

## **SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS COM FRONTEIRA LIVRE EM CAVIDADES USANDO DISCRETIZAÇÃO DE VORONOI**

### **João Flávio Vieira de Vasconcellos**

LEMA - Laboratório de Experimentação e Simulação Numérica em  
Transferência de Calor e Massa  
Instituto Politécnico da UERJ  
Cx. P. 97.282 - CEP 28.601- 970  
Nova Friburgo - Rio de Janeiro - Brasil  
web: <http://www.iprj.uerj.br/~jflavio>

### **Clovis Raimundo Maliska**

SINMEC - Laboratório de Simulação Numérica em  
Mecânica dos Fluidos e Transferencia de Calor  
Universidade Federal de Santa Catarina  
Cx. P. 476 - CEP 88.040-900  
Florianópolis - Santa Catarina - Brasil  
web: <http://www.sinmec.ufsc.br>

***Resumo.** Neste trabalho são apresentados alguns resultados usados na validação de uma metodologia para a captura da frente do escoamento em problemas de fronteira livre baseada no conhecido método VOF. Nesta metodologia se resolve uma equação extra para determinar a posição da fronteira. O método descrito neste trabalho foi adaptado para ser usado em conjunto com uma metodologia de volumes finitos que usa malhas de Voronoi no mapeamento do domínio. Comparações com soluções analíticas são apresentadas, comprovando a potencialidade da metodologia.*

***Palavras-chave:** Volumes Finitos, Malhas Não-Estruturadas, Fronteira Livre, Injeção em Moldes*

## **1. INTRODUÇÃO**

Situações envolvendo fronteiras livres são encontradas em diversos problemas físicos, entre elas o enchimento de cavidades, como na fundição de peças metálicas ou em fabricação de peças plásticas, em um processo denominado injeção de plástico. Conhecer como se comporta o escoamento e a frente móvel neste escoamento está diretamente ligado à otimização do processo de injeção.

Alguns métodos foram desenvolvidos para analisar este tipo de problema. Cada um destes métodos possuem características próprias mas, basicamente, eles podem ser agrupados da seguinte maneira (Swaminathan e Voller, 1994): i) Métodos das Células Marcadas; ii) Métodos Lagrangeanos; e iii) Métodos Implícitos. Neste trabalho será tratado exclusivamente de um

método implícito. Esta classe de métodos foi originalmente proposta por Hirt et alii (1975) e Hirt e Nichols (1981), e a sua principal característica é que, além das equações que geralmente são usadas para a solução do problema hidrodinâmico, usa-se uma equação diferencial adicional, Eq. (1), para a determinação da fronteira em movimento, da forma

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_L F] + \nabla \cdot (\rho_L F \vec{V}) = 0 \quad (1)$$

onde  $\rho_L$  é a massa específica do líquido,  $\vec{V}$  o vetor velocidade e  $F$  a fração do volume de líquido contido na célula.  $F = 0$  indica um volume vazio de líquido e  $F = 1$ , um volume cheio. Os volumes contendo  $F$  diferentes de 0 ou 1 são justamente aqueles por onde a fronteira livre passa, em um determinado nível de tempo.

Em análises apresentadas por Swaminathan e Voller (1994), em um problema unidimensional, e por Maliska e Vasconcellos (2000), em uma situação bidimensional, ficou demonstrado que a aplicação da Eq. (1) causa um erro na determinação da posição da fronteira. Concordam estes autores que este erro tem origem na avaliação incorreta do fluxo de massa a montante do escoamento.

Para avaliar os fluxos convectivos com precisão, Swaminathan e Voller (1994) propuseram o uso de uma equação com um limitador de fluxo. Desta forma, a equação de transporte de  $F$  foi reescrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_L F] + \nabla \cdot (\rho_L G \vec{V}) = 0 \quad (2)$$

onde  $G$  é um limitador de fluxo que obedece a seguinte restrição:

$$\begin{aligned} \text{se } F < 1 \text{ então } G &= 0 \\ \text{se } F = 1 \text{ então } 0 < G &\leq 1 \end{aligned} \quad (3)$$

Ao propor uma equação como a Eq. (2), seus autores procuraram atacar dois problemas distintos. O primeiro deles associado à dispersão artificial que faz com que a avaliação dos fluxos seja feita de forma incorreta. O segundo está ligado ao desenvolvimento de uma metodologia completamente implícita, sem as limitações que as metodologias explícitas possuem, isto é, sem a necessidade de se usar incrementos de tempos que satisfaçam a condição de Courant.

A Eq. (2) apresenta uma séria limitação. Seu uso só é possível em situações em que uma vez preenchida de líquido uma determinada região, esta região deverá permanecer cheia por toda a simulação. Muitos problemas de frentes livres não se enquadram nesta limitação, mas, de uma maneira geral, as situações envolvendo enchimento de moldes podem ser simuladas com esta metodologia, pois nestes problemas após o preenchimento de uma determinada região, esta região permanece cheia.

A grande vantagem do uso de uma equação como extra, como o proposto pelo método VOF, é que sua implementação é bastante facilitada. Um código de volumes finitos adaptado para resolver problemas hidrodinâmicos pode ser facilmente alterado para o estudo de problemas de fronteira livre.

Uma completa descrição da metodologia pode ser encontrada nos trabalhos de Swaminathan e Voller (1994), Vasconcellos (1999) e Maliska e Vasconcellos (2000). Neste presente trabalho destacaremos alguns aspectos da metodologia que não foram tratados nos artigos supracitados.

## 2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Para clareza do trabalho apresentamos o método para captura da frente do escoamento proposto por Swaminathan e Voller (1994) e adaptado por Vasconcelos (1999) para malhas de Voronoi. Para um volume típico de Voronoi, apresentado na Fig. 1, a integração da Eq. (2) resulta em

$$\rho_L \left[ F_P - F_P^o \right] \frac{\Delta V_P}{\Delta t} + \sum_{i=1}^N \rho_L V_{P_i} G_{P_i} \Delta S_{P_i} = 0 \quad (4)$$

onde  $N$  é o número de faces do volume  $P$ .

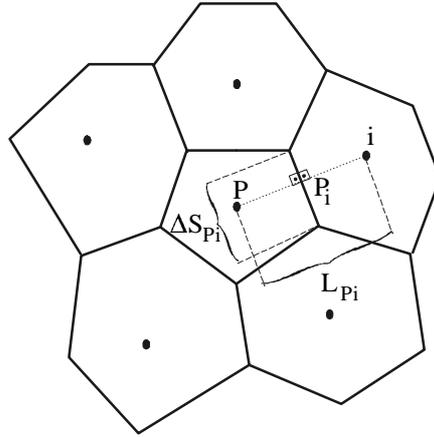


Figura 1 - Volume típico usado na integração das equações diferenciais

Há a necessidade de avaliação de  $G_{P_i}$  nas faces dos volume e uma formulação *upwind* foi usada para este fim. Desta forma,

$$G_{P_i} = \left( \frac{1}{2} + \gamma_i \right) G_i + \left( \frac{1}{2} - \gamma_i \right) G_P \quad (5)$$

onde

$$\text{se } V_{P_i} < 0 \text{ então } \gamma_i = \frac{1}{2} \quad (6)$$

$$\text{se } V_{P_i} > 0 \text{ então } \gamma_i = -\frac{1}{2}$$

Introduzindo a Eq. (5) na Eq. (4) chega-se a

$$\begin{aligned} F_P \left[ \rho_L \frac{\Delta V_P}{\Delta t} \right] + \rho_L G_P \sum_{i=1}^N V_{P_i} \left( \frac{1}{2} - \gamma_i \right) \Delta S_{P_i} = \\ F_P^o \left[ \rho_L \frac{\Delta V_P}{\Delta t} \right] - \rho_L \sum_{i=1}^N V_{P_i} \left( \frac{1}{2} + \gamma_i \right) G_i \Delta S_{P_i} \end{aligned} \quad (7)$$

A Eq. (7) é uma equação de conservação do líquido para o volume  $P$ .  $G$  irá determinar se o volume deverá ou não contribuir para o enchimento de um volume vizinho. A determinação de  $G$  está detalhada em Swaminathan e Voller (1994), Vasconcellos (1999) e Maliska e Vasconcellos (2000), desta forma não a rerepresentaremos aqui. Com o auxílio da Fig. 2, apresentaremos alguns aspectos relevantes do uso desta formulação. Nesta figura pode-se observar uma ampliação da malha de Voronoi de uma região por onde está passando a fronteira do escoamento em um determinado instante de tempo. Para a situação apresentada, tem-se que  $0 < F_p < 1$  e, por esta razão,  $G_p = G_1 = G_2 = G_3 = G_4 = 0$ . O valor de  $G$  para os volumes 5 e 6 são não nulos.

Com estes valores de  $G$ , pode-se perceber que enquanto os volumes  $P$ , 1 e 4 não estiverem completamente cheios, com  $F=1$ , eles não contribuirão para o enchimento dos volumes 2 e 3, por exemplo. Este era o efeito idealizado por Swaminathan e Voller (1994) quando elaboraram este método. Por esta razão, a Eq. (2) apresenta resultados bastante superiores aos apresentados pela Eq. (1) nos testes apresentados por Swaminathan e Voller (1994) e Vasconcellos (1999). Em contrapartida, os únicos fluxos que contribuem para o enchimento do volume  $P$ , na Eq. (7), vêm dos volumes 5 e 6. O volume  $P$  não influencia no enchimento dos volumes 1 e 4 e vice-versa. Esta é uma situação desfavorável para o método, mas os resultados indicam que este efeito não é muito danoso para a solução final.

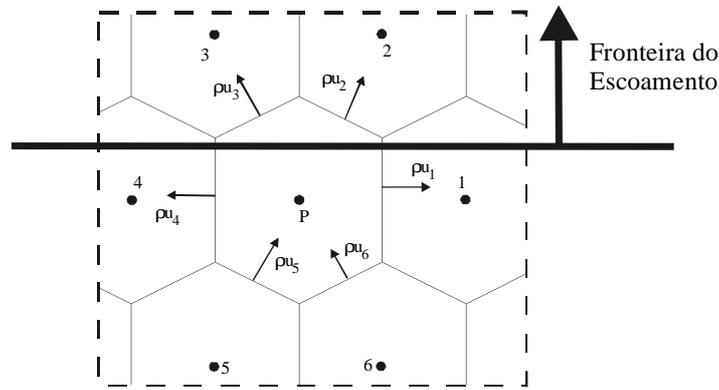


Figura 2 - Detalhe de uma malha de Voronoi

### 3. SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE ENCHIMENTO DE UMA CAVIDADE 2D

O primeiro problema apresentado é o do enchimento de uma cavidade radial. A geometria é apresentada na Fig. 3. A escolha deste problema deveu-se a facilidade em se obter uma solução analítica. As equações que governam este problema são:

$$\frac{dV_r}{dr} + \frac{V_r}{r} = 0 \quad (8)$$

$$\rho V_r \frac{dV_r}{dr} = -\frac{dP}{dr} + \mu \left[ \frac{d^2 V_r}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dV_r}{dr} - \frac{V_r}{r^2} \right]$$

onde  $V_r$  é a velocidade radial do escoamento. As condições de contorno para o problema são:

$$\begin{aligned} V_r &= V_i \text{ em } r = R_o \\ P &= 0 \text{ em } r = R(t) \end{aligned} \quad (9)$$

onde  $R_o$  é o raio interno do disco,  $V_i$  a velocidade radial do fluido ao entrar em  $R_o$  e  $R(t)$  é a posição radial da frente.

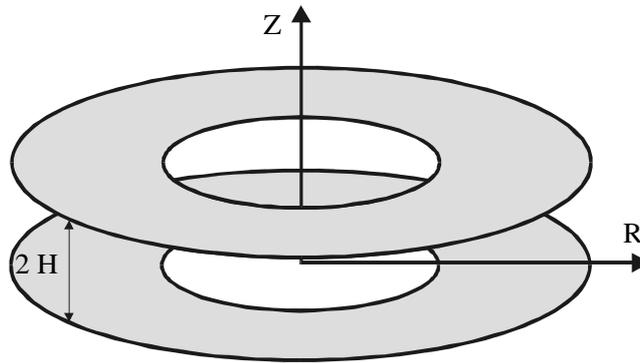
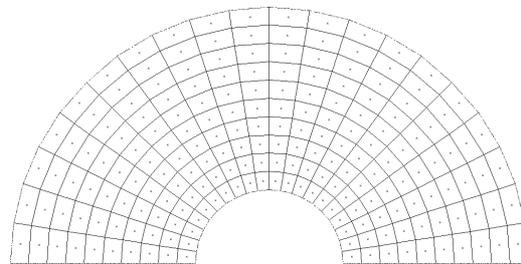
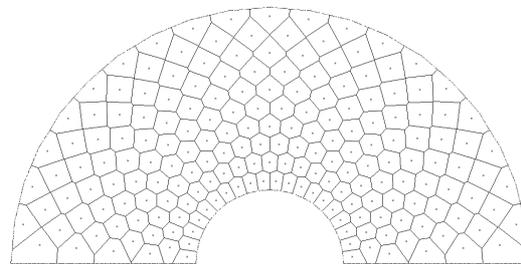


Figura 3 - Geometria da cavidade radial



Malha Cartesiana



Malha Hexagonal

Figura 4 - Malhas usadas na simulação do problema da cavidade radial

A solução analítica para  $P$  e para  $R(t)$ , obtidas da Eq. (8) e das suas condições de contorno, são

$$R(t) = \sqrt{2V_i R_o t + R_o^2} \quad (10)$$

e

$$P(r, t) = \frac{\rho V_i^2 R_o^2}{2} \left[ \left( \frac{l}{R(t)} \right)^2 - \left( \frac{l}{r} \right)^2 \right] \text{ para } R_o \leq r \leq R(t) \quad (11)$$

$$P(r, t) = 0 \text{ para } r > R(t)$$

Nos resultados apresentados a seguir, usou-se malhas radiais e hexagonais similares às da Fig. 4. Na cavidade, cujo raio interno mede 100 mm e o raio externo mede 200 mm, injetou-se um fluido com  $\rho = 2.500 \text{ kg / m}^3$  e com uma velocidade  $V_i = 10 \text{ m/s}$ . Na solução numérica usou-se o método de volumes finitos proposto por Maliska (1995). O método utilizado para a correção da pressão foi uma variante do SIMPLEC (van Doormaal e Raithby, 1984) para o uso neste tipo em malhas de Voronoi.

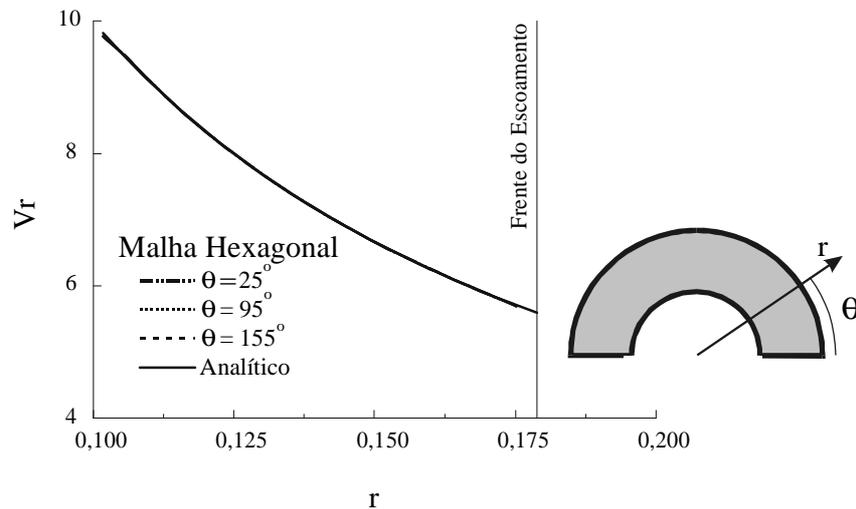


Figura 5 - Comparação entre a velocidade radial numérica e analítica, em  $t=0,011 \text{ s}$ .

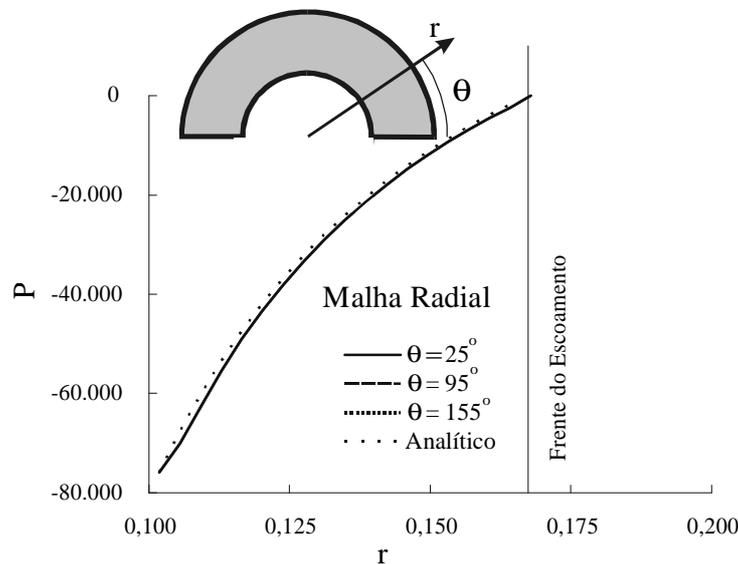


Figura 6 - Comparação entre a pressão numérica e analítica, em  $t=0,009 \text{ s}$ .

Na Fig. 5 é apresentado o comportamento da velocidade radial em 3 posições distintas do domínio, desta forma pode-se observar que a simetria do problema foi reproduzida com o modelo numérico. A comparação com a solução analítica é bastante boa, mesmo quando a malha usada não é radial. Este é um problema fisicamente simples que, com o caso de malha hexagonal mostrada torna-se bidimensional, e portanto adequado para a avaliação de aspectos numéricos do método.

Num instante de tempo diferente, pode-se observar o comportamento da pressão, apresentado na Fig. 6. A comparação com a solução analítica não é tão boa quanto foi a da velocidade radial, mas o resultado continua sendo bastante satisfatório. Obteve-se simetria no campo de pressões da mesma forma que já havia sido obtido para as velocidades. No resultado apresentado usou-se uma malha radial, mas os resultados obtidos usando-se malhas hexagonais apresentaram o mesmo comportamento.

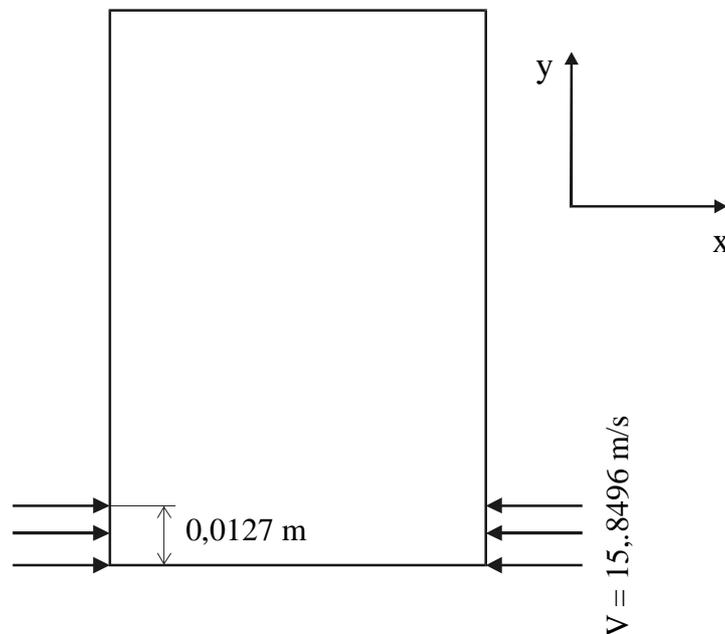


Figura 7 - Geometria da cavidade retangular

Swaminathan e Voller (1994) apresentam em seu trabalho, um problema que foi originalmente proposto por Minae *et alii* (1991), a simulação do enchimento de uma cavidade com alumínio. Nesta simulação não se fez uso da simetria do problema, pois um dos objetivos da simulação era o de reproduzir a simetria da solução e assim confirmar a correta implementação das equações do método de captura da frente. A condição de contorno para o problema foi de velocidade nula para todo o domínio, com exceção da pequena região indicada na Fig. 7.

A Fig. 7 apresenta a geometria de uma cavidade retangular que foi mapeada usando-se uma malha cartesiana e outra hexagonal. Swaminathan e Voller (1994) apresentaram o resultado da simulação usando exclusivamente malhas cartesianas no mapeamento do domínio. Comparou-se qualitativamente os resultados que foram obtidos por Swaminathan e Voller (1994) e por estes autores, em ambos os casos usando malhas cartesianas idênticas. Qualitativamente os resultados são bastante semelhantes, porém quando a comparação é realizada entre resultados gerados com malhas diferentes, cartesiana e hexagonal, há uma considerável diferença entre os resultados, como se observa na Fig. 8. Nesta figura são apresentados o campo de  $F$ , para o mesmo instante de tempo, usando as duas malhas testadas. Como os resultados são bastante diferentes, diversos testes foram elaborados para descartar a possibilidade de algum erro no código computacional que gerou estes resultados. Por exemplo, as áreas em negro em ambas as figuras são iguais, pois o código computacional que gerou estes campos conserva a massa. Após diversas avaliações chegou-se a conclusão que não havia nada de errado no código. Esta diferença estava associada ao problema e a malha usada.

O problema físico é similar ao escoamento de um jato de um líquido. Na região em que a massa de fluido se dirige em direção ao teto da cavidade, o componente  $v$  do vetor velocidade é

bastante superior ao outro componente da velocidade. Analisando-se a Fig. 2, percebe-se que o volume P, após o seu enchimento, irá contribuir para o enchimento dos volumes 2 e 3. Este mecanismo faz com que ocorra um espalhamento lateral da massa.

No caso de malhas cartesianas este espalhamento não ocorre, pois a velocidade dominante naquela região é pequena para promover o enchimento dos volumes a esquerda e a direita. Como a conservação da massa deve ser satisfeita, toda a massa que entra por um volume naquela região só pode sair pela face superior deste volume. Isto faz com que, na simulação realizada com malhas cartesianas, a região central do escoamento não se espalhe lateralmente.

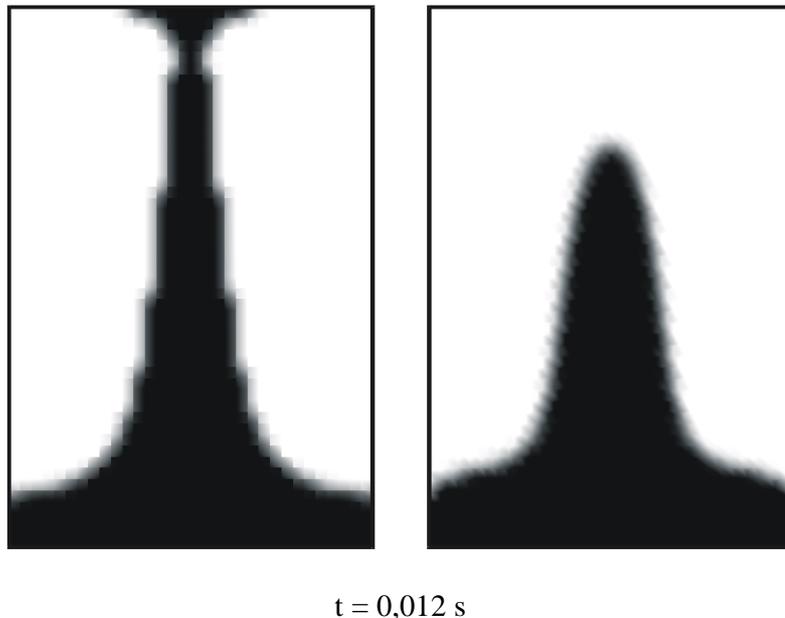


Figura 8 - Campo de F em  $t=0,012 \text{ s}$   
Malha cartesiana (direita) - Malha malha hexagonal (esquerda)

Não há no trabalho que originou este teste um resultado experimental que pudesse ser usado para validar os resultados. Testes foram realizados com malhas de Voronoi triangulares e aleatórias e para estas malhas o comportamento de F se aproximou do comportamento de F para malhas hexagonais. Este fato sugere que a hipótese anteriormente levantada pode estar correta.

Uma última questão pode ser levantada. Que tipo de solução seria obtida usando-se uma malha cartesiana mais refinada? Esta solução iria na direção da solução usando malha hexagonal?

A Fig. 9 apresenta o campo de F para uma malha cartesiana em que se usou  $64 \times 96$  volumes no mapeamento do domínio. A malha cartesiana da Fig. 8, foi construída com  $32 \times 48$  volumes. Observa-se que não houve alterações significativas no comportamento do escoamento para o mesmo tipo de malha. Isto indica que a discrepância entre os resultados não está associada ao refino da malha, mas sim ao mecanismo de transferência de massa entre os volumes. Este é um ponto que merece ser melhorado na metodologia de Swaminathan e Voller (1994).

Esta é uma contribuição importante deste trabalho: demonstrar de forma inequívoca que existem erros na metodologia de captura da frente que não desaparecem com o refino da malha. Malhas que não são alinhadas com a direção do escoamento principal não tendem a apresentar este efeito, mas estes autores concordam que novos estudos devam ser realizados objetivando melhorar o limitador de fluxo  $G$ , Eq. (3), fazendo com que ele incorpore outros efeitos para a fronteira livre como a própria curvatura de fronteira. Em malhas estruturadas este efeito é apre-

sentado por vários autores como, mas em malhas não-estruturadas a implementação destes efeitos é bem mais complexa.

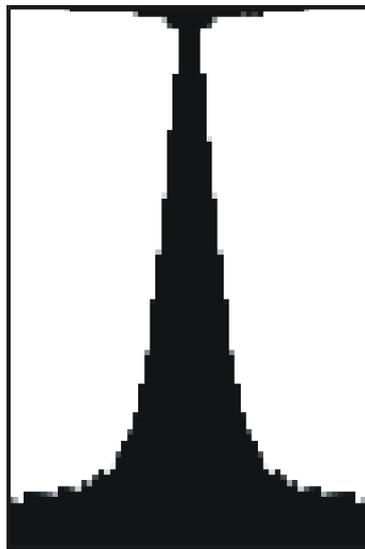
#### 4. CONCLUSÕES

Os resultados apresentados para a simulação do enchimento de uma cavidade radial demonstram inequivocamente o potencial do método para a simulação de problemas envolvendo frentes livres em problemas de enchimento de cavidades.

Resultados conflitantes obtidos usando malhas cartesianas e hexagonais no problema da injeção de uma cavidade retangular foram apresentados e analisados mostrando a necessidade de uma melhor avaliação da maneira como esta metodologia permite ou não que escoo fluido por uma determinada fronteira do volume finito.

Uma justificativa foi apresentada para os resultados diferentes. Muito embora a justificativa pareça indicar a causa da diferença, somente com mais experimentação numérica e com a corroboração de resultados experimentais será possível esclarecer com total segurança se uma das duas soluções representa corretamente o fenômeno físico analisado.

De importante tem-se a comprovação de que malhas diferentes podem apresentar soluções diferentes para o mesmo problema e que o refino da malha não mudará esta situação. Isto é algo que não havia sido constatado e mesmo comprovado em nenhum dos trabalhos citados neste artigo.



$t = 0,012 \text{ s}$

Figura 9- Solução refinada usando malha cartesiana

#### *Agradecimentos*

O primeiro autor agradece ao CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pelo auxílio financeiro prestado para a realização desta pesquisa.

## REFERÊNCIAS

- Hirt, C. W. e Nichols, B. D., 1981, Volume of fluid (VOF) method for dynamics of free boundaries, *Journal of Computational Physics*, vol. 39, pp. 201-225.
- Hirt, C. W. e Nichols, B. D. e Romero, N. C., 1975, SOLA - A numerical solution algorithm for transient fluid flows, Relatório no LA-5852, Los Alamos Scientific Laboratory.
- Maliska, C. R e Vasconcellos, J. F. V., 2000, An unstructured finite volume procedure for simulating flows with moving fronts, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, vol. 182, pp. 401-420.
- Minae, B., Stelson, K. e Voller, V. R., 1991, Analysis and flow patterns and solidification phenomena in die casting process, *J. Eng. Mech. Technol. ASME*, vol. 113, pp. 296-302.
- Swaminathan, C. R. e Voller, V. R., 1994, A time-implicit algorithm, *Applied Mathematical Modelling*, vol. 18. pp. 101-108.
- Vasconcellos, J. F. V., 1999, Um método de volumes finitos usando malhas não-estruturadas para o estudo de escoamentos com frentes livres, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Brasil.
- van Doormaal, J. P. e Raithby, G. D., 1984, Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flow, *Numerical Heat Transfer*, vol. 7, pp.147-163.

### MOULD FILLING SIMULATION USING FINITE VOLUME METHOD BASED ON VORONOI DISCRETIZATION

**Abstract.** This paper presents numerical results obtained when validating a finite volume methodology using the well-known VOF method for capturing the fluid interface in a moving boundary problem. This methodology uses an additional equation for capturing the front and Voronoi grids for the finite volume scheme. It is shown comparisons with analytical solutions demonstrating the potentiality of the methodology

**Key-words:** *Finite Volume Method, Moving Fronts, Non-newtonian Fluid, Mold Filling*