



MINISTÉRIO DA DEFESA
EXÉRCITO BRASILEIRO
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA
(Real Academia de Artilharia, Fortificação e Desenho, 1792)
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA E DE AUTOMÓVEIS

Alexandre Ferreira Guedes Olender
Paulo Ng Lui Teixeira

Simulação do Processo de Resfriamento de Granada Carregada com Alto Explosivo

Rio de Janeiro
Outubro de 2017

**Instituto Militar de Engenharia
(Real Academia de Artilharia, Fortificação e Desenho, 1792)**

**Alexandre Ferreira Guedes Olender
Paulo Ng Lui Teixeira**

**Simulação do Processo de Resfriamento de Granada
Carregada com Alto Explosivo**

Projeto de Final de Curso de Graduação em Engenharia Mecânica e de Automóveis do Instituto Militar de Engenharia, como requisito para o título de Engenheiro Mecânico e de Automóveis.

Orientador: Maj Aldélio Bueno Caldeira

Coorientador: Rodrigo Otávio de Castro Guedes

**Rio de Janeiro
Outubro de 2017**

c2017

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

Praça General Tibúrcio, 80 – Praia Vermelha

Rio de Janeiro – RJ CEP: 22290-270

Este exemplar é de propriedade do Instituto Militar de Engenharia, que poderá incluí-lo em base de dados, armazenar em computador, microfilmар ou adotar qualquer forma de arquivamento.

É permitida a menção, reprodução parcial ou integral e a transmissão entre bibliotecas deste trabalho, sem modificação de seu texto, em qualquer meio que esteja ou venha a ser fixado, para pesquisa acadêmica, comentários e citações, desde que sem finalidade comercial e que seja feita a referência bibliográfica completa.

Os conceitos expressos neste trabalho são de responsabilidade do(s) autor(es) e do(s) orientador(es).

620.1 Olender, Alexandre Ferreira Guedes

O45s Simulação do processo de resfriamento de granada carregada com alto explosivo / Alexandre Ferreira Guedes Olender; Paulo Ng Lui Teixeira; orientados por Aldélio Bueno Caldeira; Rodrigo Otávio de Castro Guedes – Rio de Janeiro: Instituto Militar de Engenharia, 2017.

47p. : il.

Projeto de Fim de Curso (PROFIC) – Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 2017.

1. Curso de Engenharia Mecânica e de Automóveis – Projeto de Fim de Curso. 2. Explosivos. I. Teixeira, Paulo Ng Lui. II. Caldeira, Aldélio Bueno. III. Guedes, Rodrigo Otávio de Castro. IV. Título. V. Instituto Militar de Engenharia.

Instituto Militar de Engenharia

**Alexandre Ferreira Guedes Olender
Paulo Ng Lui Teixeira**

**Simulação do Processo de Resfriamento de Granada
Carregada com Alto Explosivo**

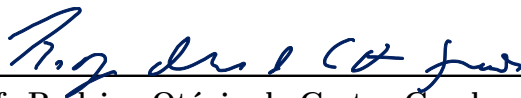
Projeto de Final de Curso de Graduação em Engenharia Mecânica e de Automóveis do Instituto Militar de Engenharia, como requisito para o título de Engenheiro Mecânico e de Automóveis.

Orientador: Maj Aldélio Bueno Caldeira

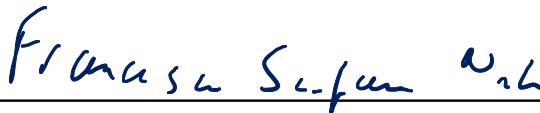
Aprovado em 5 de Outubro de 2017 pela seguinte Banca Examinadora:



Maj Aldélio Bueno Caldeira - D.Sc
Instituto Militar de Engenharia
Orientador



Prof. Rodrigo Otávio de Castro Guedes - Ph.D
Instituto Militar de Engenharia
Coorientador



Prof. Francesco Scofano Neto - D.Sc
Instituto Militar de Engenharia

**Rio de Janeiro
Outubro de 2017**

Resumo

Modelos matemáticos buscam descrever o fenômeno de solidificação característico do processo de fabricação de explosivos. As simulações numéricas realizadas em cima desses modelos constituem uma alternativa interessante e de baixo custo para compreender a relação entre as condições de resfriamento e defeitos comuns associados ao processo de fabricação como tensões térmicas e porosidade excessiva. O objetivo desse trabalho é realizar uma simulação numérica a fim de prever o perfil de temperatura ao longo do processo de resfriamento de um material explosivo conhecido.

O problema estudado foi o de solidificação bidimensional em coordenadas cilíndricas do explosivo PAX/AFX composto de partículas de RDX e cera. O fenômeno da solidificação foi modelado utilizando o Método da Entalpia, mas sem levar em consideração os termos convectivos. A solução numérica foi construída com base no Método dos Volumes Finitos (MVF) e empregou-se uma abordagem explícita com volumes inteiros ao longo de todo o domínio.

O programa desenvolvido foi validado para o problema de solidificação bidimensional em coordenadas cartesianas. A posição da frente de solidificação prevista numericamente foi comparada com a solução analítica.

No problema de solidificação bidimensional em coordenadas cilíndricas, o problema foi validado utilizando resultados experimentais. Foram analisados três pontos representativos dentro do domínio. Um ponto mais próximo a base do cilindro, um ponto no interior e um ponto na parede lateral. Os resultados numéricos foram comparados com dados experimentais e com uma solução numérica presente na literatura. As curvas levantadas numericamente para os pontos próximos da base e da parede apresentaram perfil coerente às curvas experimentais. A curva relativa ao ponto no interior do cilindro apresentou um pequeno desvio em relação à curva experimental.

O modelo numérico utilizado, mesmo com suas hipóteses simplificadoras, foi capaz de prever resultados coerentes tanto no problema de validação quanto no problema em estudo.

Palavras-chave: Método dos Volumes Finitos, Explosivos, Solidificação, Resfriamento

Abstract

Mathematical models seek to describe the phenomenon of solidification characteristic of the manufacturing process of explosives. The numerical simulations performed on these models are an interesting and low-cost way to understand the relationship between the cooling conditions and common defects associated to the manufacturing process, such as thermal stresses and excessive porosity. The objective of this work is to perform a numerical simulation capable of predicting the temperature profile during the cooling process of a known explosive material.

The problem studied was the two-dimensional solidification, in cylindrical coordinates, of the PAX / AFX explosive composed of RDX particles and wax. The phenomenon of solidification was modeled using the Enthalpy Method, but without considering the convective terms, only conduction ones. The numerical solution is based on the Finite Volume Method (FVM) and an explicit approach was used with whole volumes throughout the domain.

The developed program was validated for two-dimensional solidification in Cartesian coordinates. The position of the predicted solidification front was compared with the analytical solution and yielded positive results.

In the case of two-dimensional solidification in cylindrical coordinates, the problem was validated using experimental results. Three representative points within the domain were analyzed. A point close to the base of the cylinder, a point in the cylinder's interior and a point in the lateral wall. The numerical results were compared with experimental data and with another numerical solution M3CAST [5]. The numerically obtained curves for the points close to the base and the wall presented a coherent profile to the experimental curves. The curve relative to the point inside the cylinder had a small deviation from the experimental curve.

Despite of its simplifying hypotheses, the numerical model used was able to predict coherent results in both the validation problem and the problem under study.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	10
1.1	Motivação e Objetivos	10
1.2	Estrutura do trabalho	11
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	12
3	MODELAGEM FÍSICA DO PROBLEMA	15
3.1	Caso Experimental	15
3.2	Hipóteses Simplificadoras	15
3.3	Modelo Físico	16
3.4	Propriedades Termofísicas	17
4	MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROBLEMA	18
4.1	Método da Entalpia	18
4.1.1	Problema Bidimensional em Coordenadas Cilíndricas	18
5	SOLUÇÃO NUMÉRICA	20
5.1	Método dos Volumes Finitos	20
5.1.1	Equações Aproximadas	20
5.1.2	Condições de Contorno	22
5.1.3	Resolução do problema	24
6	VERIFICAÇÃO DO CÓDIGO	27
6.1	Solidificação Bidimensional em Coordenadas Cartesianas	27
6.2	Análise de malha bidimensional cilíndrica	29
7	RESULTADOS	32
8	CONCLUSÃO	37
9	ANEXO	38
	REFERÊNCIAS	48

Lista de ilustrações

Figura 1 – Comportamento da entalpia em metais puros e ligas metálicas eutéticas.[6]	13
Figura 2 – Temperatura ao longo do tempo.[2]	14
Figura 3 – Montagem do experimento.[5]	15
Figura 4 – Dimensões do modelo físico utilizado.	16
Figura 5 – Exemplificação da posição da malha utilizada.	16
Figura 6 – Condições de contorno do problema experimental.	17
Figura 7 – Discretização em volumes elementares de um domínio bidimensional.[4]	20
Figura 8 – Temperatura da parede medida experimentalmente em diferentes pontos.[5]	25
Figura 9 – Fluxograma da resolução do sistema.	26
Figura 10 – Problema de solidificação bidimensional em coordenadas cartesianas.[5]	27
Figura 11 – Malha pouco refinada em coordenadas cartesianas.	28
Figura 12 – Malha intermediária em coordenadas cartesianas.	28
Figura 13 – Malha refinada em coordenadas cartesianas.	29
Figura 14 – Comparação dos resultados da temperatura ao longo do tempo no ponto 1, localizado próximo a base e a linha de simetria do cilindro.	30
Figura 15 – Comparação dos resultados da temperatura ao longo do tempo no ponto 2, localizado no interior do cilindro.	31
Figura 16 – Comparação dos resultados da temperatura ao longo do tempo no ponto 3, localizado próximo a lateral do cilindro.	31
Figura 17 – Localização das posições dos termopares dentro do cilindro.	32
Figura 18 – Comparação dos resultados da temperatura ao longo do tempo no ponto 1, localizado próximo a base e a linha de simetria do cilindro.	33
Figura 19 – Comparação dos resultados da temperatura ao longo do tempo no ponto 2, localizado no interior do cilindro.	33
Figura 20 – Comparação dos resultados da temperatura ao longo do tempo no ponto 3, localizado próximo a lateral do cilindro.	34
Figura 21 – Curvas isotérmicas dentro do cilindro em 4 instantes de tempo diferentes.	35
Figura 22 – Condições em que o experimento está submetido.	36

Lista de abreviaturas e siglas

PAX/AFX	classe de explosivos do Picatinny Arsenal
MVF	Método dos Volumes Finitos
TNT	Trinitro Tolueno
RDX	Ciclotrimetileno-trinitramina
T_m	Temperatura de fusão
ρ	Massa específica
k	Condutividade térmica
α	Difusividade térmica
R	Raio do recipiente cilíndrico
L_z	Comprimento do recipiente cilíndrico
ΔH	Calor Latente
c_l	Calor específico na fase líquida
c_s	Calor específico na fase sólida
q_f	Fluxo de calor através da fronteira do volume elementar.
μ	Viscosidade dinâmica
ν	Coefficiente de Poisson
G	Módulo de cisalhamento
E	Módulo de elasticidade
\vec{w}	Vetor deslocamento
β_s	Coefficiente de expansão volumétrica
λ	Coefficiente de Lamé
A_{mushy}	Constante associada a região "mushy"
g	Fração líquida

u	componente na direção x do vetor velocidade
v	componente na direção y do vetor velocidade
T_{∞}	Temperatura no meio livre
σ	"Stress deviator"
$\bar{\sigma}$	"Effective Stress "
p	Pressão
H'	"plastic modulus"
ϵ	constante no valor 0,001
T	Temperatura
Δr	Passo na direção radial
Δz	Passo na direção axial

1 Introdução

1.1 Motivação e Objetivos

Explosivos são utilizados na mineração, na construção civil e em aplicações militares o que torna o seu estudo de grande interesse para a sociedade [5]. Uma classe que se destaca e vem sendo objeto de pesquisa de muitos trabalhos são os explosivos de alta energia que apresentam pequena sensibilidade, como por exemplo os explosivos utilizados no carregamento de granadas. O preparo e o processo de fabricação desses materiais apresentam desafios para os quais a pesquisa busca oferecer soluções.

Entre os processos de fabricação de explosivos, dois métodos bastante populares são a moldagem por pressão e a moldagem por fundição. Esta última é a mais econômica visando produção em larga escala [2] e também tem como vantagem o potencial para automatização. O processo de moldagem por fundição consiste em inserir o explosivo no estado líquido, a uma temperatura superior à temperatura de fusão, no interior da granada. Após o carregamento, a granada é submetida a um processo de resfriamento e o explosivo líquido solidifica.

No caso do trinitro-tolueno (TNT) e alguns outros explosivos plásticos, podem ocorrer problemas indesejados como o excesso de tensões térmicas, não uniformidade da carga explosiva e separação de base. Essas falhas durante o processo de fabricação não só alteram o perfil da explosão como podem também levar a explosão acidental ou prematura em condições dinâmicas. Um dos requisitos de fabricação é que a carga explosiva possa suportar cargas dinâmicas de até 200 MPa sem detonar [3].

Esses problemas decorrentes do processo de fabricação possuem forte relação com as condições de resfriamento às quais a carga explosiva é submetida e o fenômeno da solidificação que ocorre. O controle da temperatura das paredes da granada influencia a porosidade final do produto [3]. A separação de base pode ser evitada caso as condições de contorno resultem em um perfil de temperatura cujo comportamento é estritamente crescente da base ao topo [1].

Portanto, o desenvolvimento de modelos matemáticos e simulações numéricas para processo de moldagem por fundição mostram-se como alternativas interessantes e de baixo custo capazes de auxiliar na otimização do processo produtivo. O objetivo do presente trabalho é realizar uma simulação numérica para avaliar o perfil de temperatura de uma

carga explosiva conhecida durante o processo de resfriamento.

1.2 Estrutura do trabalho

O capítulo 2 apresenta uma breve revisão bibliográfica de problemas de solidificação envolvendo o TNT e outros tipos de explosivos.

O problema estudado o qual é apresentado no capítulo 3. As condições de contorno aplicadas e o material em análise bem como suas propriedades termofísicas. O caso experimental realizada por [5] e que serviu de referência para os resultados encontrados também é descrita.

No capítulo 4 são apresentadas as equações que governam o fenômeno físico e as condições de contorno às quais a carga explosiva foi submetida durante o resfriamento. Foi abordado o Método da Entalpia, por meio do qual são contabilizadas as mudanças nos valores das propriedades termofísicas devido à mudança de fase.

O capítulo 5 traz um fluxograma que sintetiza a rotina realizada no MATLAB. A simulação numérica foi feita com base no Método dos Volumes Finitos (MVF). São desenvolvidas as equações aproximadas para resolução da equação da energia. Há também uma explanação sobre o método de interpolação utilizado a fim de obter as condições de contorno a partir dos dados experimentais presentes em [5].

A etapa de validação do código foi discutida no capítulo 6. O problema utilizado para a validação foi o de solidificação bidimensional em coordenadas cartesianas [5]. Foi feito o estudo de convergência de malha e os resultados numéricos foram comparados com a solução analítica.

No capítulo 7 foram discutidos os resultados da simulação numérica do problema apresentado no capítulo 3. Os resultados consistem de três gráficos associados a três pontos específicos do experimento. Comparou-se a curva experimental, a solução numérica M3CAST [5] e a solução numérica construída a partir das equações aproximadas do capítulo 4.

Conclusões sobre o trabalho e sugestões para futuros estudos foram apresentadas no capítulo 8.

2 Revisão Bibliográfica

No processo de moldagem por fundição os fenômenos de transferência de calor, mudanças de fase, convecção natural e tensões induzidas estão fortemente conectados. Enquanto fenômenos como a convecção natural são bem compreendidos, outros como as tensões térmicas necessitam de mais estudo. O trabalho apresentado por [1] propõe um modelo para prever tensões térmicas induzidas durante a solidificação de um explosivo PAX composto por 83% de partículas RDX e 17% de cera de carnaúba.

A análise térmica foi realizada com base nas equações de conservação de massa, de quantidade de movimento e de energia[1]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho(uv)}{\partial y} \right) &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \\ &+ \rho g_i \beta (T - T_\infty) + \frac{(1-g)^2}{(g^3 + \epsilon)} A_{mushy} u \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v h)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (2.3)$$

O acoplamento da análise térmica com as tensões térmicas induzidas foi feita por meio da equação 2.4.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \frac{\partial \vec{w}}{\partial t} \right) &= \nabla \cdot [\mu (\nabla \vec{w} + \nabla \vec{w}^T)] + \nabla (\lambda \nabla \cdot \vec{w} + (3\lambda + 2\mu) \beta_S T) \\ &- \left\{ \nabla \cdot \left[\frac{\sigma_{ij}^d \sigma_{kl}^d}{\bar{\sigma}^2} \left(\frac{9G^2}{H' + 3G} \right) \nabla \vec{w} \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Onde λ é calculado por:

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad (2.5)$$

O trabalho destaca a importância de modelos matemáticos e simulações numéricas frente aos custos associados aos métodos de difração de raio-x e nêutrons, sugeridos a fim de visualizar as tensões térmicas[1].

Além das tensões térmicas, outro parâmetro alvo de análise em solidificação de explosivos é a porosidade. O uso de condições de contorno inadequadas tem como consequência a formação de vazios que diminuem a qualidade do explosivo final. Em uma análise unidimensional em coordenadas cilíndricas realizado por [3] para o TNT, foi estudada a influência da temperatura da superfície lateral no tempo de solidificação e na porosidade. Também são confrontados o caso em que as condições de resfriamento são controladas e o caso no qual elas não são controladas. Como principais resultados, são destacados a redução da porosidade quando são aplicadas condições de contorno adequadas e o mesmo vale para a temperatura na superfície lateral do cilindro. Temperaturas mais baixas tem como impacto diminuir o tempo total de solidificação, no entanto, o explosivo líquido tem menos tempo para preencher os espaços ocupados pelo ar, resultando em maior porosidade.

A fim de levantar o perfil de temperatura durante o resfriamento é necessário entender o fenômeno físico da solidificação. Uma forma de modelar esse fenômeno é conhecido na literatura como Método da Entalpia, por utilizar uma formulação da equação de conservação de energia com o termo transiente em função da entalpia. Essa modelagem facilita o equacionamento na chamada "mushy zone", região na qual há a mistura de fases líquido/sólido e as propriedades termofísicas variam devido à mudança de fase. O calor latente é computado na forma de entalpia. A entalpia na "mushy zone" pode ser modelada como função da temperatura apenas [6]. Por exemplo, o comportamento em metais puros e ligas metálicas eutéticas é representado pela curva 1.

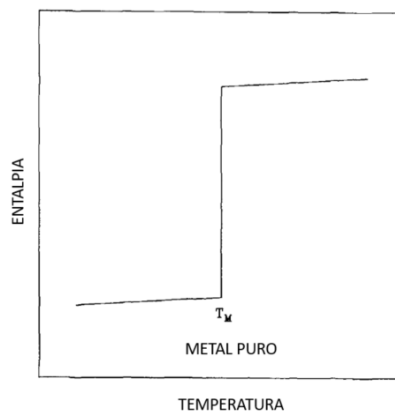


Figura 1 – Comportamento da entalpia em metais puros e ligas metálicas eutéticas.[6]

No trabalho realizado por [6], é apresentado uma equação mais simples na qual os termos convectivos foram desconsiderados.

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (2.6)$$

A solução numérica para problema estudado no capítulo 3 foi construída ao aplicar o Método dos Volumes Finitos na equação 2.6 e admitindo a entalpia como função da temperatura conforme o comportamento mostrado na figura 1.

O problema de solidificação bidimensional em coordenadas cilíndricas abordado por [2] utilizou o Método da Entalpia e incluiu os efeitos dos termos convectivos em sua modelagem matemática. O material resfriado foi o TNT. Foram analisadas as curvas de temperatura de um ponto conhecido e comparados os resultados de duas modelagens: uma de condução pura e uma considerando os termos convectivos. Como resultados, as curvas apresentaram comportamento muito próximo nas primeiras 6 horas, fato atribuído ao efeito dominante da condução na fenômeno da solidificação nesse período, mas passado esse tempo o comportamento das curvas começou a se afastar. O tempo total de solidificação foi diferente para as duas curvas, conforme demonstrado na figura 2. O efeito convectivo resultou em uma distribuição de temperatura mais uniforme e em um tempo total de solidificação maior.

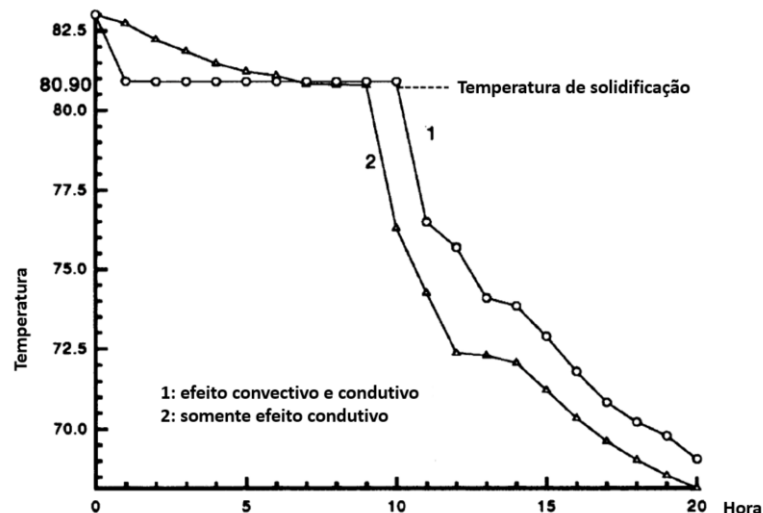


Figura 2 – Temperatura ao longo do tempo.[2]

Em um estudo conduzido também em geometria cilíndrica, mas utilizando como material explosivo PAX/AFX [5], foi empregado o Método da Entalpia conforme a equação 2.6. O experimento está ilustrado na figura 3 e é mais detalhado no capítulo 3. A solução numérica M3CAST, proposta pelo autor, foi comparada com os valores experimentais em três pontos distintos dentro do cilindro. Foi feito uma análise tanto do perfil de temperatura ao longo do processo de resfriamento como um levantamento das tensões térmicas. Uma das principais conclusões foi que a aproximação do fenômeno real como um problema de condução pura foi coerente. As velocidades calculadas foram da ordem de $10E-6$ m/s [5]. Tal fato foi atribuído à elevada viscosidade do explosivo.

3 Modelagem Física do Problema

3.1 Caso Experimental

O problema estudado foi o fenômeno de solidificação bidimensional em coordenadas cilíndricas do alto explosivo PAX/AFX [5]. Sua principal diferença em relação a TNT é a presença de partículas RDX em suspensão. Inicialmente, o explosivo no estado líquido foi despejado em um recipiente cilíndrico com superaquecimento, referente a sua temperatura de fusão, de 3°C . O processo de resfriamento tem duração aproximada de 4,5 horas, sendo que nas duas primeiras horas a superfície superior do cilindro foi submetida a ação de aquecedores enquanto as demais superfícies ficaram submetidas ao resfriamento por convecção natural. Após as duas horas iniciais, os aquecedores foram desligados. Ao longo do recipiente, foram posicionados termopares a fim de medir as temperaturas em três pontos interiores ao cilindro bem como na base, no topo e na superfície lateral. A figura 3 ilustra um diagrama esquemático do experimento.

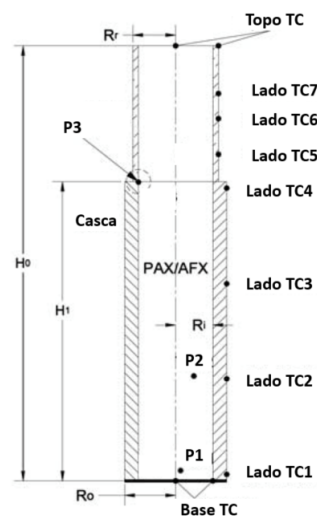


Figura 3 – Montagem do experimento.[5]

3.2 Hipóteses Simplificadoras

Devido às baixas velocidades observadas em [5] foram desconsiderados os termos convectivos da equação de energia. Dessa maneira, o problema foi abordado como condução pura. Outra consideração foi a não inclusão das paredes do recipiente na modelagem matemática. Dada a elevada condutividade térmica do recipiente metálico, sua resistência térmica foi admitida como sendo um valor muito alto e assim, a diferença de temperatura

entre a parede externa e interna do cilindro foi considerada desprezível. Para o caso da análise térmica feita por [5], é importante considerar o recipiente na modelagem.

3.3 Modelo Físico

Para modelar o resfriamento dentro de um recipiente cilíndrico evidenciado na figura 4 utilizou-se o Método de Volumes Finitos.

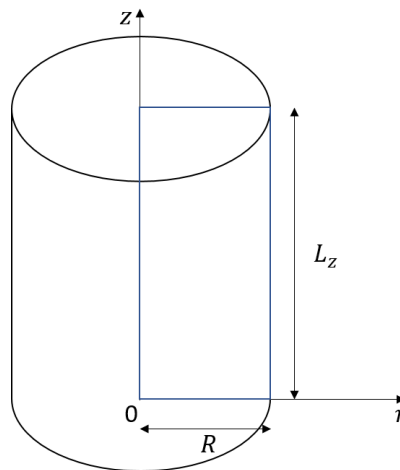


Figura 4 – Dimensões do modelo físico utilizado.

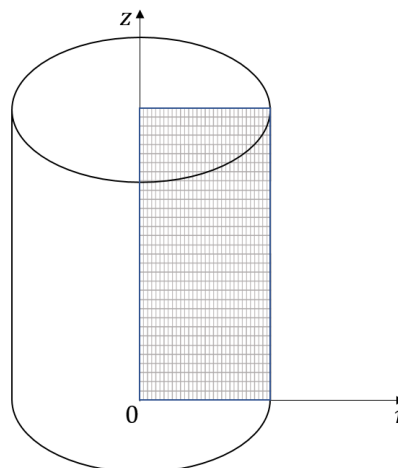


Figura 5 – Exemplificação da posição da malha utilizada.

O cilindro está submetido a funções de temperatura prescrita f_{exp} , em sua lateral, base e topo. Essas funções foram obtidas com base nos dados experimentais da figura 8.

Considerou-se também que a simetria de temperatura em torno do eixo do cilindro.

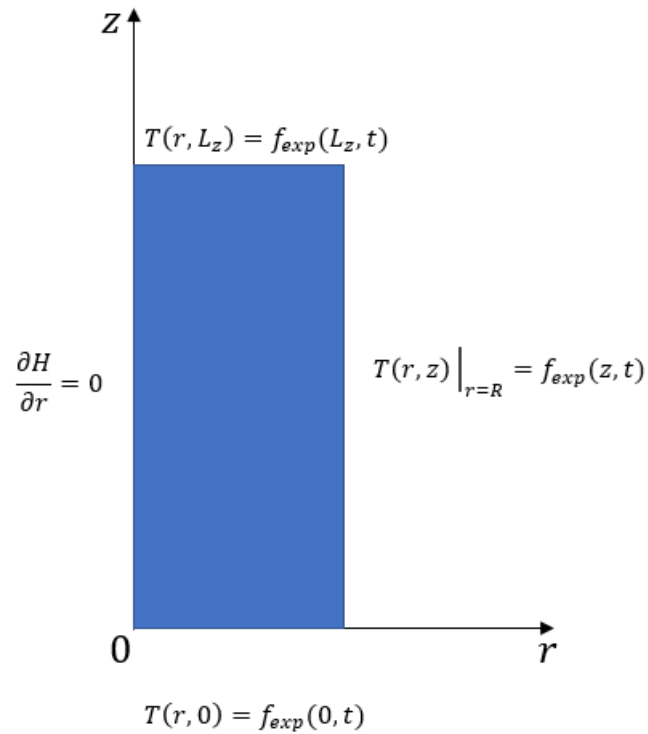


Figura 6 – Condições de contorno do problema experimental.

3.4 Propriedades Termofísicas

Os valores médios para as propriedades termofísicas envolvidas no problema em estudo foram lançadas na tabela 1.

Parâmetro	Símbolo	Valor	Unidade
Temperatura de fusão	T_m	83	$^{\circ}\text{C}$
Massa específica	ρ	1563	kg/m^3
Condutividade Térmica	k	0,266	$\text{W}/\text{m}\cdot\text{K}$
Raio do cilindro	R	0,0183	m
Comprimento do cilindro	L_z	0,172	m
Calor Latente	ΔH	14830	kJ/kg

Tabela 1 – Propriedades termofísicas.[5]

4 Modelagem Matemática do Problema

A simulação numérica do processo de resfriamento do explosivo foi feita utilizando o Método dos Volumes Finitos (MVF). Foram empregadas equações aproximadas obtidas a partir da equação da energia, mas com uma formulação que utiliza a entalpia [6]. Tal formulação permitiu contabilizar o calor latente e as mudanças de propriedades termofísicas associados à mudança de fase.

4.1 Método da Entalpia

O Método da Entalpia foi utilizado para modelar o fenômeno de solidificação desconsiderando os termos convectivos conforme à equação 2.6.

A entalpia para para a fase líquida e sólida foram calculadas da seguinte forma:

$$H = (1 - g) \int_{T_m}^T \rho c_s dT + g \int_{T_m}^T \rho c_l dT + g \rho \Delta H \quad (4.1)$$

A função g representa a fração volumétrica do explosivo na fase líquida e foi computada como:

$$g = \begin{cases} 0 & \text{se } T_p < T_m \\ 0 \leq g \leq 1 & \text{se } T_p = T_m \\ 1 & \text{se } T_p > T_m \end{cases} \quad (4.2)$$

Baseado no comportamento da figura 1, a temperatura em qualquer ponto da "mushy zone" é dada por:

$$T_p = T_m, \text{ se } H_{sol} < H_p < H_{liq} + \rho_{liq} \Delta H \quad (4.3)$$

4.1.1 Problema Bidimensional em Coordenadas Cilíndricas

A equação 2.6 de conservação da energia, em coordenadas cilíndricas, e as condições de contorno impostas, são dadas por:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (4.4)$$

$$T(r, 0, t) = T_{base}, \quad 0 < r < R \text{ e } t > 0 \quad (4.5)$$

$$T(r, L_z, t) = T_{topo}, \quad 0 < r < R \text{ e } t > 0 \quad (4.6)$$

$$T(R, z, t) = T_{parede}, \quad 0 < z < L_z \text{ e } t > 0 \quad (4.7)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad 0 < z < L_z \text{ e } t > 0 \quad (4.8)$$

A geometria do problema já foi mostrada na figura 3. As condições de contorno foram ilustradas na figura 6. As temperaturas na base e no topo são extraídas diretamente da leitura dos termopares posicionados na base e no topo do recipiente. A fim de obter o valor de temperatura para os pontos na lateral do cilindro, foi feita uma interpolação, no espaço e no tempo, a partir das leituras dos termopares numerados de 1 a 7, presentes na figura 8. A condição de contorno expressa pela equação 4.8 é a condição de simetria.

5 Solução Numérica

5.1 Método dos Volumes Finitos

Todo método que, para obter as equações aproximadas, satisfaz a conservação da propriedade em nível de volumes elementares é um método de volumes finitos [4]. No caso do problema em estudo, essa propriedade é a energia.

Ao aplicar o MVF à equação 2.6, foi possível resolvê-la numericamente a partir de um conjunto de equações desacopladas conforme será detalhado na seção seguinte.

5.1.1 Equações Aproximadas

As equações aproximadas podem ser obtidas de duas formas: por meio do balanço da propriedade em questão no volume elementar ou realizando a integração ao longo do volume, no espaço e no tempo, da equação na forma conservativa [4]. Optou-se pela segunda maneira.

A figura 7 ilustra a discretização de um domínio bidimensional em volumes elementares sobre os quais é realizada a integração bem como a nomenclatura usual utilizada.

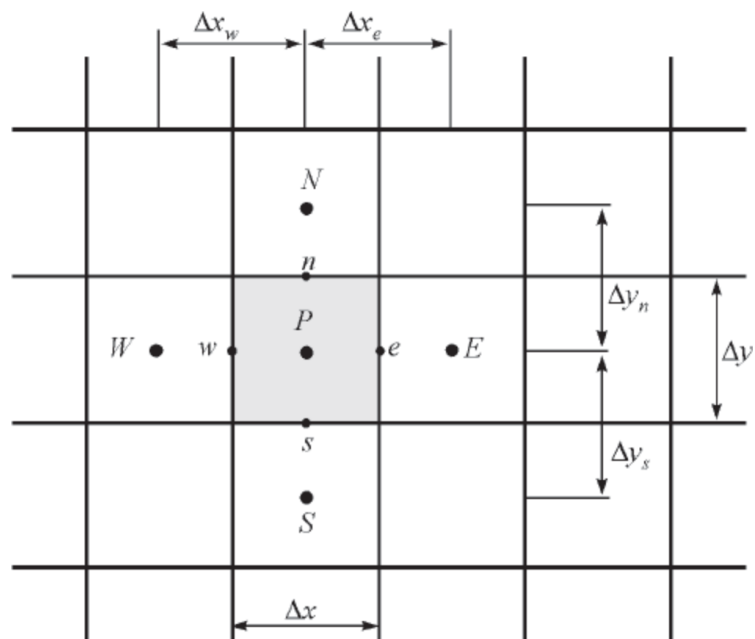


Figura 7 – Discretização em volumes elementares de um domínio bidimensional.[4]

O ponto P é um ponto no centro do volume elementar e no qual todas as propriedades do volume são calculadas. Os pontos N,S,W,E estão no centro dos volumes elementares vizinhos, ao norte, ao sul, ao oeste e ao leste respectivamente, ao volume elementar destacado em cinza. Os símbolos n,s,w,e representam as interfaces norte, sul, oeste e leste, respectivamente, entre o volume central e seus vizinhos.

Ao realizar a integração da equação 2.6, obteve-se:

$$\frac{(H_p - H_p^o)}{\Delta t} = \frac{1}{r_p} \frac{1}{\Delta r^2} \left(k_e r_e \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_e^o - k_w r_w \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_w^o \right) + \frac{1}{\Delta z^2} \left(k_n \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_n^o - k_s \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_s^o \right) \quad (5.1)$$

Admitiu-se que a direção radial coincide com o sentido WE e os volumes são igualmente espaçados de um intervalo Δr . A direção axial coincide com o sentido SN, e os volumes também são igualmente espaçados de um intervalo Δz .

Segundo os dados da tabela 1, o valor para a condutividade térmica foi considerado constante e com o mesmo valor tanto para fase líquida quanto para a fase sólida.

Foi feita uma aproximação de primeira ordem para as derivadas parciais:

$$\frac{\partial T}{\partial r} \Big|_e^o = \frac{T_E^o - T_p^o}{\Delta r} \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} \Big|_w^o = \frac{T_p^o - T_W^o}{\Delta r} \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} \Big|_n^o = \frac{T_N^o - T_p^o}{\Delta z} \quad (5.4)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} \Big|_s^o = \frac{T_p^o - T_S^o}{\Delta z} \quad (5.5)$$

O efeito de curvatura foi representado pelos termos r_e , r_w e r_p que representam o raio das interfaces leste, oeste e do ponto P no centro do volume elementar respectivamente. A relação entre esse raios é dada por:

$$r_e = r_p + \frac{\Delta r}{2} \quad (5.6)$$

$$r_w = r_p - \frac{\Delta r}{2} \quad (5.7)$$

O sobre-índice ‘o’ na equação 4.4 indica que a formulação do tempo utilizada foi a explícita. As temperaturas vizinhas ao volume elementar P são avaliadas no instante anterior. O resultado é um conjunto de equações desacopladas nas quais pode-se isolar

a incógnita da equação que é a entalpia no volume P no instante de tempo seguinte. A formulação explícita é mais simples, pois dispensa a necessidade de se resolver um sistema linear. No entanto, existe uma limitação do passo Δt utilizado que deve ser respeitada para garantir a convergência do método.

Ao substituir as equações de 5.2 a 5.7 em 4.4:

$$H_p = H_p^o - A_P^o T_p^o + A_E T_E + A_W T_W + A_N T_N + A_S T_S \quad (5.8)$$

$$A_E = \frac{(r_p + \Delta r/2)k\Delta t}{r_p \Delta r^2} \quad (5.9)$$

$$A_W = \frac{(r_p - \Delta r/2)k\Delta t}{r_p \Delta r^2} \quad (5.10)$$

$$A_N = \frac{k\Delta t}{\Delta z^2} \quad (5.11)$$

$$A_S = \frac{k\Delta t}{\Delta z^2} \quad (5.12)$$

$$A_P^o = A_E + A_W + A_N + A_S \quad (5.13)$$

A equação 5.8 é válida para os volumes elementares no interior do domínio discretizado. A seguir serão analisados os volumes que estão sujeitos às condições de contorno do problema.

A limitação do passo Δt utilizada está associada a positividade do termo associado à T_p^o .

$$\begin{aligned} 1 - 2\alpha_r - 2\alpha_z &> 0 \\ \alpha_r + \alpha_z &< \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (5.14)$$

Onde,

$$\alpha_r = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta r^2} \quad (5.15)$$

$$\alpha_z = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta z^2} \quad (5.16)$$

5.1.2 Condições de Contorno

As equações aproximadas para os volumes de fronteira devem levar em consideração as condições de contorno do problema. Para tal, existem três possíveis abordagens. Uma delas é a utilização de meios-volumes de modo que o ponto central do volume esteja

sobre a fronteira. Como desvantagens, esse tipo de discretização causa não uniformidade dos volumes e a violação das equações de conservação no caso em que a temperatura de fronteira é conhecida. Uma outra abordagem é a por volumes fictícios que permite utilizar volumes inteiros respeitando os princípios de conservação. Por outro lado, essa estratégia acarreta um aumento no número de incógnitas a serem calculadas. A terceira abordagem consiste em realizar a integração das equações de conservação também para os volumes de fronteira, da mesma forma realizada para os volumes internos, respeitando a condição de contorno existente [4]. Esta última é considerada a mais adequada devido à fácil generalização para diferentes tipos de sistemas coordenados e pelo embasamento físico.

As condições de contorno do problema analisado são dadas pelas equações 4.5 a 4.8 e a equação geral por 5.1. Os termos do lado direito da equação geral representam os fluxos de calor através das interfaces do volume elementar. Existe uma forma de computar o fluxo associado à cada tipo de condição de contorno [4]. Ao substituir esse fluxo, referente às interfaces sujeitas as condições de contorno, obtém-se as equações aproximadas para os volumes de fronteira.

Para um volume submetido a condição de contorno 4.6, de acordo com a orientação e nomenclatura utilizadas, vale que:

$$\frac{(H_p - H_p^o)}{\Delta t} = \frac{1}{r_p} \frac{1}{\Delta r^2} \left(k_e r_e \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_e - k_w r_w \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_w \right) + \frac{1}{\Delta z^2} \left(q_f - k_s \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_s \right) \quad (5.17)$$

O termo q_f corresponde ao fluxo associado à condição de contorno imposta na fronteira norte do volume elementar. Para o caso de temperatura prescrita:

$$q_f = k_f \frac{T_f - T_p}{\Delta x_f} \quad (5.18)$$

Onde o sub-escrito 'f' refere-se às propriedades na fronteira. O termo Δx_f é a distância entre o centro do volume elementar e a fronteira. Como os volumes são igualmente espaçados, essa distância é metade do passo na direção radial, quando o fluxo avaliado for na direção radial, e metade do passo na direção axial, quando o fluxo avaliado for na direção axial.

No total, são oito equações para os volumes de fronteira, uma para cada condição de contorno de 4.5 a 4.8 e quatro associadas aos volumes nos cantos que estão submetidos a duas condições de contorno simultaneamente.

Contorno	Equação Aproximada
Base	$H_p = H_p^o - (A_E + A_W + A_N + 2A_S)T_p^o + A_ET_E^o + A_WT_W^o + A_NT_N^o + 2A_ST_S^o$
Topo	$H_p = H_p^o - (A_E + A_W + 2A_N + A_S)T_p^o + A_ET_E^o + A_WT_W^o + 2A_NT_N^o + A_ST_S^o$
Parede	$H_p = H_p^o - (2A_E + A_W + A_N + A_S)T_p^o + 2A_ET_E^o + A_WT_W^o + A_NT_N^o + A_ST_S^o$
Simetria	$H_p = H_p^o - (A_E + A_N + A_S)T_p^o + A_ET_E^o + A_NT_N^o + A_ST_S^o$
Base e Simetria	$H_p = H_p^o - (A_E + A_N + 2A_S)T_p^o + A_ET_E^o + A_NT_N^o + 2A_ST_S^o$
Topo e Simetria	$H_p = H_p^o - (A_E + 2A_N + A_S)T_p^o + A_ET_E^o + 2A_NT_N^o + A_ST_S^o$
Topo e Parede	$H_p = H_p^o - (2A_E + 2A_N + A_S)T_p^o + 2A_ET_E^o + 2A_NT_N^o + A_ST_S^o$
Base e Parede	$H_p = H_p^o - (2A_E + A_N + 2A_S)T_p^o + 2A_ET_E^o + A_NT_N^o + 2A_ST_S^o$

Tabela 2 – Equações aproximadas para os volumes de fronteira.

5.1.3 Resolução do problema

Primeiramente foram inseridas as variáveis associadas às propriedades termofísicas do problema, presentes na tabela 1 e a condição inicial, que foi estipulada como a temperatura de $T_m + 3^\circ\text{C}$ no corpo inteiro. Essa temperatura é referente à temperatura no início do processo de carregamento e devido à alta viscosidade do fluido, esse valor não corresponde à temperatura inicial real logo após o carregamento. Como não estão disponíveis dados experimentais nos 10 primeiros minutos de modelagem esta foi a temperatura estimada.

Após a inicialização, aplicaram-se as equações presentes na tabela 2, dos volumes nas fronteiras, e a equação 5.8, dos volumes internos, para calcular a entalpia em cada volume da malha. De posse desses dados, e da equação 4.1, calculou-se a distribuição de temperatura dentro do corpo. Este procedimento foi repetido com um incremento Δt após cada iteração até atingir o tempo final de 4 horas. O intervalo de tempo Δt é limitado pela equação 5.14. Esse procedimento está ilustrado no fluxograma presente na figura 9. O código está presente no anexo deste trabalho.

Vale ressaltar que, para aplicar as equações da tabela 2 precisa-se da f_{exp} . A fim de obter a função da temperatura da parede lateral, da base e do topo, primeiramente foi feita uma interpolação linear do valor da temperatura no tempo de acordo com a figura 8. Nos instantes anteriores aos 10 minutos iniciais, interpolou-se os dados utilizando o modo do Piecewise Cubic Hermite Interpolating Polynomial, presente no software MATLAB. Em seguida, foi feita uma interpolação linear ao longo de z .

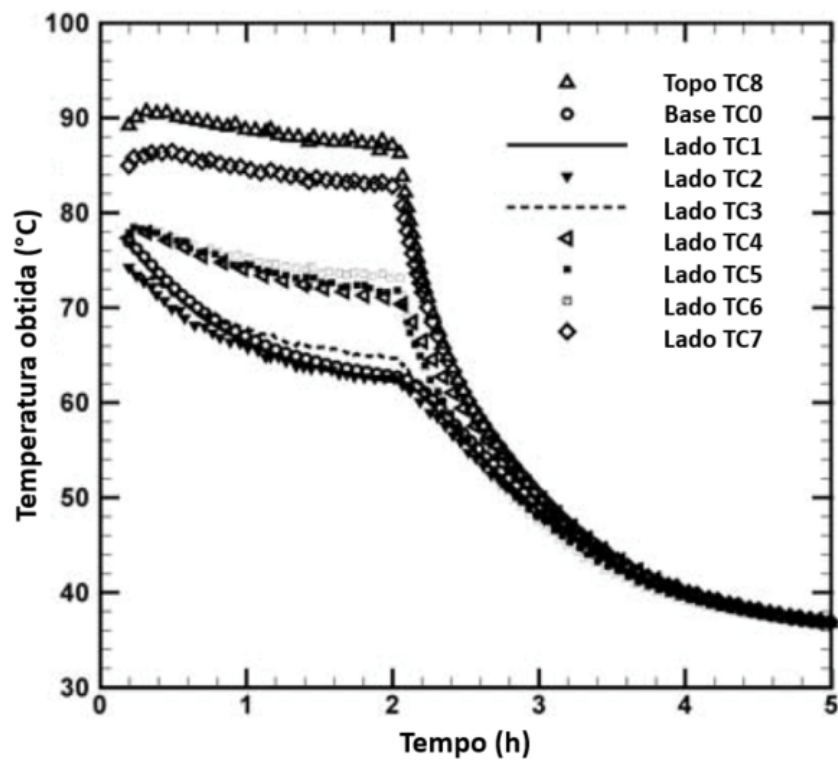


Figura 8 – Temperatura da parede medida experimentalmente em diferentes pontos.[5]

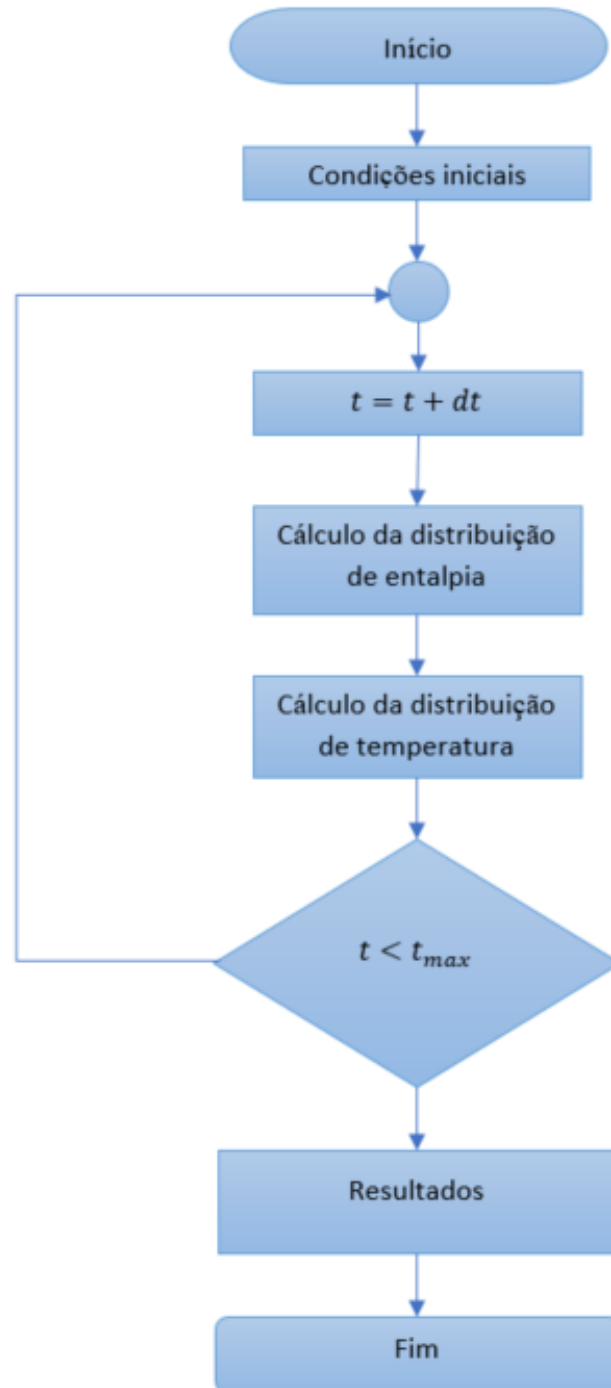


Figura 9 – Fluxograma da resolução do sistema.

6 Verificação do Código

6.1 Solidificação Bidimensional em Coordenadas Cartesianas

A validação do código foi feita para o problema de solidificação bidimensional em coordenadas cartesianas. A figura 10 ilustra a geometria e as condições de contorno do problema. A tabela 3 contém os valores das propriedades termofísicas e temperaturas utilizados.

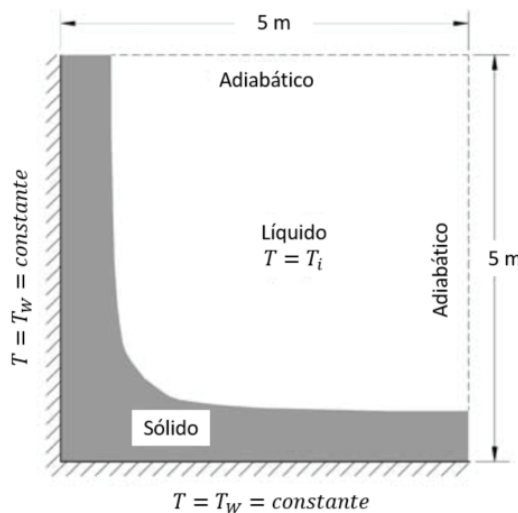


Figura 10 – Problema de solidificação bidimensional em coordenadas cartesianas.[5]

Propriedade	Unidade	Valor
Calor específico c_p	J/kgK	$C_{liq} = C_{sol} = 1$
Condutividade térmica k	W/m K	$k_l = k_s = 1$
Calor latente ΔH	J/kg	100
Temperatura de fusão T_m	°C	500
Temperatura inicial T_i	°C	620
Temperatura da parede T_w	°C	100

Tabela 3 – Propriedades termofísicas do problema de verificação.

Utilizou-se uma malha com 20x20 elementos, em seguida uma com 40x40 elementos e uma com 60x60 elementos. O resultado da simulação numérica foi a posição da frente de solidificação ao longo do tempo. Os dados foram comparados com os resultados analíticos obtidos da literatura [5] conforme as figuras 11, 12 e 13.

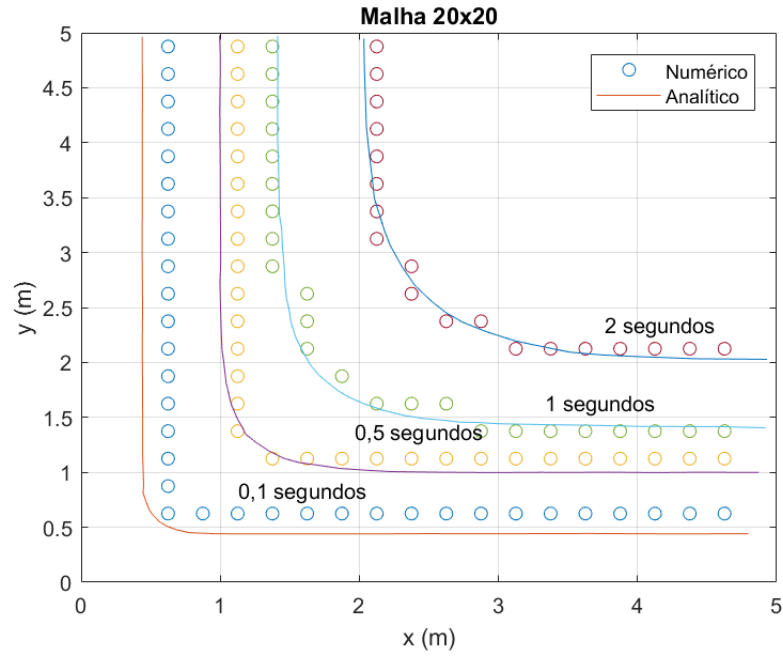


Figura 11 – Malha pouco refinada em coordenadas cartesianas.

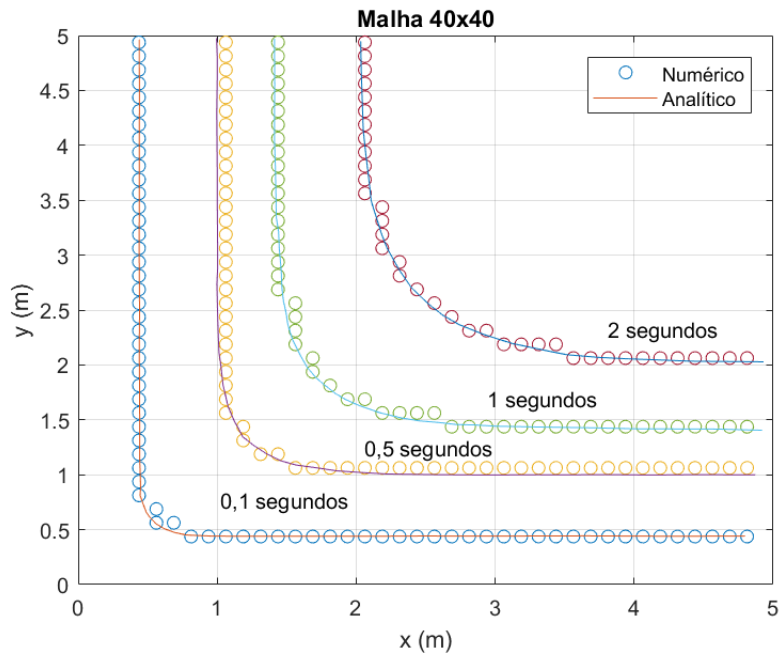


Figura 12 – Malha intermediária em coordenadas cartesianas.

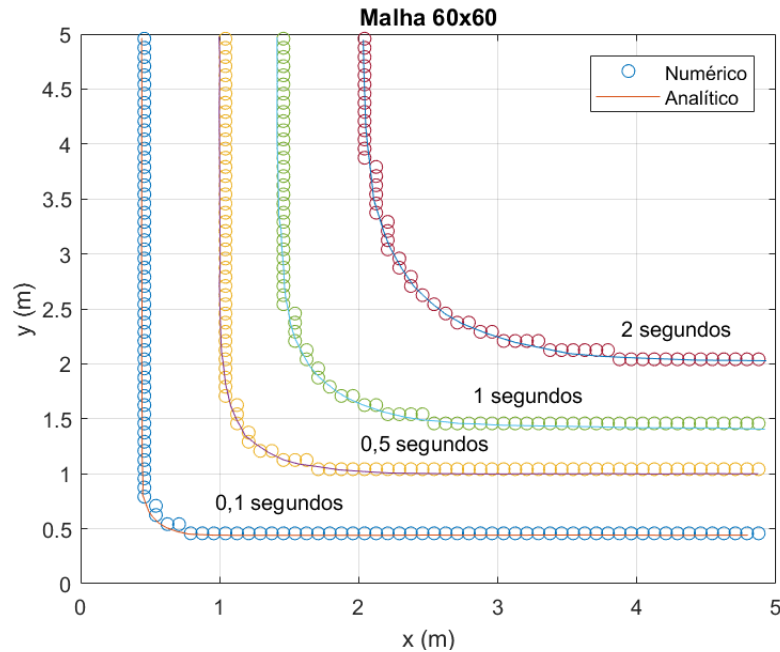


Figura 13 – Malha refinada em coordenadas cartesianas.

As distâncias médias entre as frentes de solidificação analíticas e numéricas foram de 0,12 , 0,02 e 0,02 metros, respectivamente, para as malhas pouco refinada, intermediária e refinada. Como a variação dessa distância entre a malha moderada e a malha grosseira observada foi de 8%, foi verificada a convergência de malha. A região na qual ocorreram os maiores desvios foi a curvilínea. Tal erro foi atribuído à modelagem feita na qual o material se solidifica a temperatura constante. Esse comportamento só é válido para substâncias puras ou misturas eutéticas.

6.2 Análise de malha bidimensional cilíndrica

Para o problema do capítulo 3, montou-se três malhas, pouco refinada, intermediária e refinada, com 15x10, 30x20 e 60x40 elementos respectivamente. Foram consideradas, para fins de análise, as temperaturas internas ao cilindro dos pontos TC#1, TC#2 e TC#3 ao longo do tempo, obtidas experimentalmente, da figura 3. Os erros quadráticos médios das 3 diferentes malhas, referentes às medições dessas 3 posições estão apresentados na tabela 4. Devido à pequena diferença entre os resultados da malha intermediária e refinada, verificou-se a convergência em relação ao tamanho da malha.

Malha	Ponto 1	Ponto 2	Ponto 3
15x10	4,08	2,91	1,26
30x20	3,65	2,98	1,65
60x40	3,47	2,96	1,05

Tabela 4 – Erros quadráticos médios no tempo.

A seguir foram mostrados os resultados para a malha 60x40. Na próxima seção foram feitas as análises e discussões sobre os resultados alcançados.

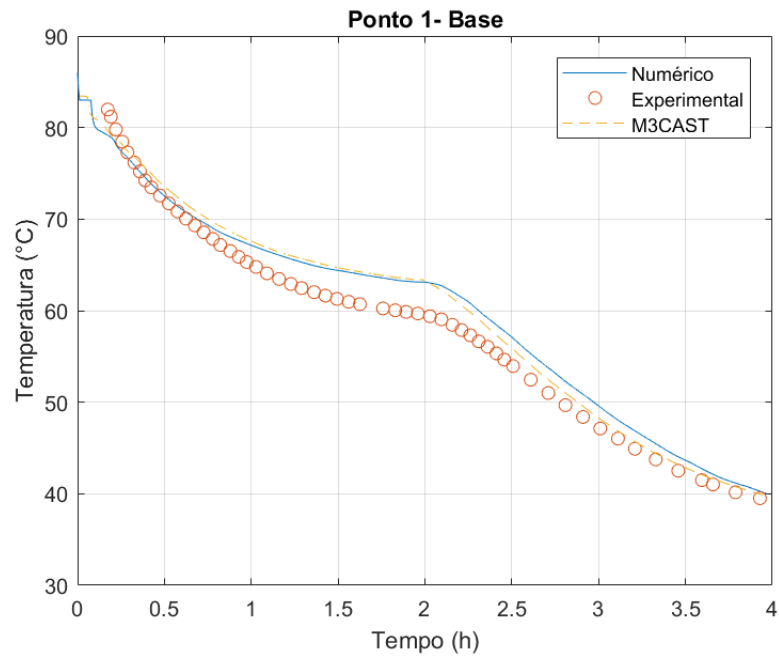


Figura 14 – Comparação dos resultados da temperatura ao longo do tempo no ponto 1, localizado próximo a base e a linha de simetria do cilindro.

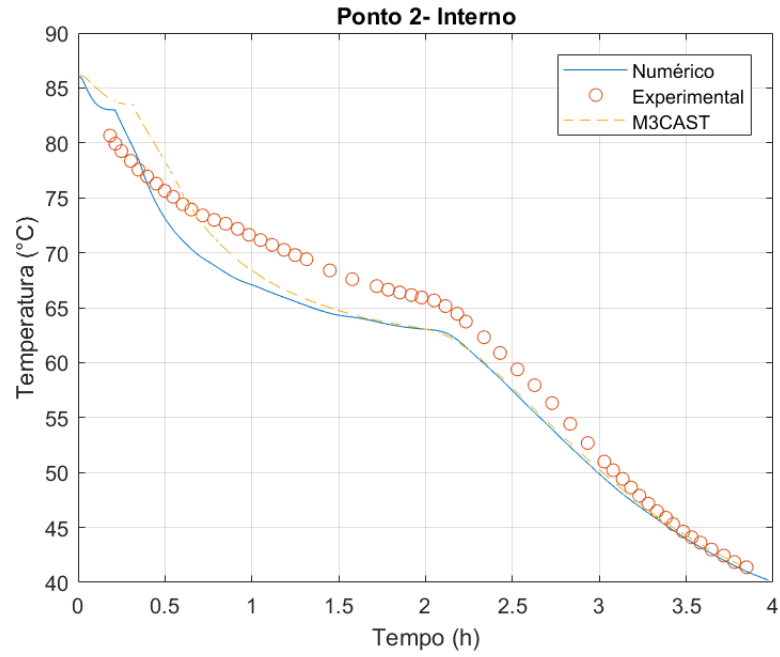


Figura 15 – Comparação dos resultados da temperatura ao longo do tempo no ponto 2, localizado no interior do cilindro.

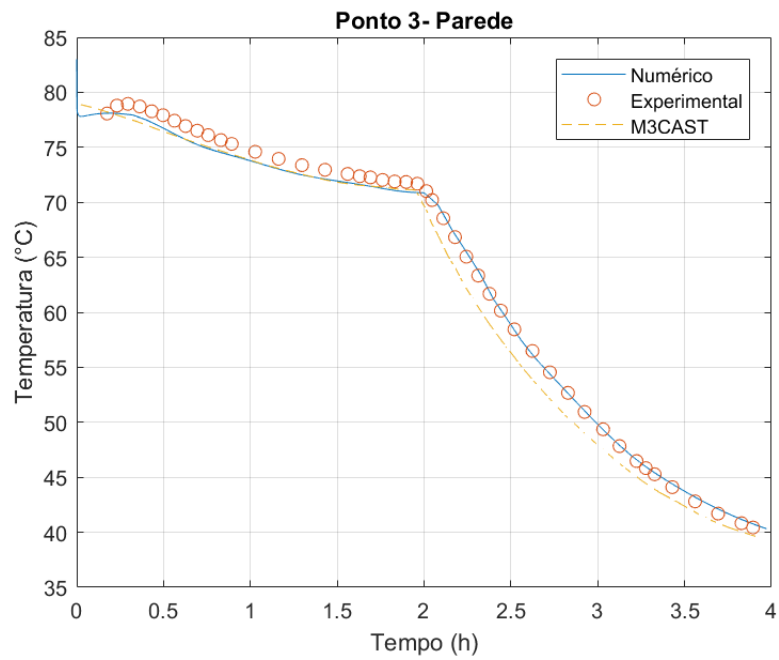


Figura 16 – Comparação dos resultados da temperatura ao longo do tempo no ponto 3, localizado próximo à lateral do cilindro.

7 Resultados

A simulação numérica do problema do capítulo 3 teve como resultado o perfil de temperatura dos três pontos destacados na figura 17. Os resultados foram comparados com as curvas experimentais e também com as curvas numéricas construídas pelo programa M3CAST[5].

Os dados experimentais só estão disponíveis a partir de 10 minutos de resfriamento. Com isso, o perfil de temperatura inicial, utilizado na primeira etapa do fluxograma da figura 9, foi estimada como sendo uniforme e igual a 86°C. A diferença nos instantes iniciais entre o comportamento da solução numérica e o experimental foi atribuída a tal incerteza.

Na tabela 5, os erros quadráticos médios ficaram abaixo de 3,5.

Malha	Ponto 1	Ponto 2	Ponto 3
60x40	3,47	2,96	1,05

Tabela 5 – Erros quadráticos médios no tempo para a malha refinada.

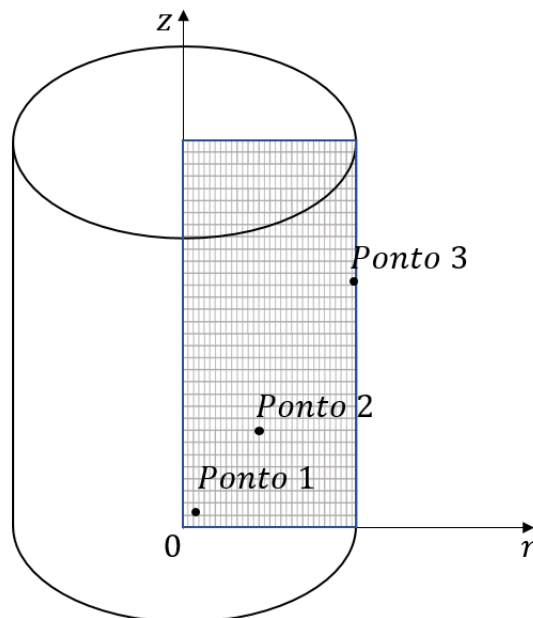


Figura 17 – Localização das posições dos termopares dentro do cilindro.

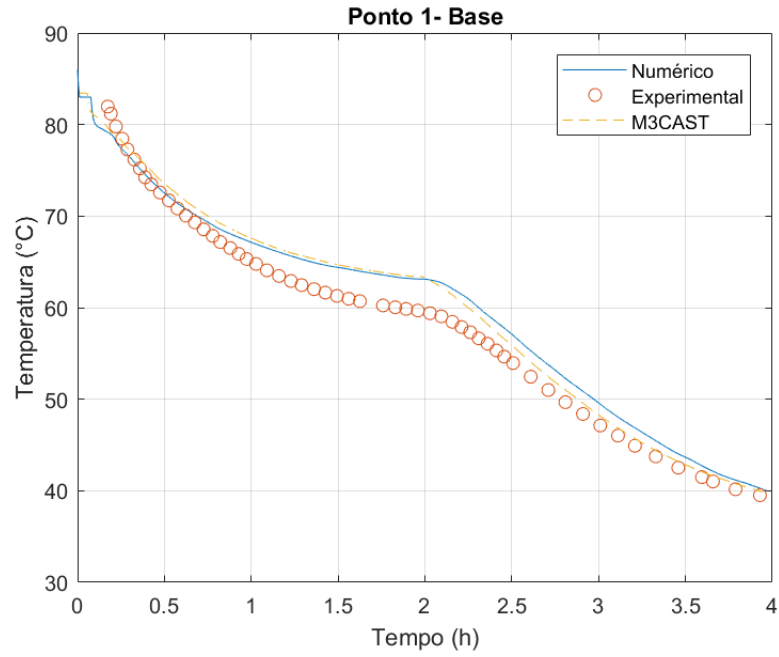


Figura 18 – Comparação dos resultados da temperatura ao longo do tempo no ponto 1, localizado próximo a base e a linha de simetria do cilindro.

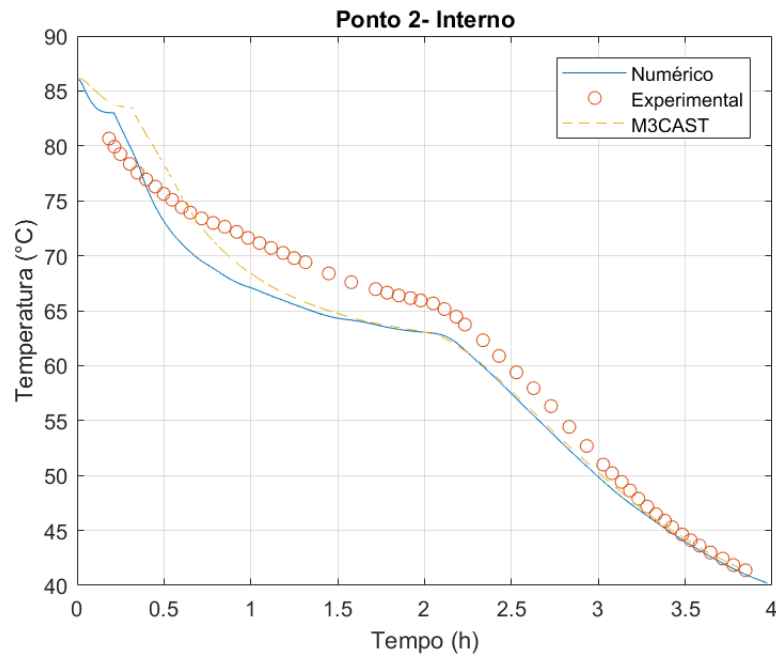


Figura 19 – Comparação dos resultados da temperatura ao longo do tempo no ponto 2, localizado no interior do cilindro.

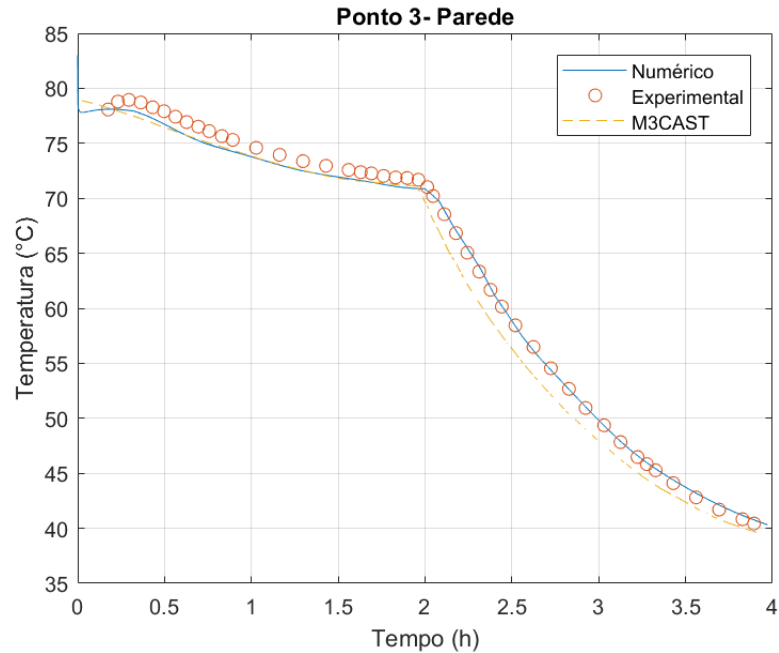


Figura 20 – Comparação dos resultados da temperatura ao longo do tempo no ponto 3, localizado próximo a lateral do cilindro.

Na modelagem relativa ao ponto 1, figura 18, os resultados obtidos ficaram próximos ao experimental com uma temperatura um pouco acima. Essa diferença, porém, se reduz ao decorrer do tempo. Nesse ponto o resultado tem o mesmo comportamento do que o obtido pelo programa M3CAST.

O perfil da curva de temperatura relativa ao ponto TC#3 e a curva experimental também apresentaram boa coincidência. Conclui-se que a aproximação de paredes finas do recipiente foi considerada válida para esse tipo de análise.

Nesses dois pontos, o explosivo solidificou-se mais rapidamente conforme pode ser observado em 21 no instante $t = 300s$. Após mudar de fase, o efeito de transporte predominante é o de condução o que torna a modelagem realizada mais próxima do comportamento real. O efeito de convecção, já pequeno devido a alta viscosidade do fluido, na fase líquida, pode ser completamente desconsiderado na fase sólida.

Observou-se uma diferença maior no caso do ponto TC#2. representado pela figura 19. Uma possível explicação é incerteza da posição desse ponto no interior do cilindro. Na referência, não foram fornecidas as coordenadas deste ponto.

Com auxílio das figuras 18, 19 e 20, foi feita a validação do código. Os resultados mostraram que a maior parte do resfriamento ocorre para temperaturas inferiores à tem-

peratura de solidificação o que justifica a não inclusão dos termos convectivos. Ao analisar a diferença entre o resultado numérico e o experimental obtido dos pontos TC#1, TC#2 e TC#3, observou-se que ela decresce conforme se avança no tempo.

Os resultados obtidos numericamente foram semelhantes aos resultados numéricos do programa M3CAST. Embora também seja uma solução baseada em volumes finitos, o M3CAST inclui em sua modelagem os termos convectivos e não desconsidera a espessura da parede.

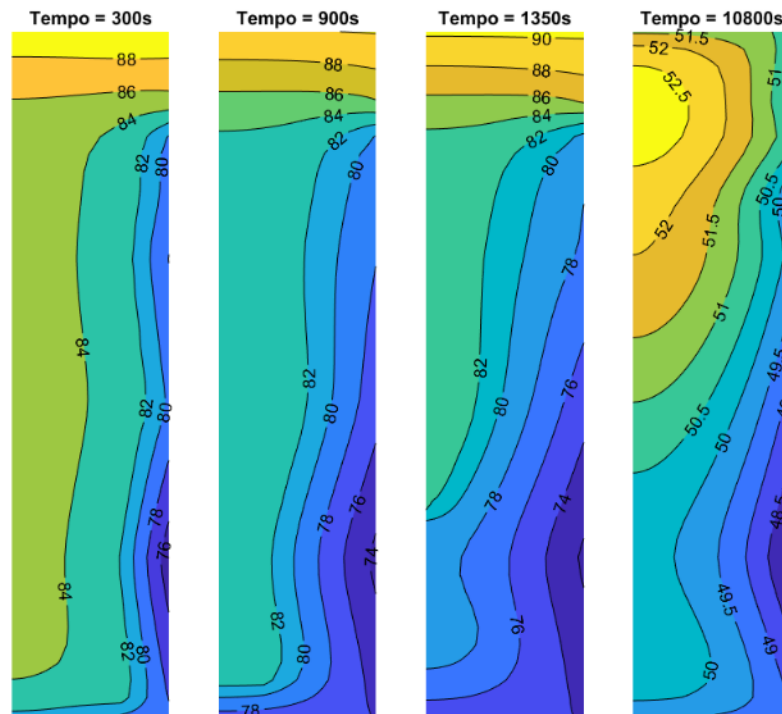


Figura 21 – Curvas isotérmicas dentro do cilindro em 4 instantes de tempo diferentes.

A figura 21 mostra a evolução das linhas isotérmicas durante o resfriamento. O processo de resfriamento e solidificação do material ocorre do lado externo para o interno, conforme evidenciado pela figura. Nos instantes iniciais, a atuação do aquecedor é significativa, causando temperaturas mais elevadas no topo e o gradiente de temperatura ao longo do corpo é maior. No instante mais avançado de 10800 segundos (3 horas), observou-se uma variação de temperatura dentro do cilindro menor. Esse resultado está de acordo com o modelo físico do experimento, que está submetido a troca de calor na lateral.

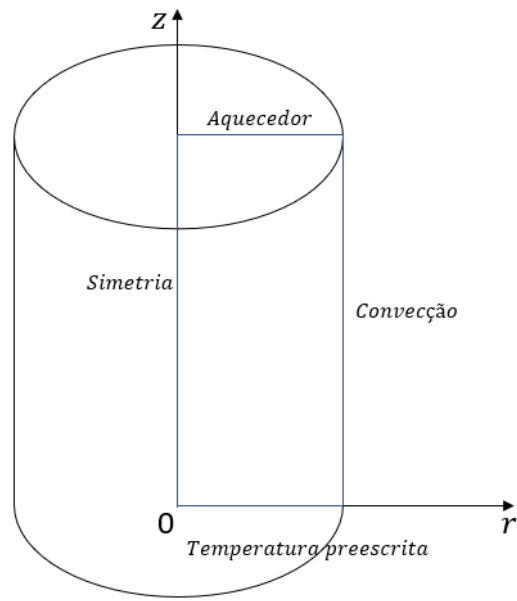


Figura 22 – Condições em que o experimento está submetido.

8 Conclusão

A simulação numérica teve como objetivo modelar o fenômeno de resfriamento da carga de alto explosivo de uma granada. Para tal, feita uma análise utilizando o Método dos Volumes Finitos. A modelagem do fenômeno da solidificação foi feita pelo Método da Entalpia. O código foi primeiramente validado para um caso bidimensional em coordenadas cartesianas de solução analítica conhecida. Foi obtida uma diferença média de 0,02 metros entre as frentes de solidificação previstas analiticamente e numericamente. Esse valor representa uma diferença de 2%.

Em seguida, foi feita a simulação numérica para o problema de solidificação bidimensional em em coordenadas cilíndricas. Foram levantados o perfil de temperatura para três pontos representativos e os resultados foram comparados com dados experimentais. Os valores de erro quadrático médio calculados das curvas de temperatura em função do tempo de 3,47, 2,96, 1,05. Conclui-se que os resultados obtidos na simulação foram coerentes com os resultados experimentais. Também foi feita a comparação com outra solução numérica baseada no Método de Volumes Finitos, o M3CAST. Este possui uma modelagem que inclui o fenômeno de transporte convectivo na equação da energia e considera a influência da espessura das paredes do recipiente cilíndrico. Apesar das diferenças de modelagem, os resultados encontrados foram próximos.

O modelo numérico utilizado, mesmo com suas hipóteses simplificadoras, foi capaz de prever resultados coerentes tanto no problema de validação quanto no problema em estudo.

Como sugestão para estudos futuros na área de solidificação de explosivos, seria interessante a aplicação em um sistema de coordenadas generalizadas. Dessa maneira, poderia se modelar a geometria da granada. Para fins de análise térmica, é necessária a modelagem dos moldes que contém o explosivo líquido.

9 Anexo

Análise transiente do resfriamento de TNT no modelo bidimensional

Criado por Alexandre Olender e Paulo Lui

Contents

- [Inicialização](#)
- [Constantes do problema](#)
- [Importante dados comparativos e experimentais](#)
- [Contantes da malha](#)
- [Constantes temporais](#)
- [Condição inicial](#)
- [Resolvendo o problema](#)
- [Exportando resultados para análise posterior](#)
- [Função que relaciona H com T e H no instante anterior](#)
- [Função que converte H para temperatura](#)
- [Função para importar dados](#)

Inicialização

```
clear;
close all;
clc;
```

Constantes do problema

```
k=0.266; %condutividade térmica [W/(m k)], neste problema ks=kl
pos=1563; %massa específica do sólido [kg/m^3]
pol=1563; %massa específica do líquido [kg/m^3]
cs=1062.2; %calor específico do sólido [J/(kg k)]
cl=1062.2; %calor específico do líquido [J/(kg k)]
Lat=14.83*1000; %entalpia de mudança de fase [J/kg]
Tm=83+273.15; %Temperatura de fusao
Ti=88+273.15; %Temperatura inicial em Kelvin
Tbase=76.1912859719573+273.15; %Temperatura do ambiente em Kelvin
Tinf=37.8+273.15; %Temperatura do ambiente em Kelvin
h=7; %Porque? Qual é o h da fábrica?
```

Importante dados comparativos e experimentais

```
importfile('TCFigBExpM3CAST');
importfile('WallTemp');
importfile('WallTime');
WallTemp=WallTemp+273.15;
```

Contantes da malha

```
nr=90; %Número de divisões radias
nz=60; %Número de divisões da altura do cilindro
Lr=0.0183; %Comprimento radial
```

```
Lz=0.172; %Comprimento da altura
dr=Lr/nr; %Comprimento radial do volume finito
dz=Lz/nz; %Comprimento da altura do volume finito
```

Constantes temporais

```
dt=0.1; %intervalo de tempo entre as iterações
TempoMax=1; %Tempo de duração da simulação em segundos
```

Condição inicial

```
t0=0; %Tempo onde iniciam-se as medidas experimentais
Walltemp0=[76.19, 73.47, 76.88, 78.06, 78.56, 79.19, 86.23, 90.56];
Walltemp0=Walltemp0+273.15;
l=[0 0.0404 0.0779 0.1157 0.1290 0.1432 0.1532 0.172];
T0=zeros(nr,nz); %Matriz inicial de temperatura do corpo
for i=1:nr
    for j=1:nz
        T0(i,j)=Tm+3;
    end
end
for i=1:nr
    for j=1:nz
        if T0(i,j)<Tm
            H0=T0*pos*cs;
        else
            H0=(T0-Tm)*pol*c1+Lat*pol+Tm*pos*cs;
        end
    end
end
end
```

Resolvendo o problema

```
%vetor de variaveis
var=[k pos pol cs c1 Lat Tm Ti Tbase nr nz Lr Lz dr dz dt];

IterMax=floor(TempoMax/dt); %Número máximo de iterações
iter=1; %Contador do número de iterações
Tfinal(:,:,iter)=T0;
T=T0;
H=H0;
erro='n'; %sem erro, para entrar no while loop

while iter<=IterMax && erro=='n'
    time=t0+iter*dt;
    H=andandonotempo(H,T,var,time,WallTime,WallTemp);
    T=h2T(H,var);
    Tfinal(:,:,iter)=T; %Registra todas as temperaturas numa matriz
    iter=iter+1;
    if max(T(:))>=Ti+100 || min(T(:))<=10
        erro='s'; %Para o programa caso aconteça um erro drástico
    end
    if rem(iter,1000)==0
        iter
    end
end
% dif=T-T0;
% T0=T;
```



```

end
erro

tempo=dt*(iter-1); %Tempo em que o corpo foi submetido ao resfriamento (s)
tempodia=tempo/(24*60*60); %Tempo de resfriamento em dias

```

Exportando resultados para análise posterior

```

tv=(t0+dt):dt:(t0+TempoMax);
tv=tv/(60*60);
Tfinal=Tfinal-273.15;
vR=dr/2:dr:Lr;
vL=dz/2:dz:Lz;

%Posição dos pontos experimentais
point1Altura=round(0.004/dz);
point1Raio=round(0.0018/dr);
point2Altura=round(0.0417/dz);
point2Raio=round(0.0068/dr);
point3Altura=round(0.1157/dz);
point3Raio=nr;

for i=1:IterMax
    points(1,i)=Tfinal(point1Raio,point1Altura,i);
    points(2,i)=Tfinal(point2Raio,point2Altura,i);
    points(3,i)=Tfinal(point3Raio,point3Altura,i);
end

```

Função que relaciona H com T e H no instante anterior

```

function H=andandonotempo(H0,T0,var,time,WallTime,WallTemp)
k=var(1);
nr=var(10);
nz=var(11);
dr=var(14);
dz=var(15);
dt=var(16);

R=zeros(1,nr);
for i=1:nr
    R(i)=dr/2+dr*(i-1);
end

%Interpolando as temperaturas da parede para esse tempo
if time<=WallTime(1)
    TC(1)=interp1(WallTime,WallTemp(1,:),time,'pchip');
    TC(2)=interp1(WallTime,WallTemp(2,:),time,'pchip');
    TC(3)=interp1(WallTime,WallTemp(3,:),time,'pchip');
    TC(4)=interp1(WallTime,WallTemp(4,:),time,'pchip');
    TC(5)=interp1(WallTime,WallTemp(5,:),time,'pchip');
    TC(6)=interp1(WallTime,WallTemp(6,:),time,'pchip');
    TC(7)=interp1(WallTime,WallTemp(7,:),time,'pchip');
    TC(8)=interp1(WallTime,WallTemp(8,:),time,'pchip');
else
    TC(1)=interp1(WallTime,WallTemp(1,:),time);
    TC(2)=interp1(WallTime,WallTemp(2,:),time);
    TC(3)=interp1(WallTime,WallTemp(3,:),time);
    TC(4)=interp1(WallTime,WallTemp(4,:),time);

```

```

TC(5)=interp1(WallTime,WallTemp(5,:),time);
TC(6)=interp1(WallTime,WallTemp(6,:),time);
TC(7)=interp1(WallTime,WallTemp(7,:),time);
TC(8)=interp1(WallTime,WallTemp(8,:),time);
end
l=[0 0.0404 0.0779 0.1157 0.1290 0.1432 0.1532 0.172];

fr=k*dt/dr^2;
fz=k*dt/dz^2;
H=H0;

for i=1:nr
    for j=1:nz
        %Caso geral
        if (i~=1 && j~=1 && i~=nr && j~=nz)
            H(i,j)=H0(i,j)+(-2*fr-2*fz)*T0(i,j)...
                +fr*((R(i)-dr/2)/R(i))*T0(i-1,j)...
                +fr*((R(i)+dr/2)/R(i))*T0(i+1,j)...
                +fz*T0(i,j-1)...
                +fz*T0(i,j+1);

        end
        %Condição de contorno da simetria
        if i==1 && j~=1 && i~=nr && j~=nz
            H(i,j)=H0(i,j)+(-fr*((R(i)+dr/2)/R(i))-2*fz)*T0(i,j)...
                +fz*T0(i,j-1)...
                +fz*T0(i,j+1)...
                +fr*((R(i)+dr/2)/R(i))*T0(i+1,j);

        end
        %Condição de contorno da lateral do quadrado
        if i==nr && i~=1 && j~=1 && j~=nz
            H(i,j)=H0(i,j)+(-1*fr*((R(i)-dr/2)/R(i))-2*fr*((R(i)+dr/2)/R(i))-2*fz)*T0(i,j)...
                +fz*T0(i,j-1)...
                +fz*T0(i,j+1)...
                +fr*((R(i)-dr/2)/R(i))*T0(i-1,j)...
                +2*fr*((R(i)+dr/2)/R(i))*interp1(l, TC, (dz/2+(j-1)*dz));

        end
        %Condição de contorno da parte da base
        if j==1 && i~=1 && i~=nr && j~=nz
            H(i,j)=H0(i,j)+(-2*fr-3*fz)*T0(i,j)...
                +fr*((R(i)-dr/2)/R(i))*T0(i-1,j)...
                +fr*((R(i)+dr/2)/R(i))*T0(i+1,j)...
                +fz*T0(i,j+1)...
                +2*fz*TC(1);

        end
        %Condição de contorno no topo do quadrado
        if j==nz && i~=1 && j~=1 && i~=nr
            H(i,j)=H0(i,j)+(-2*fr-3*fz)*T0(i,j)...
                +fr*((R(i)-dr/2)/R(i))*T0(i-1,j)...
                +fr*((R(i)+dr/2)/R(i))*T0(i+1,j)...
                +fz*T0(i,j-1)...
                +2*fz*TC(8);

        end
        %Condições de contorno dos cantos
        %Canto inferior esquerdo (simetria e base)
        if i==1 && j==1
            H(i,j)=H0(i,j)+(-1*fr*((R(i)+dr/2)/R(i))-3*fz)*T0(i,j)...
                +fr*((R(i)+dr/2)/R(i))*T0(i+1,j)...
                +fz*T0(i,j+1)...
                +2*fz*TC(1);

        end
    end
end

```

```

%Canto superior esquerdo (simetria e topo)
if i==1 && j==nz
    H(i,j)=H0(i,j)+(-1*fr*((R(i)+dr/2)/R(i))-3*fz)*T0(i,j)...
        +fr*((R(i)+dr/2)/R(i))*T0(i+1,j)...
        +fz*T0(i,j-1)...
        +2*fz*TC(8);
end
%Canto inferior direito (base e lateral)
if i==nr && j==1
    H(i,j)=H0(i,j)+(-1*fr*((R(i)-dr/2)/R(i))-2*fr*((R(i)+dr/2)/R(i))-3*fz)*T0(i,j)
...
        +fr*((R(i)-dr/2)/R(i))*T0(i-1,j)...
        +fz*T0(i,j+1)...
        +2*fz*TC(1)...
        +2*fr*((R(i)+dr/2)/R(i))*interp1(1, TC, (dz/2+(j-1)*dz));
end
%Canto superior direito (topo e lateral)
if i==nr && j==nz
    H(i,j)=H0(i,j)+(-1*fr*((R(i)-dr/2)/R(i))-2*fr*((R(i)+dr/2)/R(i))-3*fz)*T0(i,j)
)...
        +fr*((R(i)-dr/2)/R(i))*T0(i-1,j)...
        +fz*T0(i,j-1)...
        +2*fz*TC(8)...
        +2*fr*((R(i)+dr/2)/R(i))*interp1(1, TC, (dz/2+(j-1)*dz));
end
end
end
end
end

```

Função que converte H para temperatura

```

function T=h2T(H,var)
pos=var(2);
pol=var(3);
cs=var(4);
cl=var(5);
Lat=var(6);
Tm=var(7);
nr=var(10);
nz=var(11);

for contaux1=1:nr          %Converte H para temperatura
for contaux2=1:nz
    if H(contaux1,contaux2)<=Tm*pos*cs    %Sólido
        cp=cs;
        po=pos;
        T(contaux1,contaux2)=H(contaux1,contaux2)/(po*cp);
    end
    if H(contaux1,contaux2)>Tm*pos*cs...
        && H(contaux1,contaux2)<=Lat*pol+Tm*pos*cs    %Transição
        T(contaux1,contaux2)=Tm;
    end
    if H(contaux1,contaux2)>Lat*pol+Tm*pos*cs    %Líquido
        cp=cl;
        po=pol;
        T(contaux1,contaux2)=H(contaux1,contaux2)/(po*cp)...
            -Lat/cp-Tm*pos*cs/(po*cp)+Tm;
    end
end
end
end

```

```
end  
end
```

```
erro =  
  
    'n'
```

Função para importar dados

```
function importfile(fileToRead1)  
%IMPORTFILE(FILETOREAD1)  
% Imports data from the specified file  
% FILETOREAD1: file to read  
  
% Auto-generated by MATLAB on 28-Jul-2017 10:20:32  
  
% Import the file  
newData1 = load('-mat', fileToRead1);  
  
% Create new variables in the base workspace from those fields.  
vars = fieldnames(newData1);  
for i = 1:length(vars)  
    assignin('base', vars{i}, newData1.(vars{i}));  
end  
  
end
```

Análise dos dados para o modelo bidimensional

Criado por Alexandre Olender e Paulo Lui

Contents

- [Inicialização](#)
- [Importação de dados](#)
- [Variáveis auxiliares](#)
- [Medindo a temperatura nos 3 pontos para comparação experimental](#)
- [Gerando os gráficos das temperaturas ao longo do tempo](#)
- [Gerando os gráficos das distribuições de temperatura ao longo do espaço](#)
- [Função para importar os dados](#)

Inicialização

```
clear;
close all;
clc;
```

Importação de dados

```
importfile('TCFigAExpM3CAST'); %Importa dados experimentais do ponto 1
importfile('TCFigBExpM3CAST'); %Importa dados experimentais do ponto 2
importfile('TCFigCExpM3CAST'); %Importa dados experimentais do ponto 3

%Importa workspace gerado na modelagem numérica
importfile('Tfinal60x40Workspace71500');
```

Variáveis auxiliares

```
tv=(t0+dt):dt:(t0+TempoMax);
tv=tv/(60*60);
Tfinal=Tfinal-273.15;
vR=dr/2:dr:Lr;
vL=dz/2:dz:Lz;
```

Medindo a temperatura nos 3 pontos para comparação experimental

```
%Posição na malha dos pontos medidos experimentalmente
point1Altura=round(0.004/dz);
point1Raio=round(0.0018/dr);
point2Altura=round(0.0417/dz);
point2Raio=round(0.0068/dr);
point3Altura=round(0.1157/dz);
point3Raio=nr;

for i=1:IterMax
    points(1,i)=Tfinal(point1Raio,point1Altura,i);
    points(2,i)=Tfinal(point2Raio,point2Altura,i);
    points(3,i)=Tfinal(point3Raio,point3Altura,i);
```

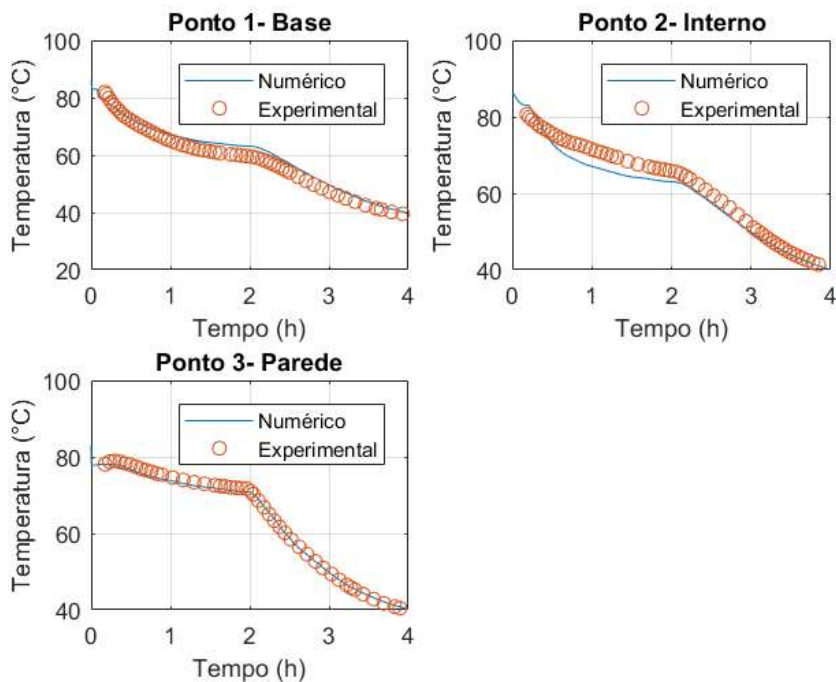
```
end
```

Gerando os gráficos das temperaturas ao longo do tempo

```
figure (1);
subplot(2,2,1);
plot(tv,points(1,:),ExpFigA(:,1),ExpFigA(:,2),'o');
grid on, legend ('Numérico','Experimental');
xlabel('Tempo (h)'), ylabel('Temperatura (°C)'),hold on;
title('Ponto 1- Base');

subplot(2,2,2);
plot(tv,points(2,:),Data001(:,1),Data001(:,2),'o');
grid on, legend ('Numérico','Experimental');
xlabel('Tempo (h)'), ylabel('Temperatura (°C)'), hold on;
title('Ponto 2- Interno');

subplot(2,2,3);
plot(tv,points(3,:),ExpFigC(:,1),ExpFigC(:,2),'o');
grid on, legend ('Numérico','Experimental');
xlabel('Tempo (h)'), ylabel('Temperatura (°C)'),hold on;
title('Ponto 3- Parede');
```



Gerando os gráficos das distribuições de temperatura ao longo do espaço

para valores de tempo pré-determinados

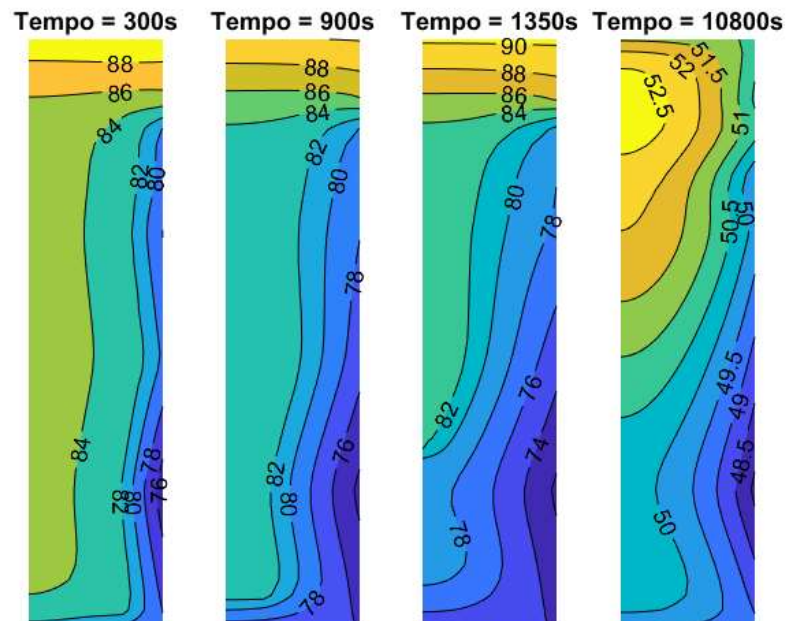
```
%transpondo Tfinal
for i=1:max(size(Tfinal))
    Tfinal(:, :, i)=transpose(Tfinal(:, :, i));
```

```
end
figure (2);
%Para t=300s
t=300;
subplot(1,4,1)
k=round(t/dt);
[C,h]=contourf(vR,vL,Tfinalt(:, :, k));
clabel(C,h);
str=join(['Tempo = ', num2str(t), 's']);
title(str);
axis off;

%Para t=900s
t=900;
subplot(1,4,2)
k=round(t/dt);
[C,h]=contourf(vR,vL,Tfinalt(:, :, k));
clabel(C,h);
str=join(['Tempo = ', num2str(t), 's']);
title(str);
axis off;

%Para t=1350s
t=1350;
subplot(1,4,3)
k=round(t/dt);
[C,h]=contourf(vR,vL,Tfinalt(:, :, k));
clabel(C,h);
str=join(['Tempo = ', num2str(t), 's']);
title(str);
axis off;

%Para t=10800s
t=10800;
subplot(1,4,4)
k=round(t/dt);
[C,h]=contourf(vR,vL,Tfinalt(:, :, k));
clabel(C,h);
str=join(['Tempo = ', num2str(t), 's']);
title(str);
axis off;
set(gcf, 'color', 'w');
```



Função para importar os dados

```
function importfile(fileToRead1)
%IMPORTFILE(FILETOREAD1)
% Imports data from the specified file
% FILETOREAD1: file to read

% Auto-generated by MATLAB on 28-Jul-2017 10:20:32

% Import the file
newData1 = load('-mat', fileToRead1);

% Create new variables in the base workspace from those fields.
vars = fieldnames(newData1);
for i = 1:length(vars)
    assignin('base', vars{i}, newData1.(vars{i}));
end
end
```


Referências

- [1] S Ravi Annapragada, Dawei Sun, and Suresh V Garimella. Analysis and suppression of base separation in the casting of a cylindrical ingot. *Heat Transfer Engineering*, 29(4):385–394, 2008.
- [2] Ching-China Ji and Ching-Show Lin. The solidification process of melt casting explosives in shell. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 23(3):137–141, 1998.
- [3] A Srinivas Kumar and V Dharma Rao. Modeling of cooling and solidification of tnt based cast high explosive charges. *Defence Science Journal*, 64(4):339, 2014.
- [4] Clovis R Maliska. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional: fundamentos e coordenadas generalizadas*. Livros Técnicos e Científicos, 1994.
- [5] Dawei Sun, Suresh V Garimella, Sanjeev Singh, and Neelam Naik. Numerical and experimental investigation of the melt casting of explosives. In *ASME 2004 International Mechanical Engineering Congress and Exposition*, pages 399–409. American Society of Mechanical Engineers, 2004.
- [6] CR Swaminathan and VR Voller. A general enthalpy method for modeling solidification processes. *Metallurgical transactions B*, 23(5):651–664, 1992.