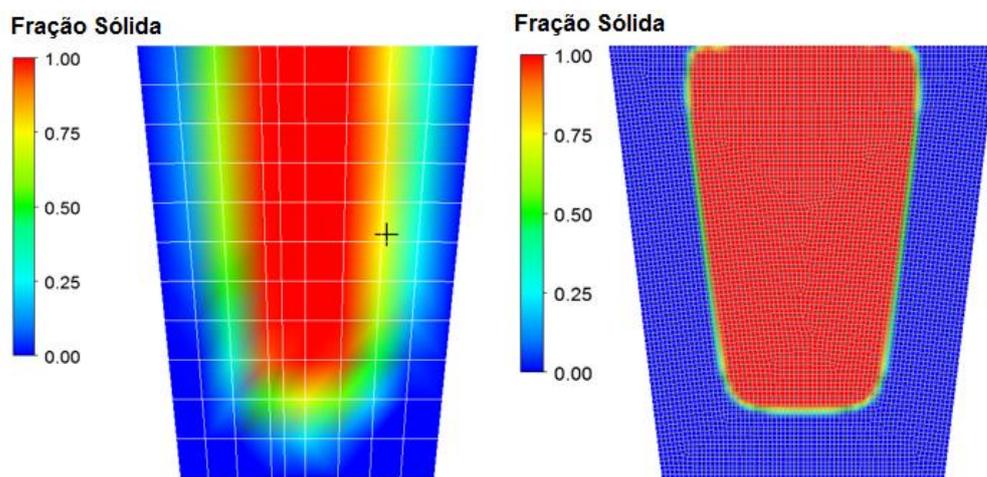
Fonte: o próprio autor (2019)

Observa-se que a malha maior (5 mm) e malha refinada (1 mm) com o emprego de um passo de tempo mais elevado (1 s) não forneceram resultados adequados e apresentaram elevações de temperaturas muito grandes nos instantes iniciais, sendo fisicamente inconsistentes com o caso experimental.

Optou-se então por trabalhar com malhas menores ou iguais a 1 mm seguindo um passo de tempo menor ou igual a 0.1 s.

A Figura 65 mostra uma comparação dos resultados numéricos para dois casos citados no gráfico da Figura 63 onde pode-se observar uma diferença significativa no detalhamento da frente de solidificação. O resultado da frente de solidificação apresentado para a malha com dimensão características de 1 mm é justificado pelo fato de o material em questão ser puro e, portanto, apresentar uma faixa estreita de solidificação (diferença em T_s e T_l) sugerindo uma frente de solidificação plana. A comparação dos resultados justifica claramente a escolha por uma malha mais refinada e um evolução temporal menos acentuada para melhores resultados.

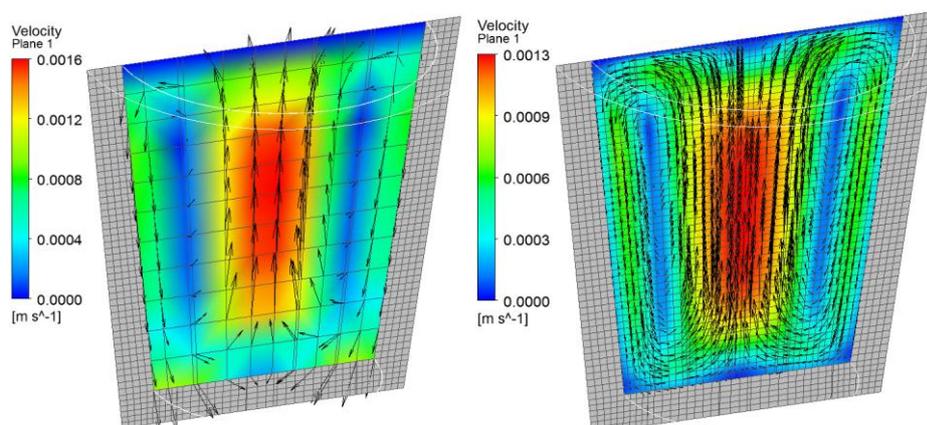
Figura 65 - Comparação da fração sólida em seção transversal para malha com 5mm e Dt de 1 s (à esquerda) e malha com 1 mm e Dt de 0.1 s (à direita) em um mesmo instante de tempo da simulação.



Fonte: o próprio autor (2019)

Apesar de o fluxo convectivo ser reduzido no interior do líquido, fez-se uma comparação entre os campos de velocidade relacionados às malhas avaliadas (ver Figura 66). Como pode ser observado, há uma diferença de aproximadamente 20% na velocidade máxima entre as duas configurações.

Figura 66 - Campo de velocidades no interior do líquido para um tempo de 2 s.



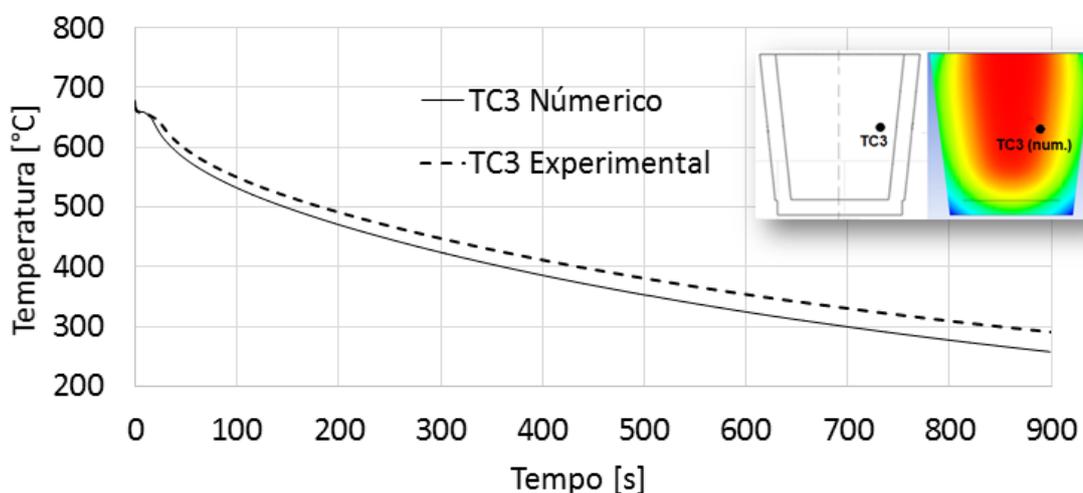
Fonte: o próprio autor (2019)

7.3 COMPARAÇÃO NUMÉRICO-EXPERIMENTAL DOS CAMPOS DE TEMPERATURA

São apresentadas a seguir algumas comparações entre os resultados numéricos e os dados experimentais.

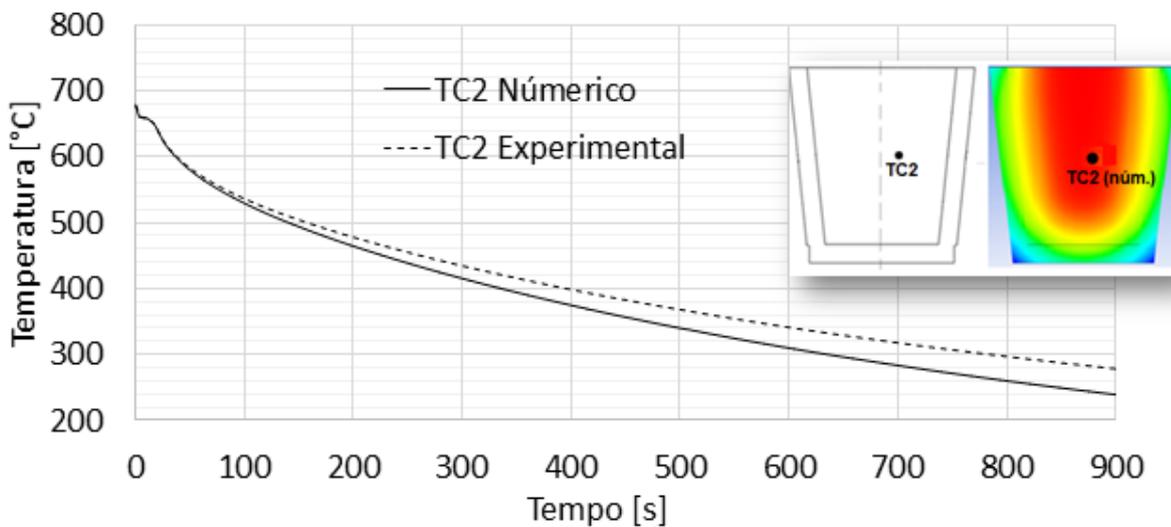
As Figuras 67 e 68 mostram uma comparação entre os resultados experimentais e numéricos para os termopares centrais TC2 e TC3 respectivamente em um intervalo de tempo de 900 s onde é possível observar uma boa correlação entre os resultados.

Figura 67 - Comparação numérico/experimental dos resultados no ponto TC3 para um intervalo de 900 s



Fonte: o próprio autor (2019)

Figura 68 - Comparação numérico/experimental dos resultados no ponto TC2 para um intervalo de 900 s



Fonte: o próprio autor (2019)

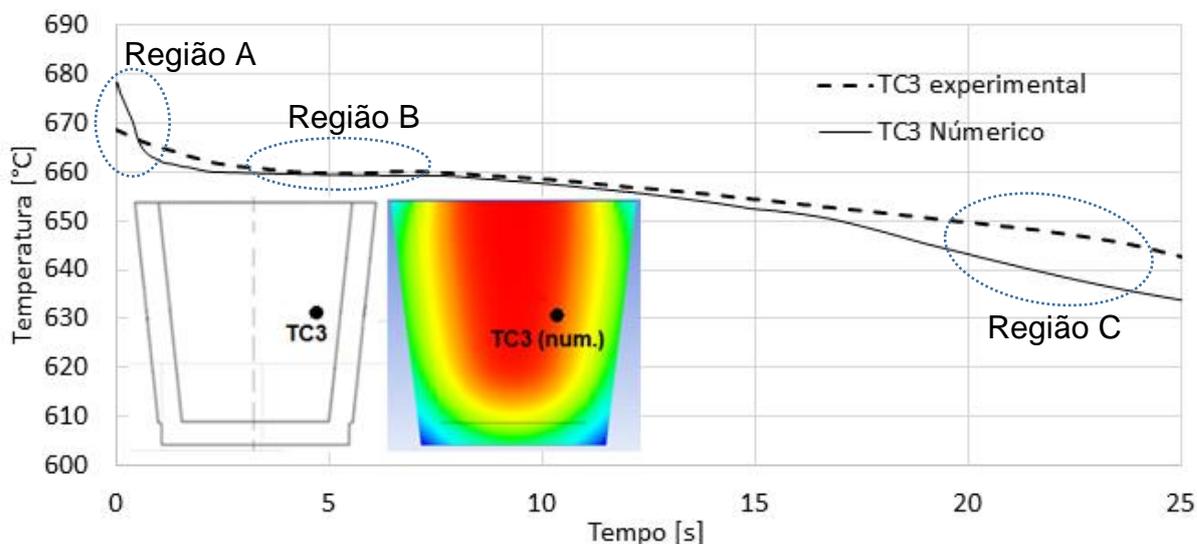
Nas Figuras 69 e 70 também são apresentados os resultados para os termopares TC2 e TC3 porém em um intervalo de tempo menor (25 s) de modo a permitir uma melhor visualização do trecho onde ocorre a mudança de fase do material.

Nota-se no resultado numérico transições mais abruptas principalmente da região de superaquecimento para a região de mudança de fase (indicado na Figura 69 pela região A), fato este que pode ser atribuído a condição de contorno de temperatura inicial igualmente aplicada a todo o domínio.

Na região de mudança de fase (indicado na Figura 69 pela região B), onde a temperatura se mantém constante, observa-se boa correlação entre resultado numérico e experimental para a mudança de fase.

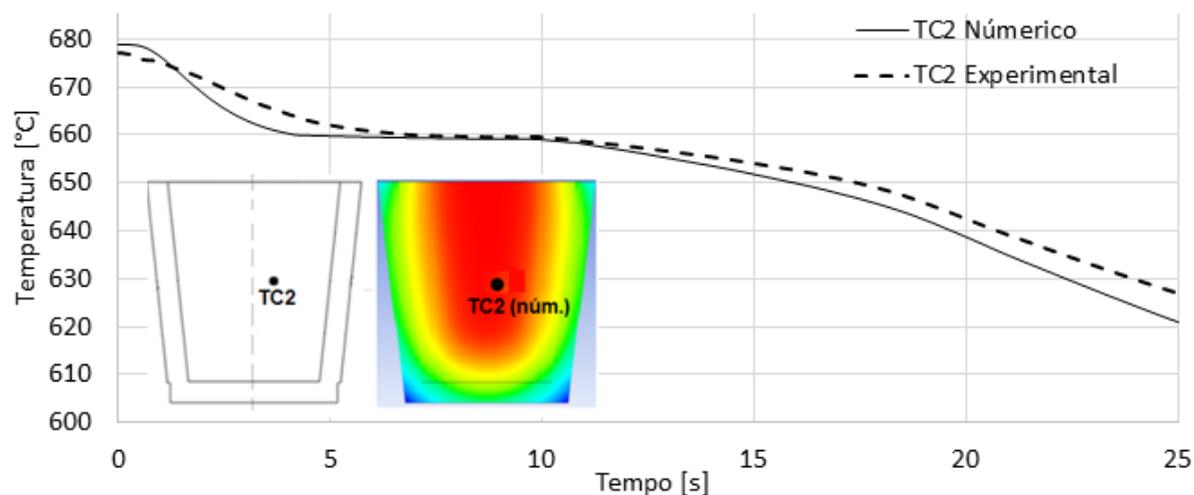
Uma maior dispersão, no entanto, pode ser observada na região após a solidificação (indicado na Figura 69 pela região C), quando o conjunto inicia o resfriamento com a região já solidificada. Tal efeito pode ser atribuído à consideração das propriedades de transferência de calor (h e R_c) como constantes ao longo do ensaio.

Figura 69 - Comparação numérico-experimental para termopar central (TC3)



Fonte: o próprio autor (2019)

Figura 70 - Comparação numérico/experimental para termopar central (TC2)



Fonte: o próprio autor (2019)

7.4 PARÂMETROS TÉRMICOS DE SOLIDIFICAÇÃO

No processo de fundição, o conhecimento de alguns parâmetros como: velocidade de solidificação, taxa de resfriamento e gradiente térmico são importantes para permitir um maior controle do processo e são utilizados para correlacionar tais fatores com características como: estrutura cristalina, resistência mecânica, segregação de componentes de adição, defeitos de fundição entre outros.

A seguir a obtenção desses parâmetros é apresentada para o caso em estudo utilizando-se dois termopares TC2 e TC3 como referência. Ressalta-se que a

metodologia aqui empregada pode ser utilizada para todos os termopares presentes no interior do molde e para qualquer ponto do domínio numérico permitindo uma análise do resfriamento em toda a peça fundida. No presente trabalho o enfoque é dado à comparação entre os resultados experimentais e numéricos de modo a qualificar a análise realizada.

7.4.1 Determinação dos Parâmetros Térmicos de Solidificação

A velocidade de solidificação, V_s [mm/s], refere-se ao deslocamento da interface sólido/líquido em relação ao tempo e é dada pela equação (7.1).

$$V_s = \frac{dS}{dt_{SL}} \quad (7.1)$$

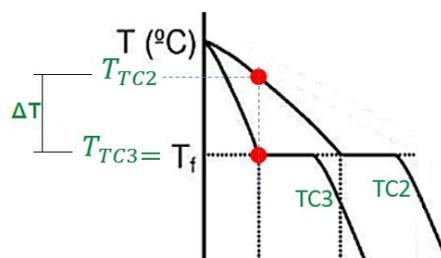
onde dS corresponde ao deslocamento da frente de solidificação e dt_{SL} corresponde ao intervalo de tempo em que a frente de solidificação se deslocou.

O gradiente térmico de solidificação, G [°C/mm], corresponde à diferença de temperatura entre a interface já solidificada e o metal líquido a frente dessa interface. Sua determinação experimental é realizada a partir da diferença de temperatura entre dois pontos e sua relação com a distância entre esses pontos. Essa verificação utilizando pontos de medição discretos no domínio chama-se gradiente térmico local, G_{Local} , que é descrito pela equação (7.2). Ressalta-se que este valor não é constante e depende de uma série de fatores tais como, forma da peça e condições de resfriamentos locais.

$$G_{Local} = \frac{dT}{dS} \quad (7.2)$$

onde dT corresponde à variação da temperatura entre os pontos avaliados e dS corresponde deslocamento da frente de solidificação. A Figura 71 exemplifica a obtenção do gradiente térmico.

Figura 71 - ilustração gráfica da obtenção do gradiente térmico



Fonte: o próprio autor (2019)

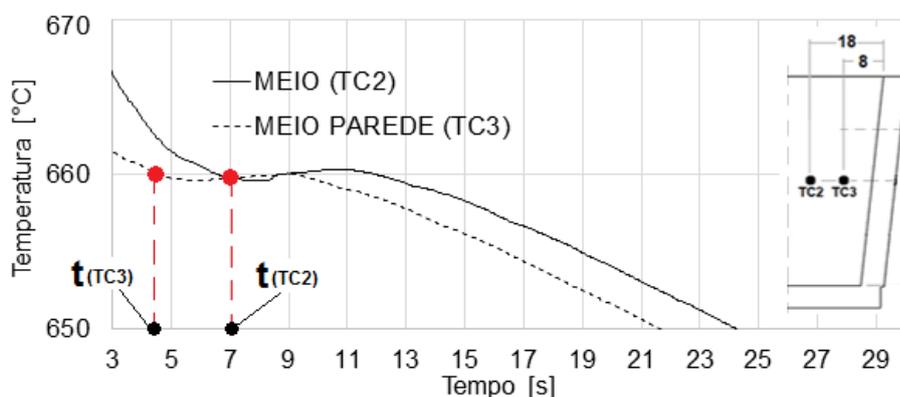
Por fim, a taxa de solidificação, \dot{T} [$^{\circ}\text{C}/\text{s}$] refere-se extração de calor da peça em um determinado instante do processo de solidificação e é dada pela equação (7.3).

$$\dot{T} = V_s G_{Local} \quad (7.3)$$

7.4.2 Obtenção dos Parâmetros Térmicos de Solidificação

A partir dos dados obtidos na análise experimental é possível construir os gráficos das curvas de resfriamento em função do tempo para cada um dos termopares posicionados no metal. A Figura 72 mostra as curvas de solidificação obtidas para os termopares TC2 e TC3. Nota-se que o ponto indicado pelo sensor TC3 inicia a solidificação antes de TC2, indicando uma direção de solidificação a partir da parede do molde. Os valores de t_{TC3} e t_{TC2} indicados na Figura 72 representam o instante de tempo em que é alcançado o início da solidificação (660°C).

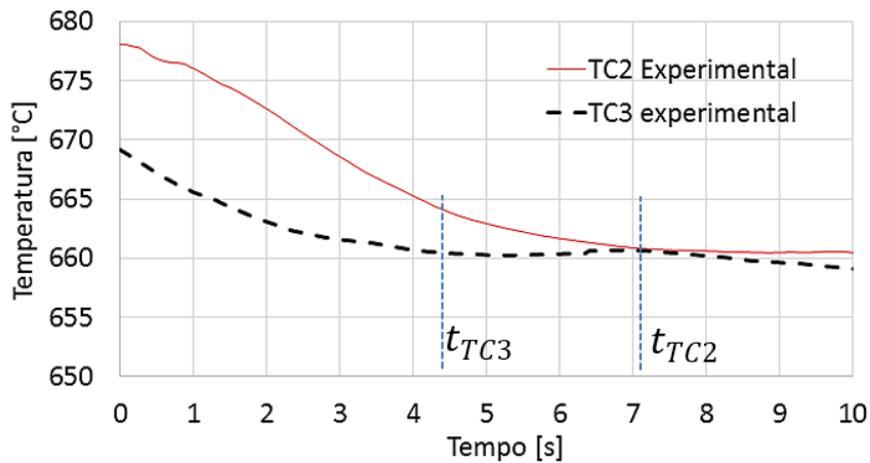
Figura 72 – Exemplo de curva de resfriamento para um metal puro registrada por três termopares (TP1, TP2 e TP3)



Fonte: o próprio autor (2019)

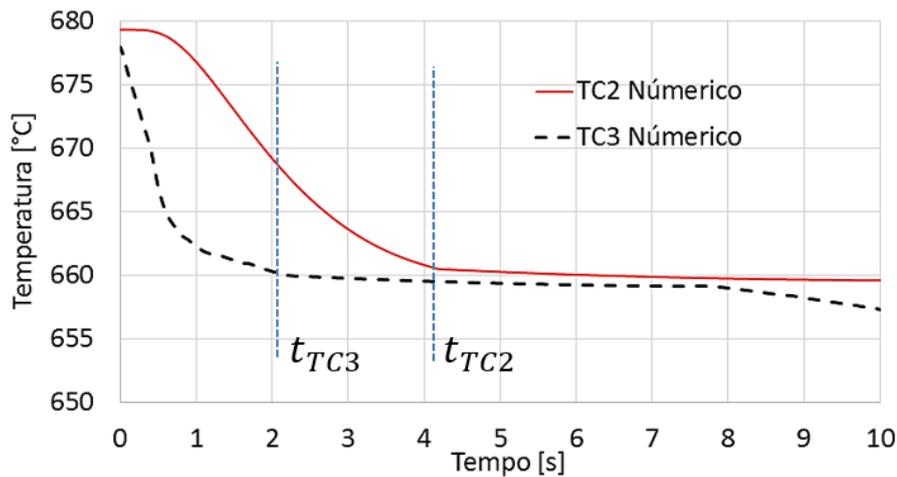
As Figuras 73 e 74 mostram as curvas de resfriamento experimental e numérica para os sensores TC2 e TC3 destacando o momento em que se inicia o processo de solidificação.

Figura 73 - Registro do início da solidificação local experimental registrada pelos termopares TC2 e TC3



Fonte: o próprio autor (2019)

Figura 74 - Registro do início da solidificação local numérica para os pontos TC2 e TC3

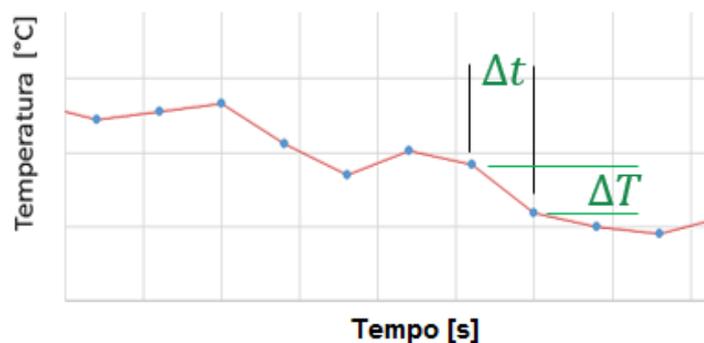


Fonte: o próprio autor (2019)

Tendo-se em vista que as leituras das temperaturas nos termopares apresentam uma flutuação (ver Figura 75) e sabendo-se que a etapa de solidificação do material ocorre com temperatura constante, optou-se por determinar o momento em que o material entra na região de solidificação avaliando-se a flutuação das leituras acrescida de um fator escolhido como critério, ou seja, enquanto a diferença de

temperatura entre uma leitura no instante qualquer e a leitura do mesmo ponto no instante anterior for maior que a flutuação inerente ao sensor, isto significa dizer que a temperatura não é constante. Por outro lado, se para a mesma situação esta diferença de temperatura corresponde apenas ao valor inerente a flutuação entre leituras subsequentes, pode-se assumir que a temperatura é constante.

Figura 75 - Ilustração da flutuação da leitura do termopar



Fonte: o próprio autor (2019)

Para a determinação da máxima oscilação empregou-se a equação (7.3) a todo o conjunto de leituras obtidas durante o processo.

$$\text{Máx Oscilação: } T_{t+\Delta t} - T_t \quad (7.4)$$

onde T_t é a temperatura no instante atual e $T_{t+\Delta t}$ corresponde temperatura no instante seguinte. Ressalta-se que no presente trabalho empregou-se um intervalo entre leituras igual a 0.04 s.

Finalmente a equação (7.5) apresenta o critério de solidificação onde optou-se por empregar um fator de acréscimo de 0.1°C.

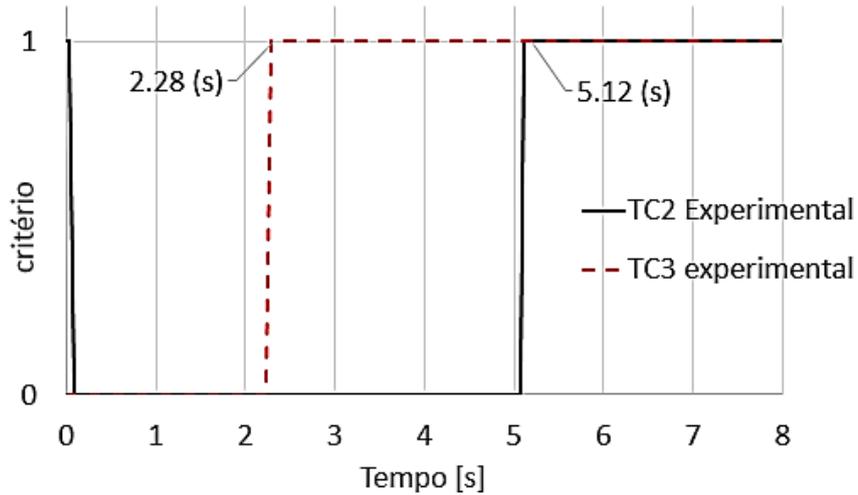
$$\text{Critério de Solidificação: } 0.1 \text{ [}^\circ\text{C]} + \text{Máx Oscilação} \quad (7.5)$$

A partir do critério definido pela equação (7.5) definiram-se os tempos de início da solidificação experimental e numérico que são apresentados graficamente nas figuras 76 e 77. Para a construção dos gráficos empregou-se os critérios apresentados que seguem:

$$\begin{cases} Se, \Delta T < \text{critério de solidificação} ; 1 \\ Se, \Delta T < \text{critério de solidificação} ; 0 \end{cases} \quad (7.6)$$

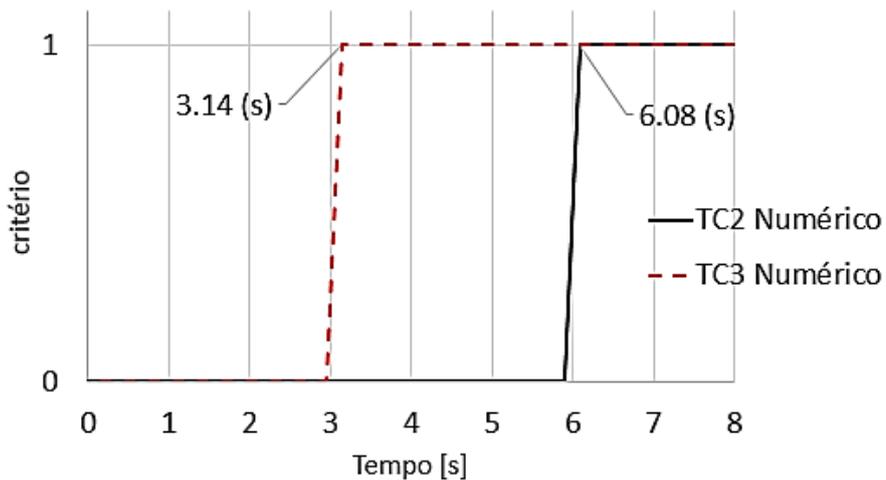
Onde ΔT corresponde a diferente entre leituras subsequentes.

Figura 76 - Tempo de início de solidificação experimental



Fonte: o próprio autor (2019)

Figura 77 - Tempo de início de solidificação numérica



Fonte: o próprio autor (2019)

A partir dos gráficos do processo obtiveram-se os tempos correspondentes ao momento de início do processo de solidificação. Ressalta-se que esta avaliação é apresentada com base na leitura de dois termopares e, portanto, dois pontos numéricos por questões de comparação, permitindo apenas uma determinação

simples da velocidade entres os pontos avaliados, sendo que tal valor pode variar em diferentes regiões da peça devido à diferentes condições locais de extração do calor.

Conforme apresentado no item 6.1.1, onde é abordado estudo da resposta dinâmica do termopar, destaca-se que o mesmo apresentou um tempo de 0.1 s para atingir a temperatura de 100°C, ou seja, apresentou uma taxa de captura do aquecimento de 0.001 s/°C para o experimento realizado. Considerando-se esta taxa no intervalo entre a temperatura ao final do preenchimento (aproximadamente 680 °) e a temperatura de solidificação (660 °C), tem-se um erro devido a inércia do sensor de 0.02 s. Nos resultados que seguem apresentados na Tabela 7 esta compensação do tempo de captura experimental já é mostrada corrigida.

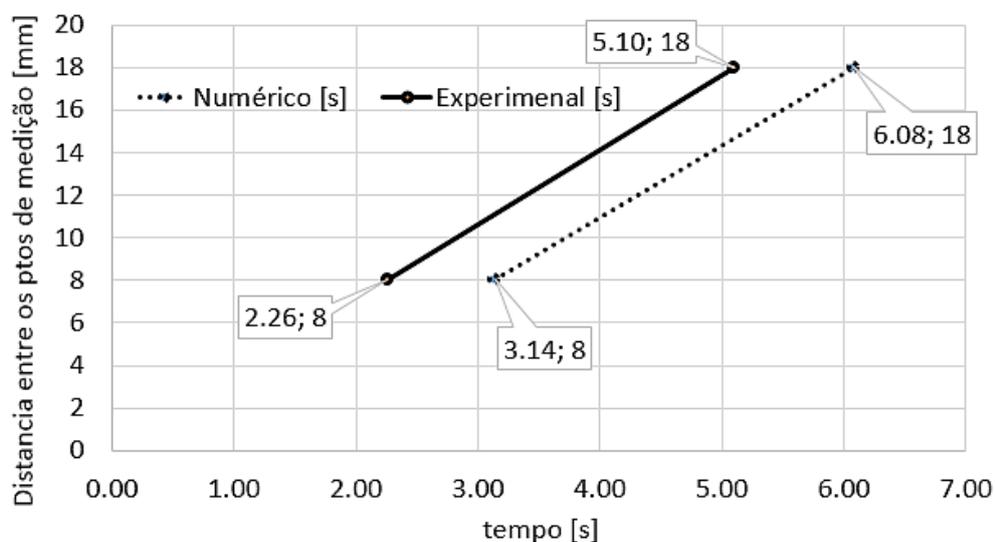
Tabela 7 - Registro dos inícios da solidificação ($T_s = T_{sólido}$) localmente nos pontos de correspondentes aos termopares TC2 e TC3

Sensor	Ponto [mm]	Ponto onde T_s for atingido		Diferença
		Númerico [s]	Experimental [s]	Exp/Num [%]
TC3	8	3.14	2.26	-28.0%
TC2	18	6.08	5.10	-16.1%

Fonte: o próprio autor (2019)

A Figura 78 mostra o gráfico da posição dos termopares em função do tempo de solidificação.

Figura 78 - Gráfico da posição dos pontos em função do tempo de solidificação



Fonte: o próprio autor (2019)

A Tabela 8 traz as velocidades da frente de solidificação obtidos onde observa-se um resultado com boa aproximação numérico-experimental apresentando um erro considerado pequeno (3.5%) para os pontos estudados. Vê-se que o método de obtenção dos dados utilizando-se um critério para a obtenção do momento da solidificação mostrou-se consistente.

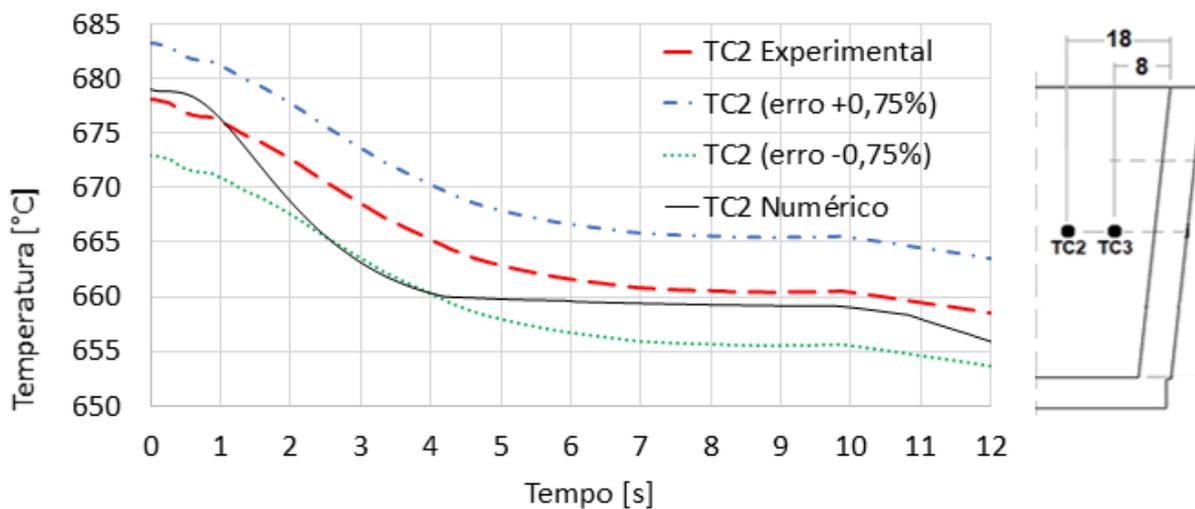
Tabela 8 - Velocidade da frente solidificação calculadas

V_s Numérico [m/s]	V_s Experimental [m/s]	Exp/Num [%]
3.40	3.52	+3.5%

Fonte: o próprio autor (2019)

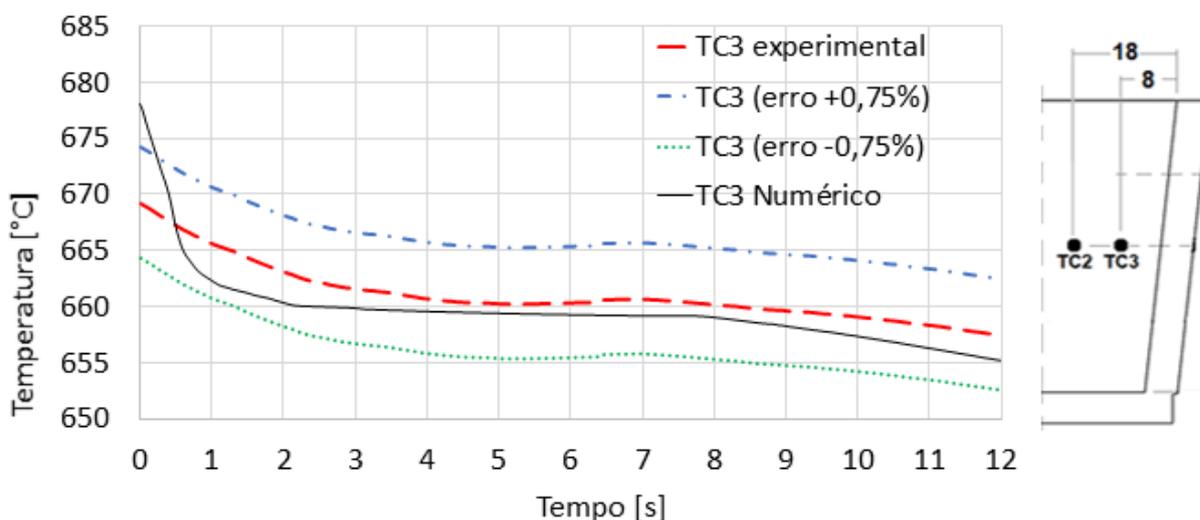
Outro ponto a ser observado está no fato de que os sensores de temperatura apresentam erros de medição de até 0.75%. Aplicando-se estes erros aos sensores e comparando com os resultados numéricos obtém-se as curvas apresentadas nas figuras 79 e 80. Optou-se por apresentar as temperaturas para um intervalo pequeno (12 s) visando facilitar a observação da região de mudança de fase.

Figura 79 - Comparação numérico/experimental para o sensor TC2 incluindo a faixa de erro dos termopares



Fonte: o próprio autor (2019)

Figura 80 - Comparação numérico/experimental para o sensor TC3 incluindo a faixa de erro dos termopares



Fonte: o próprio autor (2019)

Na Tabela 9 são apresentados os resultados finais obtidos para os parâmetros térmicos discutidos anteriormente. Nota-se que em função da proximidade dos termopares os erros influenciam bastante nos resultados obtidos, chegando a gerar resultados com sinal negativo, que constituem uma possibilidade inexistente para o caso em estudo visto que, fisicamente estes valores indicariam que a peça está em processo de fusão ao invés de solidificação.

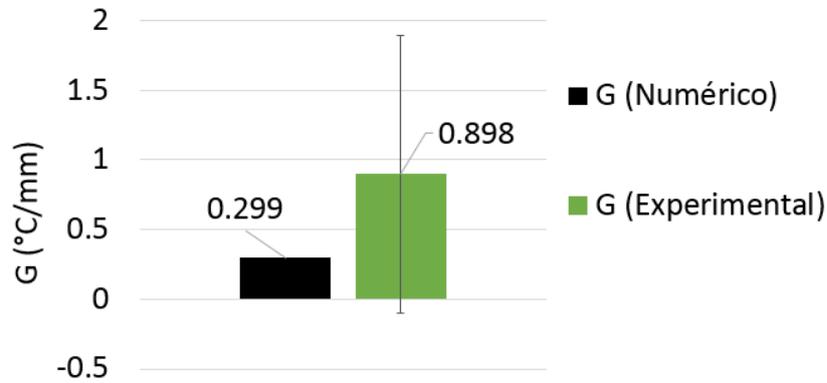
Tabela 9 - Comparação numérico/experimental para os parâmetros térmicos de solidificação

Parâmetros	Numérico	Experimental
V_s (mm/s)	3.40	3.52
G_{Local} ($^{\circ}\text{C}/\text{mm}$)		0.898
G_{Local} max ($^{\circ}\text{C}/\text{mm}$)	0.299	1.898
G_{Local} min ($^{\circ}\text{C}/\text{mm}$)		-0.102
\dot{T} [$^{\circ}\text{C}/\text{mm}$]		3.16
\dot{T} max [$^{\circ}\text{C}/\text{mm}$]	1.02	6.68
\dot{T} min [$^{\circ}\text{C}/\text{mm}$]		-0.36

Fonte: o próprio autor (2019)

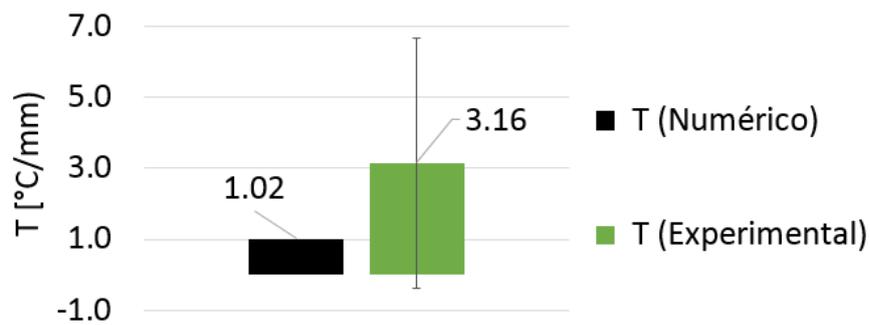
Os gráficos das Figura 81 e 82 mostram as comparações numérico-experimentais para os resultados de gradiente térmico e taxa de resfriamento acrescidos das barras de erro experimental apresentadas na Tabela 9.

Figura 81 - Comparação numérico/experimental do gradiente térmico G na frente de solidificação



Fonte: o próprio autor (2019)

Figura 82 - Comparação numérico/experimental da taxa de resfriamento \dot{T} na frente de solidificação



Fonte: o próprio autor (2019)

7.5 SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE AVALIAÇÃO DA POROSIDADE POR CONTRAÇÃO VOLUMÉTRICA

Para a simulação da contração volumétrica optou-se por seguir o mesmo setup numérico utilizado na simulação da solidificação incluindo as mesmas condições de contorno que são abordadas no item 7.2.1.1.

A particularidade quanto as condições de contorno estão relacionadas à existência de uma interface com duas fases no domínio, que são: ar e alumínio, no caso do presente estudo. A Tabela 10 mostra as propriedades adotadas para o ar.

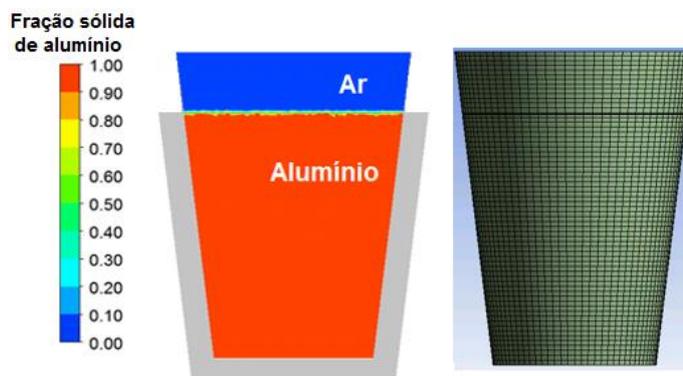
Tabela 10 - Propriedades do ar empregadas na simulação

Densidade do ar ρ_{ar}	1.225 kg/m ³
Calor específico do ar $C_{p(ar)}$	1000 J/kgK
Condutividade térmica do ar $k_{(ar)}$	0.0242 W/mK
Viscosidade $\mu_{(ar)}$	1.7894e-5 kg/ms

Fonte: Elaborado pelo próprio autor (2019) com base em Leitner et.al (2017)

Inicialmente modificou-se o domínio de forma a gerar uma camada de ar sobre o alumínio tal como mostrado na Figura 84. A escala de cores representando a fração sólida de alumínio mostrada na figura e significa que para valores iguais a 1 tem-se apenas alumínio, enquanto valores de fração sólida iguais a 0 possuem apenas ar. Valores, portanto, entre 0 e 1 representam a zona de transição entre as duas fases.

Figura 83- Domínio 3D de simulação inicial com alumínio e ar e malha com 24 mil elementos



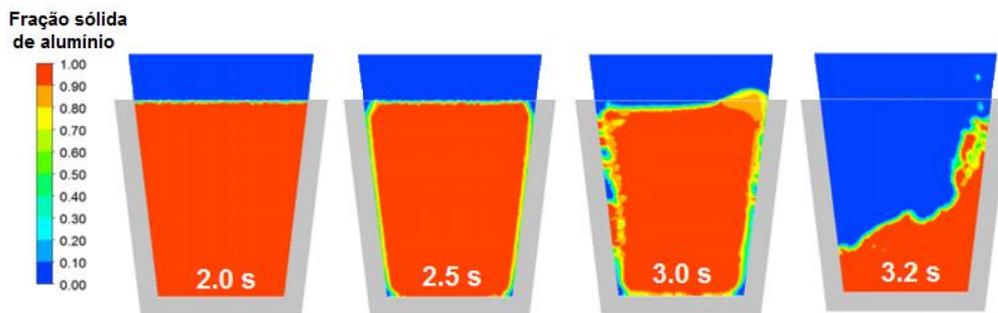
Fonte: o próprio autor (2019)

Apesar das dificuldades apresentadas no item 3.2.6 a respeito de instabilidades numéricas, reportadas por Reitzle (2016), e dificuldades de convergência e precisão destacados em FLUENT® (2015), optou-se nesta etapa do trabalho por realizar testes preliminares com malhas e avanços temporais preestabelecidos nas simulações anteriores para avaliação da solidificação com o intuito de avaliar a estabilidade das simulações.

Durante a rodada da primeira configuração percebeu-se a particularidade do método quanto a baixa estabilidade comentada no parágrafo anterior. A Figura 84 mostra a evolução da fração sólida para um passo de tempo igual a 0.1 s em quatro instantes da simulação. Pode-se perceber nos instantes de 2,0 s e 2,5 s que o

processo de solidificação inicia-se corretamente nas regiões próximas às paredes, porém, no instante de 3,0 s nota-se que o problema começa a apresentar falta de estabilidade também nas regiões próximas a parede. A partir desse instante, vê-se que passados apenas 0,2 s, o problema apresenta um resultado onde a massa de alumínio é reduzida no interior da cavidade, o que constitui um resultado fisicamente inconsistente para o caso em estudo.

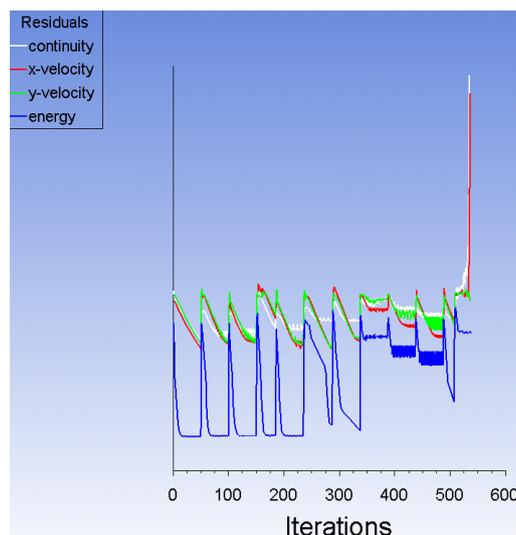
Figura 84 - Evolução da fração líquida para o primeiro caso com VOF rodado.



Fonte: o próprio autor (2019)

A Figura 85 mostra um gráfico de resíduos onde pode ser observada a instabilidade no modelo.

Figura 85 - Gráfico de resíduo para rodada com VOF, Δt 0.1s e malha 1 mm

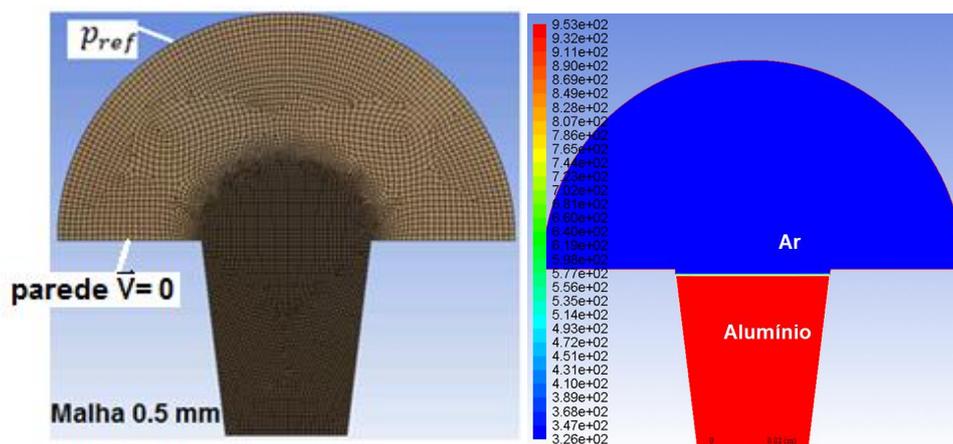


Fonte: o próprio autor (2019)

Em vista disso optou-se por uma modificação no tamanho dos elementos da malha reduzindo os mesmos para 0,5 mm, além de uma mudança na condição de

contorno de pressão e a alteração para modelo 2D. A nova condição de contorno de pressão consistiu em afastar a região com aplicação da condição de contorno com $p_{ref} = 1 \text{ atm}$ de forma evitar gradientes de pressão muito acentuados próximos a superfície livre do líquido.

Figura 86 - Modificação do domínio para aumentar a estabilidade do caso



Fonte: o próprio autor (2019)

Após o emprego das modificações propostas alcançou-se a convergência do caso. Ressalta-se que não foram investigados em profundidade o emprego de novas condições de contorno, restringindo a análise apenas a comparação numérico-experimental

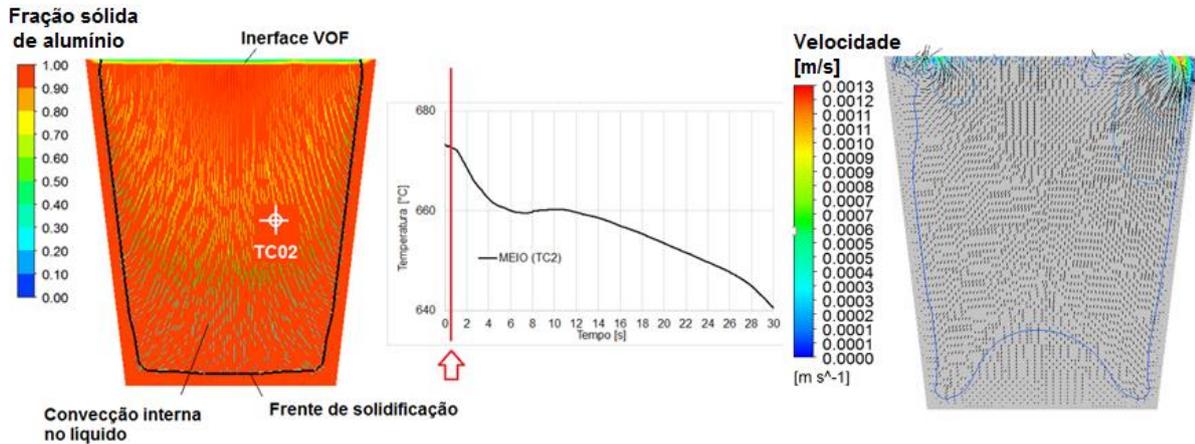
7.5.1 Comparação numérico-experimental da contração volumétrica

As Figura 87, 88 e 89 mostram a sequência de formação da cavidade central. Nas figuras são apresentadas, juntamente com a formação da cavidade, o contorno da frente de solidificação e o gráfico de resfriamento da peça para ponto TC02, onde pode-se avaliar a associação dos dois fenômenos em conjunto (contração e solidificação). Em todas as figuras os resultados são mostrados para a região abaixo do topo do molde de modo a permitir uma melhor visualização da interface entre as fases.

A Figura 87 mostra o início do processo de resfriamento onde pode-se observar a interface VOF ainda ocupando a região do topo da cavidade. Pode-se observar através da escala de cores a cavidade totalmente ocupada por alumínio. O gráfico de temperatura do ponto TC02 mostra ainda temperaturas elevadas significando que este

ponto se apresenta totalmente na fase líquida. Por fim, os vetores velocidade no interior do alumínio mostram as correntes convectivas no interior do metal líquido.

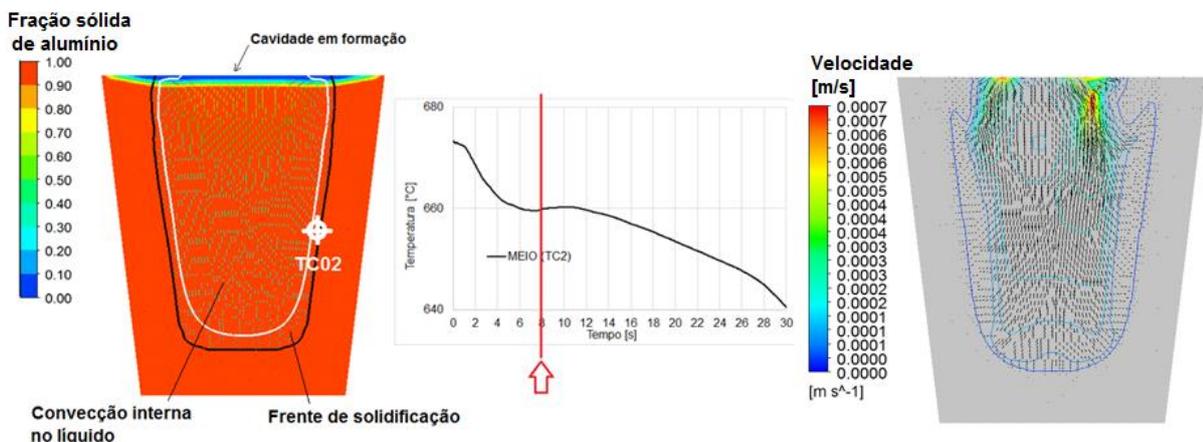
Figura 87 - Início do processo com solidificação próximo à parede



Fonte: o próprio autor (2019)

Na Figura 88 pode-se perceber a porosidade em formação na região superior do corpo. Pode-se observar no interior do líquido (região central da peça) a presença de correntes convectivas que, por sua vez, são inexistentes na região mais externa (próxima a parede) já solidificada. O gráfico da temperatura no ponto TC02 evidencia que a região em torno deste ponto, demarcado entre as linhas branca e preta, que representa a *mushy zone*.

Figura 88 - Ponto TC02 na região de mudança de fase com porosidade em formação

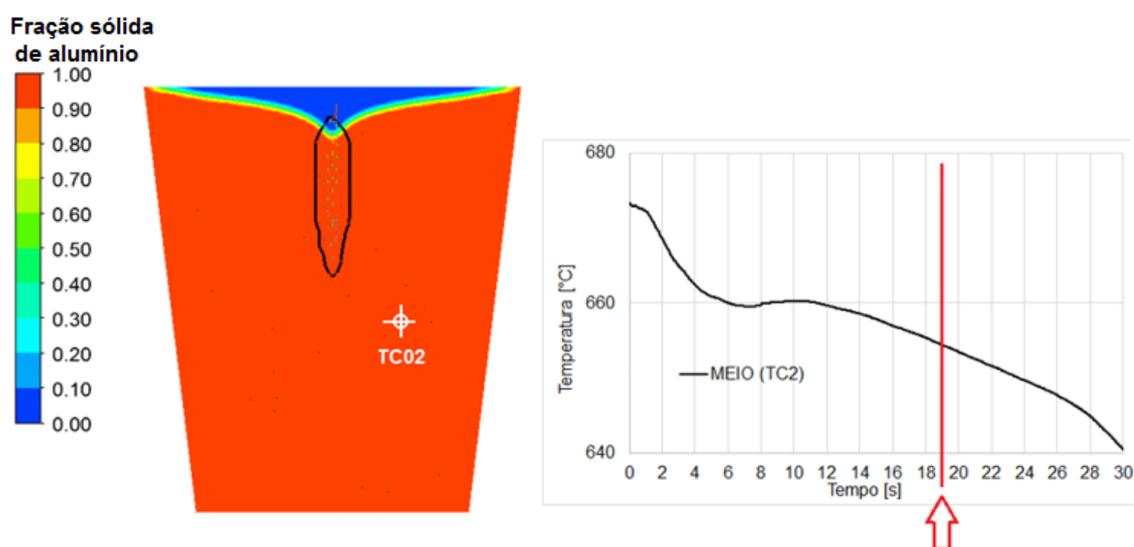


Fonte: o próprio autor (2019)

Na Figura 89 é apresentada a porosidade em fase final de formação. Nota-se nesta figura a ausência quase total das correntes convectivas indicando o final do

processo de solidificação. A fração de alumínio está presente em praticamente toda a peça com exceção da região do topo da peça onde pode-se notar presença do ar, indicando a contração volumétrica do material. A temperatura do ponto TC02 já se apresenta abaixo da temperatura de fusão, indicando a região completamente solidificada.

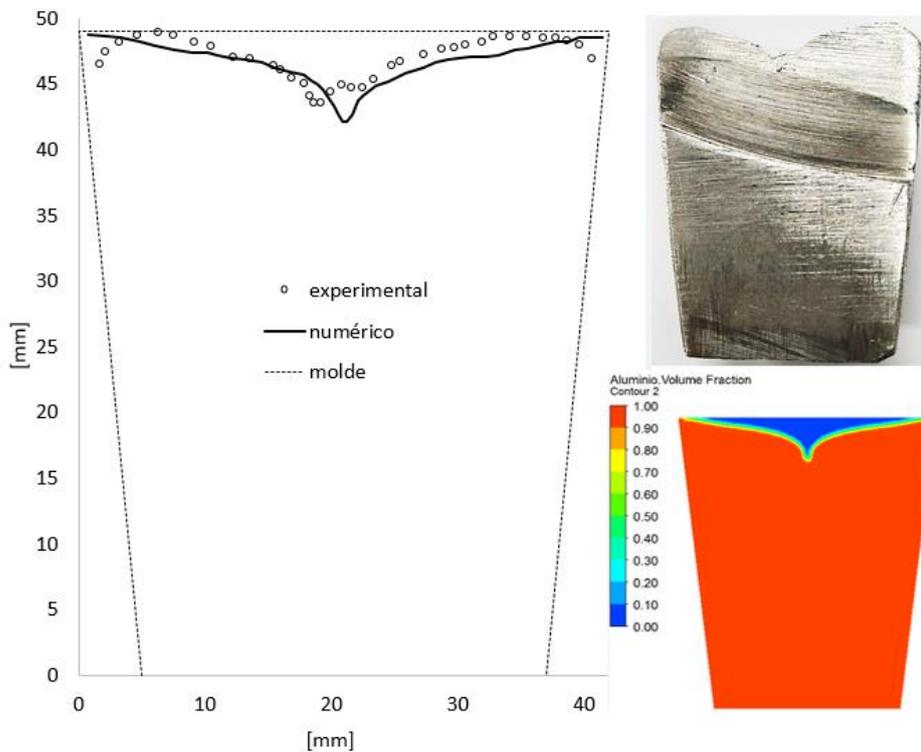
Figura 89 - Última região a solidificar no topo do molde



Fonte: o próprio autor (2019)

Por fim, a Figura 90 mostra uma comparação entre os resultados experimental e numérico para a peça estudada.

Figura 90 - Comparação numérico/experimental da contração da superfície livre da peça



Fonte: o próprio autor (2019)

Um ponto a ser destacado refere-se a presença de uma borda na peça experimental, conforme indicado na Figura 91. O alumínio possui uma característica de formar uma fina camada de óxidos rapidamente quando exposto ao ar. Este fato pode ser constatado também no experimento em dois momentos (ver Figura 92). Portanto entende-se que a formação da borda arredondada na peça se deu em função desta característica. Sugere-se o esclarecimento desta característica por meio de estudos mais aprofundados acerca do assunto.

Figura 91 - Borda na peça experimental



Fonte: o próprio autor (2019)

Figura 92 - Formação do filme de oxido antes do vazamento (à esquerda) e após o vazamento (à direita)



Fonte: o próprio autor (2019)

Ressalta-se que devido a presença de algumas dificuldades inerentes ao processo de fundição, realizaram-se quatro ensaios até a obtenção de um processo mais estável gerando assim dados mais consistentes que puderam ser explorados no presente trabalho.

8 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA PESQUISA FUTURAS

Do ponto de vista de simulação do processo de fundição muito se tem feito com o intuito de incrementar a qualidade das peças produzidas. Atualmente o uso de programas comerciais dedicados à solução de problemas desta natureza tem se mostrado cada vez mais empregados. O presente trabalho abordou uma metodologia onde optou-se pelo uso do programa computacional ANSYS FLUENT® com bons resultados.

Após uma etapa inicial envolvendo estudos teóricos e experimentais que embasaram as análises numéricas realizadas, estende-se que os objetivos propostos foram alcançados.

Conforme abordado no estudo teórico, um componente fundido pode apresentar porosidades sob diferentes formas sendo que, dentre as principais, destacam-se as porosidades por contração volumétrica, chamadas pela literatura por rechupes. Dentro do universo das porosidades por contração volumétrica optou-se por abordar no presente estudo as cavidades abertas. Para tal, desenvolveu-se um experimento que permitisse a formação desse tipo de cavidade havendo pouca, ou quase nenhuma, influência de outros tipos de porosidade. Em função disso escolheu-se uma peça com grande área de superfície livre e exposta ao ar ambiente.

Tendo em vista que o processo de formação de porosidades decorre do processo de fundição, grande parte dos fenômenos envolvendo este processo precisaram ser estudados. Por isso, o trabalho aborda, em sua grande maioria, a análise do processo de transferência de calor e quantidade de movimento envolvendo o fenômeno da mudança de fase. A partir destes estudos acrescentaram-se então as análises envolvendo a simulação multifásica com o emprego do método VOF (*Volume Of Fluid*) para tratamento da interface sólido-líquido que, por sua vez, permitiu a avaliação da contração volumétrica com movimentação da fronteira entre metal e ar ambiente devido mudança de densidade do alumínio empregado.

O enfoque do trabalho se deu na obtenção de comparações numérico-experimentais, portanto, as análises dos modelos numéricos não são tratadas em grande profundidade e são abordadas de acordo com a necessidade de prover informações suficientes para embasar o estudo.

Na fase de estudo do processo de solidificação obtiveram-se alguns parâmetros de forma experimental como a resistência de contato entre peça e molde

e o coeficiente convectivo na sua superfície externa de forma a aumentar a qualidade da análise numérica e reduzir a quantidade de variáveis de entrada bem como a necessidade de calibrações adicionais do modelo numérico.

Como resultados das simulações obtiveram-se alguns parâmetros térmicos da solidificação tais como: velocidade de solidificação, gradiente térmico e taxa de resfriamento, para os quais obtiveram-se bons resultados quando comparados com os dados experimentais. Para a velocidade de solidificação, por exemplo obteve-se um erro de 3,5% na comparação numérico-experimental, o que considerou-se como um resultado bastante animador.

Por fim, o emprego do modelo VOF permitiu a simulação da formação da porosidade (rechupe) na superfície externa da peça com boa aproximação dos resultados. Um desafio adicional se constituiu no processo de simulação multifásica onde pôde-se constatar as instabilidades do método VOF destacadas em literaturas. Tal fato impossibilitou o avanço em análises paramétricas, por exemplo, que poderiam enriquecer ainda mais o trabalho.

Sabendo-se que atualmente a ocorrência de defeitos de fundição por rechupes ainda é um desafio bastante presente em muitas empresas, vê-se uma boa aplicabilidade aos conhecimentos adquiridos com o presente estudo.

Vê-se ainda como possibilidades no avanço da pesquisa o emprego de novas variáveis ao processo tais como inclusão da etapa de preenchimento da cavidade na simulação numérica bem como a avaliação de diferentes condições de contorno ao problema. Além disso, entende-se que a extensão do escopo do trabalho ao estudo de novas geometrias, outros materiais e critérios de detecção de porosidades constituem uma continuação natural ao presente trabalho.

REFERÊNCIAS

A. ABBAS NEJAD A, M.J. MAGHREBI A, H. BASIRAT TABRIZI B., Y. HENG C, A. MHAMDI C, W. Marquardt, **Optimal operation of alloy material in solidification processes with inverse heat transfer**, International Communications in Heat and Mass Transfer, n. 37 , p. 711–716, 2010.

A. D. BRENT , V. R. VOLLER & K. J. REID, **Enthalpy-porosity technique for modeling convection-diffusion phase change: application to the melting of a pure metal**, Numerical Heat Transfer, 13:3, 297-318, 1988.

AKASH PATEL AND LAURENTIU NASTAC, **Mathematical modeling of microshrinkage formation during solidification of a356 castings**, International Journal of Metalcasting, V. 8, Issue 1, 2014

ANUÁRIO ESTATÍSTICO DO SETOR METALÚRGICO BRASILEIRO, 2017, Brasília, **Anais...** Ministério de Minas e Energia, Brasília, 2017.

ALEXIADES, V., HANNOUUN, N., MAI, T.Z., **Tin melting: effect of grid size and scheme on the numerical solution**. In: Proc. 5th Mississippi State Conf. Differential equations and Computational Simulation, p. 55-69, 2003.

BARKHUDAROV M,R., **Computer modelling of solidification of pure metals and alloys**, Tese de Doutorado, The university off Sheffiled, 1995.

BASSO, F. O. **Simulação Numérica do Escoamento Tridimensional de Polímeros Em Canais Com Expansões Assimétricas**. Dissertação de Mestrado, Universidade do Estado de Santa Catarina. Joinville, 2017.

BEECH J., M. BARKHUDAROV, K. CHANG e S. B. CHIN. **Modelling of casting, welding and advanced solidification processes VIII**, ed. B. G. Thomas and C. Beckerman,1998.

BESKOW, Arthur Bortolin. **Estudo da solidificação unidirecional ascendente para obtenção de estruturas colunares grosseiras**. Dissertação de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, 2008

CAMPOS FILHO, MAURÍCIO PRATES DE; DAVIES, GRAEME JOHN; **Solidificação e Fundição de Metais e Suas Ligas**. Editora LTC/EDUSP, 1 Ed., Rio de Janeiro, 1978.

DARCY, H; HAGER, W.H, **Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon**, Henry P.G, Darcy and other pioneer in hydraulic, ASCE, 1856.

FELBERBAUM, M., **Porosity in Aluminum Alloys: Visualization, Characterization, and Modeling**, Tese de Doutorado, Escola Politécnica Federal de Lousanne, Suíça 2010.

FERZIGER, J.H, PERC, M, **Computational Method for Fluid Dynamic**, Springer, 2002.

ANSYS, Inc. 2015. **Introduction to ANSYS Fluent: Lecture 5 - Solver Settings**. Release 13.0, 2010.

GARCIA, A. **Solidificação: Fundamentos e aplicações**. 2. Ed. Campinas: Unicamp, 2007.

GARCIA, A., C.A. SANTOS, J.M.V. QUARESMA, **Determination of transient interfacial heat transfer coefficients in chill mold castings**, Journal of Alloys and Compounds, n. 319, p.174 –186, 2001

GARGIONI, G.T., **Análise numérica da aplicação de promotores de turbulência triangulares na intensificação da convecção forçada em canais planos**, Dissertação de Mestrado, Universidade do Estado de Santa Catarina. Joinville, 2017.

HENZEL J. G. *and* KEVERIAN J., **The Theory and Application of Digital Computer in predicting Solidification Patterns**, Journal of Metals, v. 17, 1965.

INÁCIO, G.R., **Análise numérica do escoamento de fluidos viscoplásticos em canais planos com bifurcação tipo t**, Dissertação de Mestrado, Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, 2018.

JABBARI M., ILKHCHY A. Fardi , DAVAM P. I., **Effect of pressure on heat transfer coefficient at the metal/mold interface of a356 Aluminum alloy**, International communications in heat and mass transfer n. 39, p.705–712, 2012

IMAFUKU I. AND K. CHIJIWA. **A mathematical model for shrinkage cavity prediction in steel castings**. Trans. Am. Foundrymen´s Soc. 91, p. 527-540, 1983.

LEITNER M., LEITNER T., SCHMON A., AZIZ K., and POTTLACHER G., **Thermophysical Properties of Liquid Aluminum**, Journal of Metallurgical and Materials Transactions A, 2017.

LI T., TAO W., WANG Z., LIU X. and HOU J. **Numerical Simulation on the Transient Temperature Field of Anode Rodding in Aluminium Reduction Cells**, Journal of MDPI - Metals 2018, n.8, p. 1026, 2018.

MALISKA, R.C. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. [S.l.:s.n.], 2004.

REITZLE M., KIEERROTH C., GARCKE H., WEIGAND, B., **Volume-of-Fluid Method for Three-Dimensional Hexagonal Solidification Processes**, Journal of Computational Physics, 2016.

NANDAKUMAR, V. **Process and Tool Design for the High Integrity Die Casting of Aluminum and Magnesium Alloys**, Trabalho de graduação, The Ohio State University, 2014.

NEJAD, A., MAGHREBI, M., TABRIZI, H., HENG, Y., MHAMDI, A. e MARQUARDT, W. **Optimal operation of alloy material in solidification processes with inverse heat transfer**. International Communications in Heat and Mass Transfer, n. 37, p.711 – 716, 2010.

NIYAMA E., UCHIDA T., MORIKAWA M. e SAITO S.: **A method of shrinkage prediction and its application to steel casting practice**, International. Foundry Congress n. 49, Paper 10, 1982

ODONE, M.W.N, TOLEDO, E., BARRA, L.P, DA SILVA, C.E., **Um estudo numérico na solução de problemas de mudança de fase**, Tese mestrado, Universidade Federal de Juiz de Fora, 2014.

PATANKAR, S.V.;SPALDING, D.B. **A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows**. International Journal of Heat and Mass Transfer, Elsevier, v.15, n.10, p.1787-1806, 1972.

WILE, L. E., STRAUSBAUGH, K., ARCHIBALD, J. J., SMITH, R. L., PIWONKA, T.S. **Metals Handbook**, ed. 9, v.15, ASM International, p 240 – 241, 2010

PONNAMBALAM Rameshwaran, NADEN Pamela, A.M.E Catherine. RAMI Malki Wilson, SHUKLA, Deepak R., SHIONO Koji, **Inter-comparison and validation of computational fluid dynamics codes in two-stage meandering channel flows**, Applied Mathematical Modelling v 37, 8652–8672, 2013

REIS Jr, L.A. **Escoamento de Materiais Viscoplasticos Através de uma Expansão-Contração Abrupta**. Dissertação de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, 2003.

REZENDE, R.V.D.P. **Modelagem matemática e desenvolvimento de metodologia computacional para a simulação numérica do escoamento bifásico de ar e ferro-gusa em canal de corrida de auto-forno**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal Santa Catarina. Joinville, 2008.

SANTOS, REZENDE GOMES dos. **Transformações de fases em Materiais metálicos**. São Paulo, Unicamp, 2006.

SANTOS C. A.; QUARESMA J. M. V.; GARCIA A.; **Determination of transient interfacial heat transfer coefficients in chill mold casting**, Journal of Alloys and Compounds, v. 319, pp. 174-186, 2001.

SANTOS, G. A., NETO, C. M., OSÓRIO, W. R., Garcia, A., **Design of mechanical properties of a Zn27Al alloy based on microstructure dendritic array spacing**, Materials and Design, v. 28, pp. 2425-2430, 2007

SANTHI, Samavedam, **Calculation of Shrinkage of Sand Cast Aluminium Alloys**, International Journal of Applied Engineering Research, v. 13, n. 11 p. 8889-8893, 2018

SATA A,V. **Shrinkage Porosity Prediction Using Casting Simulation**, Tese de mestrado, Instituto Indiano de Tecnologia de Bombay, India, 2010.

STEFANESCU D.M. **Computer simulation of shrinkage related defects in metal castings – a review**, International Journal of Cast Metals Research Vol. 18 No. 3, p. 129, 2005

RAMESHWARAN P., NADEN P., WILSON A.M.E. CATHERINE., MALKI R, SHUKLA R. D., SHIONO K. **Inter-comparison and validation of computational fluid dynamics codes in two-stage meandering channel flows**, International Journal of Applied Mathematical Modelling, n 37 , p. 8652–8672, 2013

REIS, A., Z. A. XU, R. V. TOL, Y. HOUBAERT, J. F. DUARTE, A. D. SANTOS and A. B. MAGALHÃES, **Model for prediction of shrinkage defects in long and short freezing range materials**, International Journal of Cast Metals Research, v 20, N. 3, p. 171, 2007

ROCHA. O.F.L., **Análise teórico-experimental da transição celular/dentrítica e da evolução da morfologia dentrítica na solidificação unidirecional em condições**

de fluxo de calor transitório, Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, 2003.

TIMOTHY L. DONOHUE AND DR. HELMUT F. FRYE, **Characterization and Correction of Casting Defects**, Tech Form - Advanced Casting Technology, L.L.C. 1999.

TOLEDO, R, C, **Estudo da solidificação de ligas metálicas eutéticas em ambiente de microgravidade**, Tese de Doutorado, Instituto de Pesquisas Espaciais (INPE), 2013.

TROVANT M and ARGYROPOULOS, S. A. TAVROS A. ARGYROPOULOS, **Mathematical modeling and experimental measurements of shrinkage in the casting of metals**. Canadian Metallurgical Quarterly, v. 35, No.1, p. 75-84, 1996.

VERMA A, KUMAR S, GRANT PS, O'REILLY KAQ. **Influence of cooling rate on the Fe intermetallic formation in an AA6063 Al alloy**. Journal of Alloys and Compounds. n. 555, p. 274-282, 2013.

VOLLER, V.R. **Fast implicit finite-difference method for the analysis of phase change problems**. Numerical Heat transfer: Part B, Oxford, 1990.

VOLLER, V.R., PRAKASH, C. **A fixed grid numerical modelling methodology for convections-diffusion mushy region phase-change problems**, international Journal of Heat and Mass Transfer, 1987.

Y.W. LEE, E. CHANG, and C.F. CHIEU, **Modeling of Feeding Behavior of Solidifying Al-7Si-0.3Mg Alloy Plate Casting**, 1990.

ZHANG XIAOHUAN, **Investigation of mold filling and solidification ingot casting process with experiments and open foam Numerical modelling**, Dissertação de mestrado, RWTH AACHEN University, 2016.