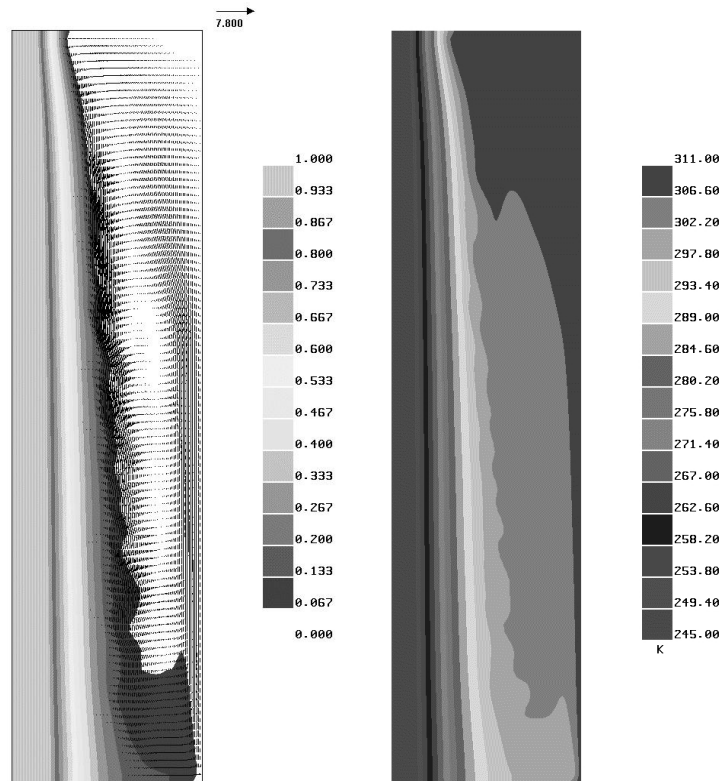




# Università degli studi di Ferrara

Dipartimento di Ingegneria - ENDIF



ROSARIO SQUATRITO

## MODELLI NUMERICI PER LO STUDIO DEL CAMBIAMENTO DI FASE IN LEGHE BINARIE: VALIDAZIONI E APPLICAZIONI INDUSTRIALI

Tesi di Dottorato di Ricerca in: SCIENZE DELL'INGEGNERIA  
(CURRICULA: Industriale) - XX CICLO

Università degli studi di Ferrara

Dipartimento di Ingegneria - ENDIF

Dottorato di Ricerca in Scienze dell'Ingegneria

CURRICULA: Industriale

XX CICLO

**Coordinatore:** Prof. Stefano Trillo

**Tutore:** Prof. Stefano Piva

**Commissione esaminatrice:**

Prof. Francesco Mollica – Università degli Studi di Ferrara

Prof. Michele Bianchi – Università degli Studi di Bologna

Prof. Maurizio Magrini – Università degli Studi di Padova

**Data seduta esame finale:** 18 marzo 2010

## Indice generale

---

### **Indice**

<b>Introduzione</b>	p. 1
<b>Cap. 1 Rassegna della letteratura</b>	p. 3
1.1 Introduzione	p. 3
1.2 Il problema di Stefan	p. 5
1.3 La soluzione analitica di Neumann	p. 6
1.4 I metodi entalpici	p. 7
1.5 Applicazioni dei modelli numerici nello studio del cambiamento di fase di sostanze pure in presenza di convezione naturale	p. 11
1.6 I metodi a griglia fissa per lo studio del cambiamento fase	p.16
1.6.1 I modelli basati sulla capacità termica apparente	p. 20
1.6.2 Metodi basati sul termine sorgente di calore latente	p. 21
1.6.3 Metodi numerici	p. 22
1.6.4 Metodi risolutivi	p. 25
1.7 Modelli advettivi-diffusivi per lo studio del cambiamento di fase in presenza di convezione con metodi a griglia fissa	p. 27
1.8 Modelli per lo studio del cambiamento di fase di sostanze binarie basati su fase di miscela solido-liquida con formulazione doppiamente diffusiva	p. 31
1.9 Classificazione dei modelli basati sulla fase di miscela solido-liquida	p. 37
1.10 Modelli a doppia fase basati su metodi di media delle variabili locali	p. 43
1.11 Richiami e considerazioni conclusive	p. 47
Riferimenti bibliografici	p. 50

---

<b>Cap. 2 Cambiamento di Fase in Convezione Laminare</b>	p. 57
2.1 Analisi del cambiamento di fase in sostanze pure	p. 57
2.1.1 Obiettivi	p. 57
2.1.2 Formulazione del problema	p. 58
2.1.3 Analisi di scala	p. 59
2.1.4 La formulazione matematica	p. 60
2.1.5 Casi analizzati	p. 68
2.1.6 Risultati	p. 69
2.2 Cambiamento di fase per sostanze multicomponente	p. 92
2.2.1 Obiettivi	p. 92
2.2.2 Formulazione del problema	p. 93
2.2.3 Formulazione matematica	p. 94
2.2.4 Risultati	p. 99
Riferimenti bibliografici	p. 109
<b>Cap. 3 Esempi applicativi e attività sperimentali</b>	p. 113
Introduzione	p. 113
3.1 Fase 1- Confronto numerico-sperimentale di riempimenti di stampo per gravità in caduta	p. 113
3.1.1 Obiettivi	p. 113
3.1.2 Descrizione dell'apparato sperimentale	p. 114
3.1.3 Metodologia di svolgimento delle prove	p. 117
3.1.4 Modello numerico	p. 119
3.1.5 Analisi dei risultati e considerazioni	p. 119
3.2 Fase 2 – Confronto numerico-sperimentale di riempimento di stampo in sorgente	p. 123
3.2.1 Obiettivi	p. 123
3.2.2 Descrizione dell'apparato sperimentale	p. 124
3.2.3 Metodologia di svolgimento delle prove	p. 124
3.2.4 Modello numerico	p. 128
3.2.5 Piano sperimentale	p. 128
3.2.6 Analisi dei risultati e considerazioni	p. 129
3.3 Analisi di sensitività del codice in applicazioni industriali	p. 136
3.3.1 Obiettivi	p. 136

---



## Indice generale

---

3.3.2 Determinazione di una soluzione numerica di riferimento	p. 136
3.3.3 Individuazione delle condizioni di grid independence	p. 139
3.3.4 Individuazione delle condizioni di time independence	p. 142
3.3.5 Analisi di sensitività del codice al variare delle caratteristiche di viscosità del fluido	p.144
3.3.6 Analisi di sensitività del codice al variare delle Caratteristiche termofisiche del fluido	p. 147
3.4 Analisi sugli effetti di sistemi di raffreddamento a fluido in getti di fonderia	p. 149
Introduzione	p. 149
3.4.1 Principi tecnico-teorici di funzionamento dei sistemi di termoregolazione di parti stampanti	p. 150
3.4.2 Calcolo del coefficiente di scambio termico in un canale Raffreddamento rettilineo a sezione circolare	p. 152
3.4.3 Applicazione numerica ad un caso bidimensionale	p. 154
Riferimento bibliografici	p. 163
<b>Cap. 4 Considerazioni Conclusive</b>	p.165
Ringraziamenti	

---

## **Introduzione**

Le attività di ricerca che vengono affrontate e discusse in questo lavoro sono state condotte e portate a termine grazie ad un interesse specifico espresso da parte di una realtà industriale disposta a investire risorse per un miglioramento dei propri prodotti, attraverso l'impiego di strumenti di analisi predittiva dei fenomeni fisici che avvengono durante il processo produttivo.

Gli argomenti trattati mostrano come sia possibile, allo stato attuale, affrontare problematiche complesse di natura industriale applicando modelli matematico-analitici sviluppati nelle ultime tre decadi in ambiti prevalentemente accademici, in un settore considerabile di nicchia come la modellazione numerica di sistemi in cambiamento di fase solido-liquido.

La realtà della fonderia, entro la quale questo lavoro si inserisce nella sua parte applicativa, non è l'unico ambito industriale dove la conoscenza approfondita dei fenomeni che avvengono in un sistema in cambiamento di fase solido-liquido riveste un ruolo di primaria importanza. Basti pensare a settori come quello alimentare, senza dimenticare che gran parte dei risultati di ricerche e di sviluppi nel campo si sono avuti grazie all'enorme interesse allo studio riscontrato in ambito nucleare, supportato spesso da ingenti disponibilità economiche.

Le necessità di condurre le attività di indagine, entro ambiti applicativi con immediati ricadute a livello industriale hanno imposto inizialmente specifici obiettivi di ricerca finalizzati in particolare a trovare strategie di impiego di codici di calcolo commerciale in applicazioni di fonderia.

Ciò che è emerso fin dalle prime fasi delle attività di indagine è che l'impiego proficuo di strumenti di calcolo nello studio del cambiamento di fase solido-liquido, richiede alla base, sia un'adeguata conoscenza del fenomeno che si intende studiare, sia una piena padronanza degli strumenti e dei metodi che permettono di modellare numericamente la molteplicità di aspetti fisici che lo coinvolgono.

Per tali ragioni le attività di ricerca condotte hanno visto affiancata ad un'attività di tipo prettamente applicativa, un'approfondita fase di studio sui fondamenti teorici delle formulazioni matematiche impiegate, cercando di mettere in luce aspetti che possono essere talvolta trascurati da chi si accinge a intraprendere analisi di processi di solidificazione e fusione di sostanze mono o multicomponente.

A tal proposito si è ritenuto utile fornire al lettore, attraverso il primo capitolo di rassegna della letteratura, uno strumento in grado di contestualizzare l'argomento di studio mostrando le linee evolutive che hanno portato dalle prime formulazioni matematiche, nate per la previsione numerica del cambiamento di fase di sostanze pure in regime di sola conduzione, fino a modelli in grado di tenere in conto di molteplici effetti che avvengono a diverse scale dimensionali, come ad

## Introduzione

---

esempio la convezione nella fase liquida, e la micro e macrosegregazione nelle sostanze bicomponenti.

Nel secondo capitolo vengono mostrati i risultati raggiunti in attività di sperimentazione numerica condotte applicando formulazioni implementate in codici commerciali, a casi di riferimento con adeguato riscontro di studio in letteratura, mettendo in luce le problematiche riscontrate e suggerendo strategie di impiego degli strumenti di calcolo.

Infine, nel terzo capitolo vengono riportati esempi applicativi e validazioni sperimentali in casi di studio più strettamente legati alla realtà industriale della fonderia, affrontando, attraverso strumenti numerici, problematiche tecnologiche interessate da preponderanti fenomeni fluidodinamici e di scambio termico.

### Cap. 1 RASSEGNA DELLA LETTERATURA

#### 1.1 Introduzione

Lo studio analitico-numerico del passaggio di fase solido-liquido che vede i suoi inizi alla fine dell'800, si è sempre dovuto scontrare sia con le complessità intrinseche del fenomeno fisico, sia con le caratteristiche di forte non linearità date dal movimento dell'interfaccia di cambiamento di fase con conseguenti limitazioni nella determinazione di soluzioni analitiche delle equazioni matematiche che governano il problema.

La cronologia delle numerose pubblicazioni reperibili in letteratura vede in particolare una linea di avanzamento temporale ben definita che parte dalle trattazioni del fisico austriaco Josef Stefan nel 1889 nello studio dei fenomeni di glaciazione degli oceani, e giunge, attraverso vari gradi di affinamento successivo e i diversi passaggi di scala nell'analisi del problema, fino ai più recenti studi dell'ultima decade, incentrati sullo sviluppo di modelli numerici per la previsione micro-strutturale della formazione dendritica nelle leghe metalliche.

Se a Stefan è stato riconosciuto il merito di formalizzare il problema che prende il suo nome e che sostanzialmente raggruppa l'insieme dei processi cambiamento di fase solido-liquido con interfacce mobili all'interno del dominio di studio, è stato grazie all'apporto di matematici come Neumann che si sono ottenute agli inizi del 900 le prime soluzioni analitiche del problema (1912).

Come già sottolineato le soluzioni analitiche trovate per descrivere il problema hanno sempre dovuto fare i conti con rigidi campi di applicabilità, principalmente risolvendo il problema di Stefan in domini semi-infiniti e sotto particolari condizioni al contorno [1].

Inoltre, un'ulteriore limite nell'applicabilità della soluzione analitica è rappresentato dall'ipotesi che il processo di cambiamento di fase avvenga in regime di sola conduzione, una condizione che risulta difficilmente riscontrabile sia nei fenomeni fisici di comune interesse scientifico sia nelle casistiche industriali a cui si applicano i campi di indagine.

A tal riguardo, come dimostrato anche da Pinelli e Piva [2], anche la messa a punto accurata di esperienze sperimentali per l'osservazione del fenomeno del cambiamento di fase in conduzione, non permette di evitare in maniera assoluta sia l'insorgenza di fenomeni convettivi, sia la presenza di scambi termici lungo la seconda direzione, facendo cadere gli assunti geometrici di monodirezionalità di avanzamento del fronte di cambiamento di fase, su cui si basano le soluzioni analitiche.

Per le ragioni appena citate, le soluzioni analitiche del problema di Stefan proposte da diversi Autori nel corso del 900 e su cui si rimanda per maggiori approfondimenti a [3], sono sempre state affiancate da soluzioni numeriche in

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

grado di fornire un più ampio spettro di applicazione, e su cui si è riscontrata una maggior concentrazione degli sforzi dei ricercatori nel tentativo di fornire modelli matematici basati su differenti approcci, ed in grado di studiare il problema del cambiamento di fase tenendo conto della complessità dei fenomeni fisici che lo coinvolgono, con particolare riferimento alla convezione innescata dai gradienti di densità nella fase liquida.

Ciò che in genere accomuna i diversi metodi numerici proposti è sostanzialmente il loro basarsi su modifiche delle equazioni di bilancio che governano fenomeni termici e fluidodinamici delle fasi coinvolte, tenendo conto degli effetti meccanici e termici dovuti delle trasformazioni di fase della sostanza studiata.

Tra i diversi metodi adottati, sono risultati senza dubbio di più larga diffusione i metodi detti *entalpici*, nati principalmente per risolvere problemi di cambiamento di fase in conduzione, sono stati facilmente estesi allo studio del fenomeno in presenza di convezione agendo in maniera opportuna sui termini sorgente dell'equazione dell'energia e della conservazione della quantità di moto.

In seguito, a partire dal finire degli anni '80, grazie ai primi lavori di Voeller [20] e Viskanta [35] è stato possibile aprire un ulteriore e importante campo di indagine nello studio della solidificazione/fusione per sostanze che non presentano una temperatura discreta di cambiamento di fase, ampliando quindi il campo di applicabilità degli studi ad un più ampio spettro di casistiche riscontrabili in campo industriale.

Gli anni '90 hanno quindi visto un rapido e prolifico apporto di contributi alla soluzione numerica del problema di cambiamento di fase solido-liquido in presenza di convezione naturale nella fase liquida e formazione di una zona estesa del dominio di calcolo in cui si ha la coesistenza di una fase solida e di una fase liquida, zona convenzionalmente definita *mush region*.

Questi modelli hanno visto inizialmente una prima applicazione a casi sperimentali precedentemente studiati impiegando sostanze a bassi punti di fusione (in particolare miscele di ammoniaca  $\text{NH}_4\text{Cl}$ ). Rientrano tra questi contributi, oltre ai lavori di Voeller e Prakash [20] già citati, anche i contributi di Incropera et al. ([50]-[53]) e Gau e Viskanta [49].

Partendo dai lavori di Viskanta e dalle formulazioni matematiche presentate in quegli anni, Ni e Beckermann [37] hanno quindi fornito ulteriori raffinamenti dei modelli di base occupandosi principalmente di descrivere numericamente i fenomeni di *microsegregazione* che avvengono durante la solidificazione di leghe metalliche.

A fianco alle problematiche di micro segregazione in leghe metalliche, alcuni studiosi si sono invece concentrati sullo studio dei fenomeni di *macrosegregazione* che avvengono per via del trasporto, per effetto dei moti convettivi, di parti di

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

materiale parzialmente solidificate aventi concentrazioni più elevate di uno dei componenti costituenti la lega.

Questo campo di studio si è dimostrato di grande interesse per la previsione dei fenomeni di segregazione inversa in diffusi processi industriali, come ad esempio le colate continue.

Nel corso degli anni 90 e fino ai primi anni dell'ultima decade lo sforzo dei ricercatori si è quindi concentrato sulla descrizione più accurata della regione di cambiamento di fase approcciando il problema secondo due scale diverse.

Se da una parte infatti sono stati proposti modelli a singolo o doppio dominio studiando il moto del fluido nella mushy region basandosi su studi numerici del moto di fluidi in mezzi porosi (Gobin, Nithiarasu, Bennacer), parallelamente un secondo fronte di indagine molto esplorato si è aperto su scala micro strutturale nell'ambito della modellizzazione della formazione e accrescimento dendritico nella solidificazione di leghe metalliche.

La scala dimensionale di questi fenomeni ( $\mu\text{m}$ ) risulta di almeno quattro ordini di grandezza più piccola rispetto alla scala dimensionale di modelli macroscopici sviluppati fino agli anni 90 (cm).

Ad oggi parte degli sforzi si stanno inoltre concentrando sullo sviluppo di strumenti e metodologie di calcolo in grado garantire un trasferimento di informazioni tra risultati numerici raggiungibili da modelli matematici sviluppati per la microscala e descrizioni macroscopiche della mushy region in modelli basati su ipotesi del continuo.

Queste necessità di interfacciamento di formulazioni matematiche e metodi risolutivi nati da due approcci ben distinti presuppone la necessità di sviluppare modelli diversi a seconda delle particolari condizioni di processo, ovvero in funzione delle particolari condizioni al contorno e geometriche del fenomeno indagato, e basandosi sulle caratteristiche del materiale in cambiamento di fase.

Per tale scopo, nell'approccio a problemi di cambiamento di fase tramite metodi numerici, si è dimostrato sempre più importante effettuare delle preliminari analisi di scala del fenomeno, individuando i campi di validità dei modelli impiegati entro precisi intervalli dei valore di alcuni parametri adimensionali ( $Ra$ ,  $Pr$ ,  $Ste$ ) e valutando di volta in volta l'ordine di grandezza di di variabili fisiche del processo come ad esempio la velocità di raffreddamento e i gradienti termici sotto cui avvengono le trasformazioni di fase.

### 1.2 Il problema di Stefan

Si parla comunemente di cambiamento di fase di una sostanza quando si assiste a fenomeni di passaggio di fase solido/liquido o liquido/gassoso in materiali che raggiungono in almeno un punto un ben preciso valore di temperatura, definita temperatura di cambiamento di fase.

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

In presenza di passaggio di fase solido/liquido si individuano due parametri termo fisici caratteristici del fenomeno: la temperatura di fusione/solidificazione  $T_f$  e il calore latente  $L$  necessario a fondere o solidificare una quantità unitaria di massa.

Come già fatto notare in precedenza, ciò che differenzia un passaggio di fase di una sostanza pura è il fatto che la temperatura  $T_f$  assume uno ed un solo valore, a differenza di quanto avviene in sostanze a più componenti dove la transizione di fase avviene per un ben preciso intervallo di temperatura compreso tra la temperatura detta di *solidus*  $T_s$  e la temperatura di *liquidus*  $T_l$ .

Nel caso particolare di solidificazione e fusione di leghe metalliche, all'interno di questo intervallo di temperatura avvengono tutti i fenomeni termo fisici ed energetici che portano alla formazione di una particolare struttura solida in funzione sia dei componenti che costituiscono la lega, sia degli aspetti termodinamici che interessano il processo, ovvero le velocità di raffreddamento, l'orientamento dominante dei gradienti termici, la presenza o meno di particolare centri di nucleazione delle fasi solide.

Limitando l'analisi al cambiamento di fase di sostanze pure, in casi di avanzamento monodimensionale e in condizioni in cui sia possibile trascurare gli effetti dovuti a fenomeni convettivi, è possibile fornire una descrizione matematica del problema di Stefan rappresentato attraverso la seguente formulazione:

$$(\rho_s c_s) \frac{\partial T_s(x, t)}{\partial t} = k_s \frac{\partial^2 T_s(x, t)}{\partial x^2} \quad (1.1)$$

$$(\rho_l c_l) \frac{\partial T_l(x, t)}{\partial t} = k_l \frac{\partial^2 T_l(x, t)}{\partial x^2} \quad (1.2)$$

dove la (1.1) assume validità nelle zone del dominio di calcolo occupate dalla fase solida, la (1.2) invece risulta valida nelle zone occupate dalla fase liquida.

La formulazione matematica del problema si chiude attraverso due ulteriori equazioni:

$$\left[ k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} \right]_{x=s(t)} = \rho_s L \frac{\partial s(t)}{\partial t} \quad (1.3)$$

$$T_s = T_l = T_f \quad (1.4)$$

dove  $s(t)$  è la funzione che descrive l'avanzamento dell'interfaccia nel tempo

La prima condizione di Stefan, rappresentata dall'eq. (1.3), impone un bilancio termico all'interfaccia di cambiamento di fase, tale per cui la differenza tra i flussi termici che attraversano l'interfaccia sia dal lato solido che dal lato liquido è

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

perfettamente bilanciata dall'accumulo o dal rilascio di energia dovuto al passaggio di fase. La seconda condizione di Stefan (eq. (1.4)) impone invece la continuità del profilo di temperatura in corrispondenza dell'interfaccia.

### 1.3 La soluzione analitica di Neumann

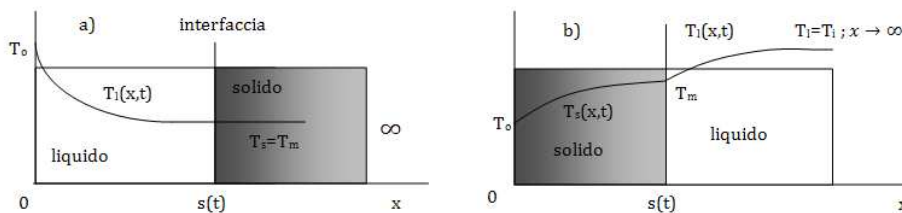
La soluzione analitica del problema di Stefan venne pubblicata solo nel 1912 per opera del matematico Neumann. Il problema matematico esposto da Stefan viene risolto da Neumann integrando le equazioni differenziali (1.1) e (1.2).

Le soluzioni di Neumann sono state quindi formalizzate da Ozisik [3], definendo le soluzioni esatte del sistema di equazioni proposte da Stefan in tre particolari casi di cambiamento di fase:

- solidificazione di una sostanza liquida sottoraffreddata in una regione semi-infinita risolvendo una formulazione a singolo dominio
- fusione di una sostanza solida in un semispazio basandosi su formulazione a doppio dominio
- solidificazione di una sostanza liquida risolvendo una formulazione a doppio dominio

Nei primi due casi il problema è governato esclusivamente dall'equazione (1.2) accompagnata dalle condizioni (1.3) e (1.4), a differenza dell'ultimo caso dove anche l'equazione (1.1) viene risolta.

Per brevità di trattazione, e facendo riferimento ai capitoli successivi, quando si affronteranno numericamente problemi di fusione e solidificazione di sostanze monocomponente in condizioni di mondimensionalità di flusso termico e in regime di sola conduzione, si riportano di seguito le soluzioni analitiche degli ultimi due casi elencati raffigurati in Fig. 1.1:



**Fig. 1.1 Problema di Stefan in un semispazio**



## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

a) *Fusione di una sostanza solida in un semispazio basandosi su formulazione a singolo dominio*

Il problema risulta matematicamente descritto dall'equazione (1.2) nell'intervallo di fase liquida

$$0 < x < s(t), t > 0$$

La condizione iniziale è descritta da:

$$T_1(x, t) = T_0 \text{ per } x=0, t>0$$

e risultano valide le condizioni di Stefan all'interfaccia (1.3) e (1.4).

La descrizione del campo termico può quindi essere ottenuto a meno di una costante di integrazione B, integrando il sistema di equazioni differenziali appena descritto, ottenendo:

$$T_1(x, t) = T_0 + B \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2(\alpha_1 t)^{1/2}}\right) \quad (1.5)$$

Il valore della costante B può essere ricavato imponendo all'equazione 1.x il rispetto della seconda condizione di Stefan all'interfaccia (1.4), ottenendo quindi

$$B = \frac{T_m - T_0}{\operatorname{erf}(\lambda)} \quad (1.6) \quad \text{dove} \quad \lambda = \frac{s(t)}{2(\alpha_1 t)^{1/2}} \quad (1.7)$$

Sostituendo il valore di B così trovato nella (1.5) e sfruttando la prima condizione di Stefan (1.3), si ricava l'equazione trascendente:

$$\lambda e^{\lambda^2} \operatorname{erf}(\lambda) = \frac{c_p(T_0 - T_m)}{L\sqrt{\pi}} \quad (1.8)$$

dove  $\lambda$  è la radice dell'equazione.

Noto  $\lambda$  è possibile tracciare l'avanzamento del fronte di fusione, attraverso la (1.7) opportunamente manipolata:

$$s(t) = 2\lambda(\alpha_1 t)^{1/2} \quad (1.9)$$

e risalire al profilo di temperatura nel dominio attraverso la (1.5) sostituendo la (1.6).

b) *Solidificazione in un semispazio (formulazione a doppio dominio)*

Il problema risulta descritto dalla Fig. 1.1-b) e riguarda la solidificazione monodirezionale di un materiale inizialmente in fase liquida a temperatura

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

uniforme  $T_i$ , e portato a completa solidificazione mantenendo una condizione di temperatura di contorno per  $x=0$  su un valore  $T_0$  inferiore al temperatura di cambiamento di fase.

Il sistema di equazioni che governa il problema è in questo caso composto dalla (1.1) valida per il calcolo di bilancio energetico nella fase solida in formazione da sinistra verso destra nello schema in Fig.1.x, e dalla (1.2) nella zona liquida in riduzione con il progredire del fenomeno.

Le condizioni al contorno del problema risultano essere in questo caso:

$$\begin{aligned} T_s(x, t) &= T_0 && \text{per } x=0, t>0 \\ T_l(x, t) &\rightarrow T_i && \text{per } x \rightarrow \infty, t > 0 \\ T_l(x, t) &= T_i && \text{per } t=0 \text{ e } x>0 \end{aligned}$$

La soluzione analitica prevede che il sistema sia soddisfatto da due equazioni a meno di due diverse costanti di integrazione:

$$T_s(x, t) = T_0 + A \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2(\alpha_1 t)^{1/2}}\right) \quad (1.10) \quad \text{per la fase solida}$$

$$T_l(x, t) = T_0 + B \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2(\alpha_1 t)^{1/2}}\right) \quad (1.11) \quad \text{per la fase liquida}$$

L'inserimento della (1.10) e (1.11) all'interno della condizione di continuità del profilo di temperatura all'interfaccia (1.3), porta ad ottenere:

$$T_0 + A \operatorname{erf}(\lambda) = T_i + B \operatorname{erfc}\left[\lambda \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l}\right)^{1/2}\right] = T_m \quad (1.12)$$

dove  $\lambda$  assume il valore riportato in (1.7) e  $s(t)$  può essere ancora ricavato dalla (1.9).

Dall'equazione (1.12) è quindi possibile ricavare il valore delle due costanti di integrazione trattando il termine  $\lambda$  anch'esso come costante e ottenendo:

$$A = \frac{T_m - T_0}{\operatorname{erf}(\lambda)} \quad (1.13) \quad B = \frac{T_m - T_i}{\operatorname{erfc}[\lambda(\alpha_s/\alpha_l)^{1/2}]} \quad (1.14)$$

Sostituendo quindi queste espressioni nella (1.10) e (1.11) e sfruttando l'equazione di bilancio termico all'interfaccia (1.3), si ottiene la seguente equazione trascendente da cui è possibile ricavare  $\lambda$ :

$$\frac{e^{-\lambda^2}}{\operatorname{erf}(\lambda)} + \frac{k_l}{k_s} \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_l}\right)^{1/2} \frac{T_m - T_i}{T_m - T_0} \frac{e^{-\lambda^2(\frac{\alpha_s}{\alpha_l})}}{\operatorname{erfc}[\lambda(\alpha_s/\alpha_l)^{1/2}]} = \frac{\lambda L \sqrt{\pi}}{c_{p,s}(T_m - T_0)} \quad (1.15)$$

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

noto  $\lambda$ , anche in questo caso, l'avanzamento dell'interfaccia  $s(t)$  può essere calcolato da (1.7) e i profili di temperatura nei due distinti domini attraverso le equazioni (1.10)-(1.11) in cui, al posto delle costanti di integrazione, vengono sostituite le espressioni (1.13) e (1.14).

### 1.4 I metodi entalpici

I metodi entalpici [14]-[15] nascono per la risoluzione del cambiamento di fase in sistemi conduttivi, e sono risultati senza dubbio i metodi di più ampio impiego da parte dei ricercatori, in quanto permettono di svincolarsi dalle condizioni di Stefan.

Introducendo come variabile principale di calcolo l'entalpia  $h$  al posto della temperatura le equazioni (1.1) e (1.2) vengono quindi ad essere sostituite da un bilancio energetico del tipo:

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (1.16)$$

dove la temperatura e l'entalpia risultano legati dalle seguenti relazioni

$$\begin{aligned} T &= \frac{h}{c} & h &\leq cT_f \\ T &= T_f & cT_f &\leq h \leq cT_f + L \\ T &= \frac{h - L}{c} & h &> cT_f + L \end{aligned}$$

Poiché, come già affermato in precedenza, un metodo basato su formulazione entalpica non permette di mantenere il tracciamento diretto dell'interfaccia, le sue applicazioni e implementazioni sviluppate nel corso degli anni lo hanno visto per lo più associato a schemi risolutivi a griglia fissa individuando l'avanzamento dei punti di passaggio di fase basandosi sulla temperatura di cambiamento di fase  $T_f$ .

Per la stessa ragione, su metodi entalpici sono basati tutti i modelli di previsione della solidificazione in sostanze non pure, o leghe, in cui la regione di cambiamento di fase viene vista come zona continua, e il calcolo di temperatura ed entalpia avviene attraverso opportune modifiche della formulazione entalpica sopra riportata, come meglio si vedrà nel Cap1.6.

In ultimo, il metodo entalpico si è affermato come modello più idoneo per una sua estensione dello studio numerico del cambiamento di fase nei casi in cui ci sia presenza di fenomeni di convezione naturale.

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Soprattutto per quello che riguarda i codici di calcolo commerciale, tramite l'aggiunta di un termine advettivo alla (1.16), è possibile estendere il campo di impiego della formulazione entalpica accoppiandola alle tradizionali equazioni di conservazione della quantità di moto, ottenendo, nel caso di una sua generalizzazione ad un dominio a tre dimensioni, un'equazione del tipo:

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}h) - \nabla \cdot (k \nabla T) = 0 \quad (1.17)$$

Come si vedrà in seguito, nel caso di convezione in presenza di cambiamento di fase solido/liquido una particolare attenzione va posta sulla corretta "penalizzazione" dei termini di velocità passando dalla fase liquida a quella solida per tenere conto degli effetti meccanici indotti dalla solidificazione.

### **1.5 Applicazioni dei modelli numerici nello studio di cambiamento di fase di sostanze pure in presenza di convezione naturale**

Sparrow e Patankar nel 1977 presentano [5] un'analisi di cambiamento di fase da solido a liquido di una parete di rivestimento un tubo verticale la cui temperatura iniziale corrisponde alla temperatura di fusione della sostanza. Il processo di fusione studiato ha inizio portando la temperatura della superficie esterna del tubo ad una temperatura maggiore di quella di fusione del rivestimento.

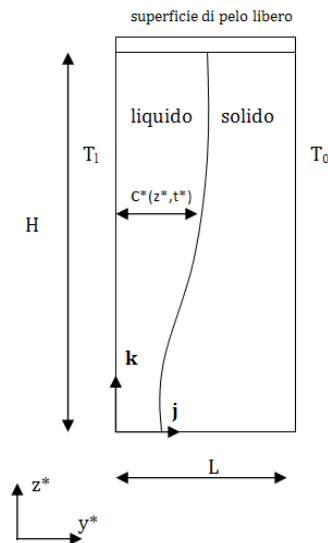
Il problema viene affrontato, risolvendo il sistema completo di equazioni dove, oltre alla risoluzione della formulazione matematica vista nei capitoli precedenti, compaiono anche le equazioni di bilancio della massa e delle quantità di moto.

Il merito principale di Sparrow e Patankar è quello di mostrare per la prima volta i limiti di applicabilità di modelli numerici basati su assunti di regimi di sola conduzione negli studi di cambiamento di fase fino ad allora presentati.

In particolare, nel caso studiato, gli autori presentano una risoluzione del sistema di equazioni attraverso un sistema ad elementi finiti e individuano alcuni precisi limiti di validità dell'assunto di sola conduzione in base al valore assunto dal numero di Rayleigh.

Gobin e Benard nel 1986 propongono [19] uno studio numerico e sperimentale di un processo di fusione in cavità rettangolare in presenza di convezione nella fase liquida, concentrando in particolare l'attenzione di studio sul comportamento del fronte di cambiamento di fase.

Il problema affrontato prevede la presenza in una cavità di altezza  $H$  e larghezza  $L$  di una sostanza a temperatura iniziale uniforme  $T_0$  minore rispetto alla temperatura di fusione  $T_F$ . In un istante temporale iniziale  $t_0$  una delle pareti verticali viene portata a temperatura  $T_1 > T_0$ . Le pareti superiori e inferiori della cavità vengono considerate adiabatiche, e si ipotizza la mancanza di una parete di



**Fig. 1.2 Fusione in cavità rettangolare in presenza di convezione**

contenimento superiore, in modo da permettere l'espansione libera della fase liquida (Fig. 1.2).

Gli studi precedenti avevano già mostrato la fenomenologia del problema studiato, evidenziando una iniziale fase di creazione di uno strato di liquido a ridosso della parete calda in cui prevale un regime di trasferimento del calore per sola conduzione. Con l'accrescere della zona di liquido in formazione si assiste alla graduale comparsa di un regime di moto convettivo e, conseguentemente, per via della non uniformità nella diffusione di calore all'interno del dominio, si osserva una progressiva deformazione dell'interfaccia di cambiamento di fase che tende ad avanzare più rapidamente nella zona superiore della cavità

Il fronte di fusione raggiunge quindi uno stato stazionario quando il flusso termico che giunge all'interfaccia dalla zona di liquido è perfettamente bilanciato da flusso che viene ceduto alla fase solida.

L'approccio impiegato dagli Autori, nell'affrontare numericamente il problema, prevede alcune ipotesi semplificative di base, basate in particolare su considerazioni in merito ad analisi di scala effettuate in precedenti lavori [10], dove si è studiato il fenomeno convezione in cavità.

L'assunto principale su cui basano il loro modello è in particolare il fatto che non vi sia influenza sulla convezione dovuta dal movimento dell'interfaccia di CF.

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Questa ipotesi viene basata principalmente considerando che l'ordine di grandezza della velocità nello strato liquido di parete che si viene formando risulta:

$$v_c \sim \alpha_L \frac{Ra^{\frac{1}{2}}}{H}$$

dove  $H$  è l'altezza della cavità, mentre l'ordine di grandezza della velocità di avanzamento del fronte di fusione, in assenza di conduzione nella fase solida, risulta essere:

$$v_F \sim \alpha_L \frac{Ste \rho_l Ra^{1/4}}{\rho_s H}$$

Nel caso studiato da Gobin e Benard il rapporto tra le due velocità risulta essere pari a  $10^3$ .

La seconda ipotesi sotto la quale viene studiato il problema è quella di descrivere il processo di fusione mediante una successione di istanti quasi stazionari, in corrispondenza dei quali, il moto del fluido nella zona liquida viene calcolato risolvendo l'equazioni del moto in forma stazionaria.

Questo assunto è basato su alcune analisi sui tempi di scala del fenomeno, osservando in particolare che il tempo caratteristico per il raggiungimento dello stato stazionario nello strato liquido in formazione,  $t_c = HL/\alpha_L Ra^{1/4}$ , risulta essere piccolo se confrontato con la scala temporale del cambiamento di fase, il cui limite inferiore, in assenza di conduzione nella fase solida può essere ottenuto da:

$$t_F = HL/0.33\alpha_L Ste^* Ra^{1/4} \text{ dove } Ste^* = Ste \rho_l/\rho_s$$

Nel campo di applicabilità del problema affrontato,  $t_F$  risulta essere di un ordine di grandezza maggiore rispetto a  $t_c$  che a sua volta risulta essere dello stesso ordine di grandezza del tempo necessario per l'innescò della convezione, ottenibile da  $t_0 = 4.5H^2/\alpha_L Ste^* Ra^{1/2}$

Sotto le due ipotesi sopra descritte, il problema viene quindi affrontato numericamente da Gobin e Benard considerando un regime convettivo stazionario nella zona liquida e un regime transitorio puramente conduttivo nella zona solida.

Il sistema di equazioni che descrive il problema nella zona del dominio in fase liquida, risulta quindi essere il seguente:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1.18)$$

$$(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla p + Gr\theta_L \mathbf{k} \quad (1.19)$$

$$(\mathbf{v} \cdot \nabla)\theta_L = \frac{1}{Pr} \nabla^2 \theta_L \quad (1.20)$$

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Dove  $\mathbf{v}$  è il termine di velocità adimensionalizzato secondo la legge  $v^*H/v$ .  
Nella zona solida del dominio risulta:

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial t} = \frac{\alpha_s}{\alpha_l \text{Pr}} \nabla^2 \theta_s \quad (1.21)$$

Il tracciamento del fronte di fusione viene effettuato estendo l'equazione di bilancio termico all'interfaccia vista finora nel caso di monodimensionalità, attraverso la sua generalizzazione ad un caso bidimensionale, tramite la formulazione seguente:

$$(k^* S_L \nabla \theta_s - \nabla \theta_L) \cdot \mathbf{n} = \rho^* \frac{\text{Pr}}{\text{Ste}} \frac{\partial s}{\partial t} \quad (1.22)$$

dove la derivata di  $s$  rispetto a  $t$  rappresenta la velocità di avanzamento del fronte di fusione, lungo la direttrice  $\mathbf{n}$ ,  $k^*$  è il rapporto tra la conduttività della fase solida e quella della fase liquida  $k_s/k_L$ ,  $S_L$  è invece il rapporto tra i valori estremi di temperatura nelle due fasi, ovvero:

$$S_L = \frac{T_F - T_0}{T_1 - T_F}$$

Sotto le ipotesi fatte, la soluzione del campo di moto convettivo in un dato istante viene ottenuta assumendo che la posizione dell'interfaccia sia nota.

A partire dall'istante in cui l'interfaccia comincia ad allontanarsi dalla posizione di verticalità che assume nei primi secondi del fenomeno, la parte di cavità in fase liquida non risulta quindi più assumere una forma rettangolare. Per ricondursi quindi ad un dominio di calcolo rettangolare ove risolvere le equazioni del moto all'interno della fase liquida Gobin e Benard operano rielaborando le equazioni (1.18)-(1.19) attraverso il seguente passaggio di coordinate:

$$\begin{cases} Z = z \\ Y = y/C(Z) \end{cases}$$

Dove  $C(Z) = c^*(z^*)/L$  risulta essere la distanza dell'interfaccia dalla parete calda in corrispondenza dell'altezza  $z$  in forma adimensionale.

In maniera del tutto analoga, attraverso un passaggio di coordinate viene trasformata l'equazione che governa il regime conduttivo transitorio nella fase solida (1.21).

La procedura di risoluzione del sistema di equazioni ottenuto prevede tre step:

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

- I) la risoluzione disaccoppiata delle equazioni di convezione in un determinato istante assumendo la zona liquida come una cavità non rettangolare
- II) impiego del campo di temperatura stazionario nella zona liquida per calcolare i flussi termici all'interfaccia
- III) risoluzione accoppiata dell'equazione dello spostamento dell'interfaccia e del regime transitorio conduttivo nella fase solida (1.22) in un determinato time step

L'inizializzazione del calcolo viene effettuata attraverso un modello mono-dimensionale puramente conduttivo che si assume valido fino a quando non si ha l'insorgenza di fenomeni convettivi nella fase liquida. In quell'istante viene quindi ottenuta una prima soluzione delle equazioni che governano la convezione.

I metodi numerici impiegati nella risoluzione delle equazioni prevedono l'impiego di una formulazione ad elementi finiti di tipo ibrido proposta da Patankar e Spalding [17] qui applicata su volumi di controllo ottenuti con una griglia di elementi rettangolari di passo variabile, più raffinata nella zona di parete calda rispetto alla restante zona della cavità.

Una volta raggiunta la soluzione stazionaria del regime convettivo nella zona liquida, assimilata, in un determinato istante temporale di calcolo, ad una cavità rettangolare interamente occupata da liquido, viene calcolato il flusso termico lungo l'interfaccia di cambiamento di fase. La distribuzione dei flussi termici così calcolata viene a questo punto considerata costante rispetto all'istante di calcolo ed impiegata per risolvere l'equazione di spostamento dell'interfaccia e la conduzione nella zona di solido. Questa procedura presume che la velocità di avanzamento del fronte di fusione sia nota per risolvere la conduzione nel solido e, allo stesso tempo, che il campo di temperatura sia noto per risolvere l'equazione di bilancio dell'energia all'interfaccia da cui si calcola lo spostamento del fronte di fusione. Per risolvere il sistema di equazioni accoppiato si ricorre quindi ad una procedura di tipo iterativo.

Viene in particolare sottolineato dagli Autori come la risoluzione di un regime transitorio tramite una suddivisione del fenomeno in una sequenza di istanti temporali di calcolo assunti a regime stazionario, permette di individuare due tipologie di time step: un istante di calcolo definito di *cambiamento di fase*, in cui il trasporto di calore per convezione verso l'interfaccia viene considerato costante e che può essere a sua volta diviso in intervalli temporali di calcolo più piccoli (time step di *conduzione*) per risolvere la conduzione nel solido con maggiore accuratezza.

Una volta risolta la conduzione per un dato time step di cambiamento di fase, viene calcolata una nuova posizione dell'interfaccia e una nuova distribuzione della temperatura nella fase solida. Il problema convettivo viene in questo modo reinizializzato in un dominio geometricamente diverso costituito dalla zona liquida



## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

di cavità definita al nuovo step di cambiamento di fase e la procedura viene reiterata fino al raggiungimento di una posizione stazionaria dell'interfaccia.

I risultati numerici raggiunti attraverso il modello descritto sono stati validati da Benard e Gobin attraverso un'esperienza sperimentale descritta in [19] attraverso un cella di controllo delimitata da due piastre verticali termocontrollate, riempita da una sostanza a basso punto di fusione (n-octodecano) ed interamente circondata da materiale isolante.

Il grado di affidabilità dei risultati del modello è stato valutato mediante la misura della temperatura in più punti della cavità risalendo quindi alla distribuzione termica del materiale durante la fusione e quindi allo stato di avanzamento dell'interfaccia.

### 1.6 I metodi a griglia fissa per lo studio del cambiamento di fase

I metodi a griglia mobile, un cui esempio è stato illustrato nel Cap. 1.5 sono stati impiegati da alcuni ricercatori, esclusivamente in applicazioni numeriche per lo studio della solidificazione/fusione di sostanze pure, in cui quindi l'interfaccia di cambiamento di fase è univocamente definita e consente di operare su formulazioni a doppio dominio, ripartendo il dominio di calcolo in una fase liquida ed una solida, ed una zona di interfaccia su cui effettuare un bilancio energetico.

Diverso è invece il caso affrontato quando la sostanza oggetto di studio risulta essere una lega o una miscela in cui la zona di cambiamento di fase occupa una regione estesa del dominio di calcolo.

Per lo studio di questa tipologia di sistemi in cambiamento di fase, la quasi totalità delle applicazioni numeriche ha visto il ricorso a schemi a griglia fissa, su cui applicare formulazioni di tipo entalpico viste nei capitoli precedenti.

Voller e Swaminathan, forniscono in [21] un'esauriente rassegna delle tecniche a griglia fissa per lo studio di tre diverse classi di sistemi in cambiamento di fase:

- a) Sistemi ad interfaccia discreta di cambiamento di fase
- b) Sistemi a struttura cristallina come ad esempio nel caso di formazioni dendritiche colonnari o a grani equiassici nel caso di solidificazione/fusione di leghe metalliche
- c) Sistemi con perfetta mescolanza della fase solida e liquida in cui si identifica una zona *continua* di cambiamento di fase

E' bene qui sottolineare come all'interno di questa classificazione si possano avere casi particolari, come ad esempio nel caso della solidificazione direzionale di leghe metalliche (b), caratterizzata dalla formazione di strutture piane colonnari, un sistema che dal punto di vista numerico può essere assimilato ad un CF con interfaccia distinta di separazione tra zona liquida e zona solida.

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Nella maggior parte di fenomeni riscontrabili in applicazioni industriali la formazione micro strutturale è di tipo equiassico o comunque con formazione dendritica e penetrazione della fase liquida nelle zone interstiziali della matrice solida.

In questi casi, come si approfondirà in seguito, si ricorre ad approssimazioni numeriche impiegate per la terza classe di fenomeni, assimilando la zona di CF ad un mezzo poroso con permeabilità isotropa o anisotropa a seconda del fenomeno.

La classe (c) sopra enunciata può essere quindi vista come un caso particolare della classe (b) in cui la regione di cambiamento di fase assume caratteristiche strutturali omogenee.

Come sottolineato da Voller e Swaminathan, basandosi su questa classificazione generale del fenomeno, si intuisce come non sia possibile identificare un metodo universalmente valido per lo studio di sistemi in cambiamento di fase solido/liquido. La scelta di un modello matematico e di uno schema numerico risolutivo è quindi spesso affidata al ricercatore in base alla tipologia del fenomeno studiato e al fine dell'indagine, privilegiando certi aspetti piuttosto che altri.

Avendo già analizzato lo studio attraverso metodi entalpici del CF di sostanze pure, l'attenzione di questo capitolo si concentrerà sugli schemi a griglia fissa per la risoluzione dei fenomeni visti al punto (b) e (c) della precedente classificazione.

Questi metodi si basano quindi su ipotesi di bilancio energetico locale dell'entalpia per le due distinte fasi (solida e liquida) che occupano il volume di controllo.

La soluzione numerica viene quindi ad essere ricavata tramite integrazione delle seguenti equazioni locali di bilancio sul singolo volume di controllo assumendo che il cambiamento di fase avvenga a temperatura costante  $T=T_s=T_l$ :

$$\frac{\partial(g_s H_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (g_s H_s \mathbf{u}_s) - \nabla \cdot (g_s k_s \nabla T) + \Theta_s = 0 \quad (1.23)$$

$$\frac{\partial(g_l H_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (g_l H_l \mathbf{u}_l) - \nabla \cdot (g_l k_l \nabla T) + \Theta_l = 0 \quad (1.24)$$

dove con il pedice  $[-]_s$  e  $[-]_l$  si indicano rispettivamente la fase solida e la fase liquida,  $k$  è la conduttività termica,  $g$  è la frazione di fase in volume,  $\mathbf{u}$  è la velocità della fase,  $H$  è l'entalpia di fase opportunamente mediata sul volume di controllo. I termini sorgente  $\Theta_s$  e  $\Theta_l$  chiudono le equazioni di bilancio della formulazione generale di Stefan tenendo conto del bilancio energetico tra tutte le interfacce tra fase solida e fase liquida nella zona in transizione di fase.

Avendo in questo caso assunto isoterma il CF all'interno del volume di controllo, l'entalpia della singola fase può essere ricavata dalle:

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

$$H_s = \int_{T_{\text{ref}}}^T \rho_s c_s d\theta \quad (1.25)$$

$$H_s = \int_{T_{\text{ref}}}^T \rho_l c_l d\theta + \rho_l L \quad (1.26)$$

dove  $\rho$  è la densità e  $L$  il calore latente di solidificazione.

Assumendo la compresenza di sola fase liquida e fase solida (escludendo quindi un terza fase di eventuale porosità all'interno della mushy) si ha che  $g_l=1-g_s$ , ed è possibile esprimere la (1.23) e (1.24) in una unica formulazione, passando in questo modo ad una formulazione a singolo dominio in cui si annullano i termini sorgente e che assume la forma:

$$\frac{\partial(H)}{\partial t} + \nabla \cdot (g_s H_s \mathbf{u}_s + g_l H_l \mathbf{u}_l) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (1.27)$$

Nel caso in cui si trascurino gli effetti della convezione dovuti a variazioni di densità all'interno della zona di cambiamento di fase e nella fase liquida l'equazione (1.27) diventa:

$$\frac{\partial(H)}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (1.28)$$

dove  $k$  è la conduttività della miscela secondo la formula:  $k=g_s k_s + g_l k_l$ , mentre l'entalpia della miscela è data da:

$$H = g_s \int_{T_{\text{ref}}}^T \rho_s c_s d\theta + g_l \int_{T_{\text{ref}}}^T \rho_l c_l d\theta + \rho_l g_l L \quad (1.29)$$

dove  $T_{\text{ref}}$  è una arbitraria temperatura di riferimento.

In assenza di generazione di calore dovuto a dissipazioni per effetti viscosi e/o comprimibilità del fluido, l'equazione (1.28) risulta essere valida in tutti i casi di studio di sistemi mono e bicomponenti in cambiamento di fase in presenza di sola conduzione. La definizione di un'entalpia di miscela (1.29) permette quindi di generalizzare all'intero dominio di calcolo la formulazione (1.27)-(1.28), aggiungendo al sistema di equazioni un'ulteriore incognita, ovvero il valore di frazione di fase  $g_l$  o  $g_s$ . In generale la frazione liquida in volume e la complementare frazione solida dipendono dalla natura del fenomeno di solidificazione. In caso di presenza di un forte sottoraffreddamento infatti,  $g_l$  può essere funzione della temperatura, della velocità di raffreddamento, della velocità di solidificazione e nucleazione dei grani.

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

In leghe a più componenti inoltre, la frazione di solido/liquido locale risulta dipendente dalla eventuale presenza di fenomeni di trasporto del soluto, fenomeno che prende il nome di *micro segregazione* quando avviene per diffusione, e *macrosegregazione* se avviene grazie ai moti advettivi presenti nella fase liquida.

Come si approfondirà nei successivi capitoli, nel corso degli anni un fronte di ricerca ha focalizzato la propria attenzione sui modelli analitico-numeriche in grado di fornire descrizioni attendibili della zona di cambiamento di fase tenendo conto degli effetti dovuti ai fenomeni appena descritti.

In questo capitolo si intende semplificare il problema assumendo nota la legge di dipendenza della frazione di fase in funzione della sola temperatura:

$$g_i = F(T)$$

Questa assunzione di base è giustificata dal fatto che, nella maggior parte di sistemi in cambiamento di fase, il sottoraffreddamento è di piccola entità e la segregazione è principalmente governata dai fenomeni convettivi.

Infatti, come si potrà vedere nei risultati riportati al Cap. 2.2, uno degli obiettivi della attività di studio esposte in questa trattazione è proprio l'analisi della solidificazione/fusione di sostanze binarie impiegando formulazioni che escludono gli effetti diffusivi alla base di fenomeni di micro-segregazione, cercando di tenere comunque in conto, nello studio della convezione nella fase liquida, degli effetti dovuti alla presenza di possibili gradienti di soluto nella zona prossima all'interfaccia.

In questo capitolo si farà quindi riferimento ad una dipendenza della frazione di liquido secondo una formulazione generalmente nota  $F(T)$  il cui andamento può essere quello riportato in Fig. 1.3.

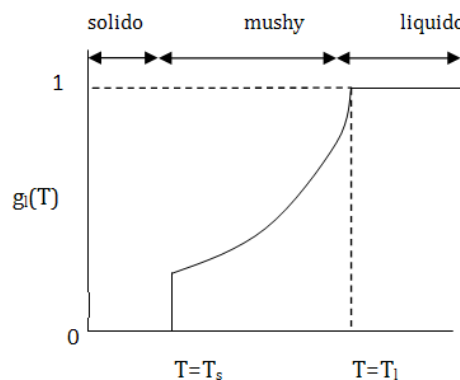


Fig. 1. 3 Funzione  $g_i(T)$

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Gli aspetti che è importante evidenziare riguardo all'andamento riportato in figura sono:

- I) la variazione di  $g_l$  in funzione della temperatura, all'interno della mushy region non è lineare
- II) la curva presenta una discontinuità in corrispondenza dell'interfaccia di fase tra mushy e solido
- III) una seconda discontinuità si registra in corrispondenza dell'interfaccia liquido/mushy che, nel caso delle leghe metalliche, può essere ricondotta al punto di completa formazione di fase  $\alpha$  (dendritica) e inizio della formazione della fase eutettica.

### 1.6.1 Modelli basati sulla capacità termica apparente

L'equazione (1.28) che governa il problema, presenta caratteristiche di non linearità dove compaiono due variabili incognite,  $H$  e  $T$ , che sono una funzione dell'altra. Impiegando la derivata dell'entalpia rispetto alla temperatura è possibile definire un calore specifico apparente :

$$c^A = \frac{dH}{dT} \quad (1.30)$$

Oppure, impiegando l'equazione (1.29) :

$$c^A = c_{vol} + \delta H \frac{dg_l}{dT} \quad (1.31)$$

dove

$$c_{vol} = g_s \rho_s c_s + g_l \rho_l c_l \quad (1.32)$$

e

$$\delta H = \int_{T_{ref}}^T (\rho_l c_l - \rho_s c_s) d\theta + \rho_l L \quad (1.33)$$

rappresenta la differenza tra l'entalpia della fase liquida e quella della fase solida  $H_l - H_s$ .

Notando inoltre che:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{dH}{dT} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.34)$$

E sostituendo nella (1.28), si ottiene:

$$c^A \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (1.35)$$

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Questa formulazione è formalmente identica all'equazione di Fourier dove compare un termine  $c^A$  di capacità termica apparente e viene solitamente impiegata nei codici numerici in quanto consente la risoluzione del problema nella sola variabile  $T$ , lasciando ad un secondo algoritmo il calcolo del termine capacitivo  $c^A$  tramite la (1.30) o (1.31).

In merito alla risoluzione delle due equazioni appena citate, occorre segnalare due elementi di criticità che impediscono la generalizzazione di questa formulazione dal punto vista analitico, in particolare:

1. Come è possibile osservare dal diagramma in Fig. 1.3, la curva di frazione di liquido  $g_l(T)$  può presentare delle discontinuità in corrispondenza delle quali le equazioni (1.30) e (1.31) perdono di validità per la definizione del termine  $c^A$ .
2. La capacità termica apparente  $c^A$  è funzione sia dello spazio che del tempo. Ciò richiede opportune strategie risolutive del termine capacitivo nel momento in cui si ricorre ai metodi numerici

### 1.6.2 Metodi basati sul termine sorgente di calore latente

Un metodo alternativo all'introduzione di un termine non lineare nella formulazione del calore specifico è quello di introdurre un termine sorgente non lineare nell'equazione di trasporto del calore.

Partendo dalla formulazione generale dell'entalpia della miscela (1.29) è possibile esprimere la derivata dell'entalpia rispetto al tempo secondo l'espressione:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = c_{vol} \frac{\partial T}{\partial t} + \delta H \frac{\partial g_l}{\partial t} \quad (1.36)$$

Se si considera  $g_l$  non dipendente dal tempo e sostituendo la (1.36) nella (1.28) si ottiene:

$$c_{vol} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + S \quad (1.37)$$

Dove il termine sorgente  $S$  assume il valore:

$$S = -\delta H \frac{\partial g_l}{\partial t} \quad (1.38)$$

L'equazione (1.37) possiede una forma adatta ad essere risolta con approcci numerici, in particolare con quelli basati su metodi alle differenze o volumi finiti, presentando ancora due variabili incognite, temperatura  $T$  e frazione di liquido  $g_l$  che è funzione della distribuzione della temperatura. La sua risoluzione necessita pertanto di opportune strategie numeriche che permettano di aggiornare ad ogni iterazione il campo  $g_l$ .

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

### 1.6.3 Metodi basati sull'entalpia totale

Dall'equazione (1.29) è possibile ottenere:

$$\nabla T = \frac{\nabla H}{c_{vol}} - \delta H \frac{\nabla g_l}{c_{vol}} \quad (1.39)$$

Sostituendo la (1.39) nella (1.28) si ottiene una formulazione in cui compare la sola entalpia in tutti i termini:

$$\frac{\partial}{\partial t}(H) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla H) + \nabla \cdot (\Gamma \delta H \nabla g_l) \quad (1.40)$$

dove  $\Gamma = k/c_{vol}$

### 1.6.3 Metodi numerici

In questa trattazione si concentrerà l'attenzione sugli schemi risolutivi dei due modelli visti nei cap 1.6.1 e 1.6.2, basati su metodi agli elementi finiti che saranno i metodi numerici di riferimento impiegati nei casi applicativi riportati nel Cap. 2 e nel Cap. 3.

Volendo generalizzare il problema rappresentato dalle equazioni (1.35) e (1.37) è possibile ricordarsi ad una espressione del tipo:

$$c \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (\alpha \nabla \phi) + Q \quad (1.39)$$

Dove  $\phi$  è la variabile incognita,  $c$  il calore specifico,  $\alpha$  il coefficiente di diffusione e  $Q$  un termine sorgente.

Le equazioni (1.35), (1.37) e (1.39), viste nei precedenti capitoli possono quindi ricondursi alla formulazione generale (1.39), secondo le seguenti sostituzioni:

*Formulazione di base (1.28):*

$$\phi=H; c=1; \alpha=0; Q = \nabla \cdot (k \nabla T)$$

*Formulazione basata sulla capacità termica apparente (1.35):*

$$\phi=T; c = c^A = c_{vol} + \delta H \frac{dg_l}{dT}; \alpha=k; Q=0$$

*Formulazione basata sul termine sorgente (1.37):*

$$\phi=T; c=c_{vol}; \alpha=k; Q = S = -\delta H \frac{\partial g_l}{\partial t}$$

*Formulazione basata sull'entalpia totale (1.40):*

$$\phi=H; c=1; \alpha=\Gamma=k/c_{vol}; Q = \nabla \cdot (\Gamma \delta H \nabla g_l)$$

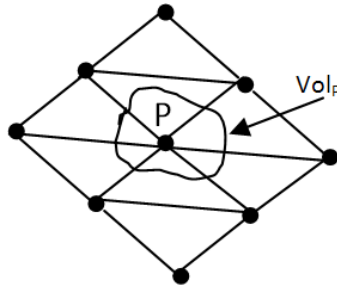


Fig. 1.4

In tutte le formulazioni si ha che le caratteristiche della miscela sono date da:

$$H = g_s H_s + g_l H_l$$

$$k = g_s k_s + g_l k_l$$

$$c_{vol} = g_s \rho_s c_s + g_l \rho_l c_l$$

Volendo risolvere l'equazione (1.39) tramite un metodo agli elementi finiti nel caso bidimensionale, il dominio di interesse viene ad essere discretizzato attraverso una griglia fissa di elementi, che possono essere triangoli, quadrilateri o poliedri. In corrispondenza del generico nodo P dell'elemento di griglia (Fig. 1.4) la variabile  $\phi$  che compare nella (1.39) viene approssimata sull'intero dominio di calcolo attraverso la formula;

$$\phi(x, y, t) = \mathbf{N}(x, y) \cdot \boldsymbol{\phi}(t) \quad (1.40)$$

dove  $\mathbf{N}$  è il vettore delle funzioni di forma  $N_p$  e  $\boldsymbol{\phi}$  è il vettore delle variabili incognite. Le funzioni di forma sono assunte in maniera tale che  $N_p = 1$  nel nodo P, e sia  $0 < N_p < 1$  in una zona definita attorno al nodo P dagli elementi di griglia che condividono il nodo.  $N_p = 0$  in tutti gli altri punti.

Impiegando il metodo dei residui pesati di Galerkin [16], la discretizzazione nello spazio della formula (1.39) assume la forma matriciale seguente:

$$\mathbf{C}(\boldsymbol{\phi}) \frac{d}{dt} \boldsymbol{\phi} + \mathbf{K}(\boldsymbol{\phi}) = \mathbf{F}(\boldsymbol{\phi}) \quad (1.41)$$

Impiegando una procedura di avanzamento nel tempo secondo il metodo di Eulero basato sul time step precedente, l'equazione (1.41) diventa:



## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

$$(\mathbf{C} + \Delta t \mathbf{K}) \boldsymbol{\phi} = \mathbf{C} \boldsymbol{\phi}^{\text{old}} + \mathbf{F} \quad (1.42)$$

Dove  $\Delta t$  è il passo temporale, e l'apice [ ]<sup>old</sup> indica la matrice dei valori di variabile calcolati all'istante precedente, mentre tutti gli altri termini che compaiono nella (1.42) sono riferiti all'istante temporale corrente.

Tralasciando i contributi forniti dalle condizioni al contorno i termini  $\mathbf{C}$  e  $\mathbf{K}$  si possono esprimere in forma indicizzata nel modo seguente:

$$C_{ij} = \int_R c N_i N_j dR \quad (1.43)$$

$$K_{ij} = \int_R \alpha N_i N_j dR \quad (1.44)$$

Una strategia solitamente usata nel risolvere i modelli di cambiamento di fase tramite metodi ad elementi finiti è quella di ricondursi ad una formulazione detta a blocchi che prevede di ricondurre la matrice  $\mathbf{C}$  ad una matrice diagonale così costituita:

$$c_{ij} = 0 \quad \text{se } i \neq j$$

$$c_{ij} = c_i \int_R N_i \quad \text{se } i = j$$

L'impiego di questa formulazione prevede di associare ad ogni nodo un volume di controllo  $\text{Vol}_p$  dentro il quale il valore della variabile coincide con il valore nel nodo  $P$ .

Le diverse formulazioni viste precedentemente (1.35) (1.37) (1.39), vengono quindi ad essere discretizzate dalle equazioni (1.41) e (1.42), dove le matrici  $\mathbf{C}$  e  $\mathbf{K}$  si ottengono sostituendo ai valori di  $\alpha$  e  $c$  presenti nella (1.44) e (1.43) i valori previsti dalla specifica formulazione, mentre la matrice  $\mathbf{F}$ , trascurando ancora le condizioni al contorno, assume la seguente forma:

*Formulazione di base (1.28):*

$$\mathbf{F} = -\Delta t \mathbf{K}^* \mathbf{T}$$

dove  $\mathbf{T}$  contiene i valori di temperatura nei nodi, mentre gli elementi di  $\mathbf{K}^*$  sono dati da:

$$K_{ij}^* = \int_R k \nabla N_i \nabla N_j dR$$

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

*Formulazione basata sulla capacità termica apparente (1.35):*

$$\mathbf{F}=0$$

*Formulazione basata sul termine sorgente (1.37):*

$$\mathbf{F} = \mathbf{M}(g_i^{\text{old}} - g_i)$$

Dove  $\mathbf{M}$  è una matrice diagonale con elementi:

$$M_{pp} = \text{Vol}_p H_p$$

$$\text{e } \text{Vol}_p = \int_R N_p dR$$

*Formulazione basata sull'entalpia totale (1.40):*

$$\mathbf{F} = -\Delta t \mathbf{K}^+ g_i$$

Dove  $g_i$  rappresenta il valore di frazione liquida nei nodi della griglia di calcolo e gli elementi della matrice  $\mathbf{K}^+$  sono dati da:

$$K_{ij}^+ = \int_R \{(k\delta H)/c_{\text{vol}}\} \nabla N_i \nabla N_j dR$$

La procedura di assemblaggio più comune prevede di esprimere le equazioni integrali totali (1.43) e (1.44) come somma degli integrali calcolati sul singolo elemento assemblando quindi le equazioni elemento per elemento.

### 1.6.4 Metodi risolutivi

Per brevità di trattazione vengono trattate in questo capitolo unicamente le strategie risolutive della formulazione (1.41) - (1.42) basata sulla capacità termica apparente, rimandando a [21] gli approfondimenti sugli schemi risolutivi delle altre formulazioni. Questa scelta è giustificata dal fatto che questa formulazione sarà quella impiegata nei casi applicativi di studio esposti nel Cap 2.

La maggiore criticità da affrontare nella risoluzione numerica di questa formulazione risiede nell'individuare un'approssimazione numerica sufficientemente accurata per descrivere i rapidi cambiamenti del termine  $c^A$  nell'equazione (1.35). Per meglio comprendere come può essere ottenuta una approssimazione numerica di  $c^A$  si può prendere in considerazione il caso limite in cui il cambiamento di fase avviene a temperatura costante  $T=T_m$ .

Le considerazioni fatte su questo specifico caso possono essere facilmente estese al caso generale in cui la dipendenza di  $g_i$  in funzione di  $T$  assume un andamento come quello in Fig. 1.3.

Nel caso quindi di cambiamento di fase in condizione isoterme, in corrispondenza della temperatura di cambiamento di fase  $T_m$  la funzione  $g_i$

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

presenta un salto. Per ovviare a questo problema si introduce un artificio che consenta di mantenere la continuità della curva  $g(T)$ , imponendo in prossimità del valore di  $T_m$  la seguente formulazione:

$$\begin{aligned} g_i &= 1 && \text{Se } T > T_m + \varepsilon \\ g_i &= \frac{T - T_m + \varepsilon}{2\varepsilon} && \text{Se } T_m - \varepsilon < T \leq T_m + \varepsilon \\ g_i &= 0 && T_m - \varepsilon \leq T \end{aligned} \quad (1.45)$$

Dove  $\varepsilon$  è un piccolo intervallo di temperatura.

A causa della rapida variazione di  $dg_i/dT$ , il valore della capacità termica apparente  $c^A$  ottenuta sostituendo la formulazione (1.45) nell'equazione (1.35), presenta un picco in corrispondenza del valore di temperatura  $T_m$ .

Se non vengono adottati opportuni accorgimenti, la presenza questo picco può indurre ad errori nella soluzione numerica in quanto l'impiego di un particolare passo temporale di calcolo può portare a saltare il nodo in corrispondenza del quale si ha il picco di  $c^A$  perdendo in questo modo il contributo del calore latente.

L'unica strategia per ovviare a questa possibilità di errore è quella di scegliere in maniera oculata il valore più idoneo di  $\varepsilon$ , e il passo di calcolo più opportuno nel discretizzare il dominio geometrico e il tempo.

Una regola che si è dimostrata valida nelle applicazioni di questa formulazione, è quella di diminuire la dimensione del passo temporale e spaziale, aumentando il valore di  $\varepsilon$ , riducendo in questo modo il rischio di che sia saltato il picco in corrispondenza del quale si ha il contributo del calore latente salti un nodo della griglia di calcolo. Bonacina e Comini in [11] introducono una particolare strategia di calcolo secondo la quale almeno due o tre nodi vengono mantenuti entro l'intervallo di temperatura di cambiamento di fase.

Questi approcci richiedono comunque o un elevato costo computazionale per via delle piccole dimensioni del passo temporale da adottare, oppure approssimazioni poco realistiche della fisica del problema dovendo estendere eccessivamente la zona di cambiamento di fase.

Questi problemi possono in parte essere ridotti adottando approssimazioni numeriche nella definizione di  $c^A$ . Lo scopo di queste strategie è quello di permettere scelte efficaci del passo temporale e spaziale, evitando di lavorare sull'intervallo di cambiamento di fase  $\varepsilon$ .

Voller e Swaminathan riportano in [21] le diverse strategie di approssimazione del termine  $c^A$  reperibili in letteratura, classificandole in due categorie:

1. Approssimazioni basate su medie nello spazio

$$c^A = \left[ \frac{\nabla H \nabla H}{\nabla T \nabla T} \right]^{0.5} \quad (1.46)$$

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

dove  $\nabla H$  e  $\nabla T$  sono approssimate numericamente nello stesso modo

2. Approssimazioni basate su medie nel tempo:

$$c^A = \frac{H - H^{old}}{T - T^{old}} \quad (1.47)$$

In caso di integrazione nel tempo secondo lo schema di Eulero, l'equazione matriciale (1.42) è non lineare e quindi richiede per la risoluzione il ricorso ad una strategia di tipo iterativo. Invece, attraverso uno schema di integrazione nel tempo di tipo esplicito le equazioni discretizzate (1.41) e (1.42) diventano lineari e possono essere risolte in un solo step di calcolo.

In generale, l'impiego di una approssimazione numerica per descrivere  $c^A$  permette di ottenere soluzioni accurate per piccoli valori di  $\epsilon$

In conclusione di questo capitolo è possibile effettuare una considerazione finale sulle formulazioni basate sulla capacità termica apparente; benchè questi metodi siano stati qui presentati in applicazioni in cui il cambiamento di fase avviene in condizioni isoterme, si evidenzia come questo metodo sia maggiormente affidabile quando si studiano sostanze con un intervallo esteso di temperatura di cambiamento di fase.

Come si vedrà nei risultati proposti al Cap.2, queste considerazioni troveranno ampia conferma quando si cercherà di studiare il comportamento di sostanze pure attraverso formulazioni come quella qui esposta, che prevedono necessariamente di assumere un intervallo definito di temperatura in cui avviene il cambiamento di fase.

### 1.7 Modelli advettivi-diffusivi per lo studio del cambiamento di fase in presenza di convezione con metodi a griglia fissa

Esempi applicativi di studio del cambiamento di fase in presenza di convezione come quello trattato nel Cap. 1.3 adottano metodi numerici a doppio dominio ad interfaccia mobile e richiedono una soluzione disaccoppiata delle equazioni di diffusione e convezione, e, basandosi su formulazioni di tipo esplicito, risolvono prima il campo di moto, tracciando l'interfaccia e calcolano, attraverso metodi entalpici, il nuovo campo termico.

Voller e Prakash in [20] propongono nel 1986 un modello di studio del cambiamento di fase solido-liquido basato su metodi numerici a griglia fissa discussi nel cap 1.6, in cui, oltre alla propagazione diffusiva del calore si tenga in conto anche dei fenomeni convettivi che avvengono nel liquido e nella mushy-region.

Gli Autori in particolare concentrano l'attenzione sulla modellazione numerica del campo di moto all'interno della zona di mush riconducendo il comportamento

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

della fase liquida nella zona di cambiamento di fase al comportamento di un flusso in un mezzo poroso, un fenomeno già ampiamente studiato negli anni precedenti.

Il cambiamento di fase viene in questo caso studiato mediante una formulazione entalpica a capacità termica apparente imponendo una dipendenza della frazione di solido dalla temperatura secondo quanto visto nella (1.45), ovvero:

$$f_s(T) = \begin{cases} 0, & T \geq \varepsilon \\ \frac{\varepsilon - T}{2\varepsilon}, & \varepsilon > T \geq -\varepsilon \\ 1, & T < -\varepsilon \end{cases} \quad (1.48)$$

Identificando quindi un intervallo di temperatura di cambiamento di fase:

$$T - \varepsilon \leq T \leq T + \varepsilon$$

Nonostante l'applicazione preveda una formulazione come la (1.48) il modello proposto da Voller risulta comunque valido in tutti i casi in cui sia nota la dipendenza della frazione di solido  $f_s$  in funzione della temperatura.

Gli effetti di propagazione della temperatura e il cambiamento di fase associato vengono descritti dal modello di Voller secondo i metodi visti nel capitolo precedente.

Le differenze rispetto a quanto visto in passato interessano invece le equazioni del moto, dove viene introdotto un termine sorgente che ha il preciso scopo di ricondurre il comportamento del liquido nella mushy ad un moto di tipo darcyano ipotizzando la matrice solida presente come mezzo filtrante.

Per tenere conto delle disomogeneità del mezzo poroso così descritto e della variabilità della sua permeabilità in funzione del tempo si introduce un termine  $\lambda$  che assume il valore dato dalla frazione di liquido, ovvero:

$$\lambda = \begin{cases} 0 & \text{nella zona solida} \\ 0 < \lambda < 1 & \text{nella mushy} \\ 1 & \text{nella fase liquida} \end{cases}$$

La velocità viene quindi ad essere filtrata tramite l'espressione:

$$\mathbf{u} = \lambda \mathbf{u}_1 \quad \text{assumendo in tutto il dominio i seguenti valori:}$$

$$\mathbf{u} = \begin{cases} \mathbf{u}_1 & \text{nella fase liquida} \\ (1 - f_s) \mathbf{u}_1 & \text{nella mushy} \\ 0 & \text{nella fase solida} \end{cases}$$

Secondo tale formulazione le equazioni che governano il problema vengono ad essere le seguenti:

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

*Equazione di conservazione della massa:*

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (1.49)$$

*Equazione di conservazione dell'energia:*

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) - \nabla \cdot (\alpha \nabla h) + S_h = 0 \quad (1.50)$$

*Equazione di conservazione del momento della quantità di moto:*

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} u) = \nabla \cdot (\mu \nabla u) - \frac{\partial p}{\partial x} + S_x \quad (1.51a)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} v) = \nabla \cdot (\mu \nabla v) - \frac{\partial p}{\partial y} + S_y + S_b \quad (1.51b)$$

Dove  $p$  è la pressione,  $\rho$  è la densità,  $\mu$  è la viscosità del liquido

I termini sorgente  $S_x$ ,  $S_y$  che compaiono nell'equazione del moto servono a modificare la formulazione che governa il moto, nella mushy region che viene quindi ad essere descritto dalla legge di Darcy:

$$\mathbf{u} = -\frac{K}{\mu} \nabla p \quad (1.52)$$

Dove  $K$  è il valore attribuito alla permeabilità del mezzo ed è funzione della porosità  $\lambda$ . Quando la porosità decresce, la permeabilità e la velocità relativa del liquido diminuiscono tendendo a zero in corrispondenza dei punti della mushy region completamente solidi.

Questo comportamento viene modellato da Voller e Prakash definendo i due termini sorgente  $S_x$  e  $S_y$  nella seguente maniera:

$$S_x = -A u \quad S_y = -A v$$

dove  $A$  va da zero a valori maggiori man mano che la frazione solida  $f_s$  va da 0 in corrispondenza della fase liquida a 1, nella fase solida.

Gli effetti introdotti da questi termini sorgenti nella formulazione matematica di base del moto sono i seguenti:

- Nella zona liquida i valori dei termini sorgente  $S_y$  e  $S_x$  assumono valore nullo e le equazioni di conservazione del momento sono riferite alla velocità effettiva del liquido

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

- Nella mushy il valore di  $A$  aumenta diventando dominante rispetto agli altri termini della (1.50) che governano il transitorio convettivo e diffusivo riducendo la formulazione (1.50) alla legge di Darcy (1.51)
- In corrispondenza delle zone a frazione solida  $f_s=1$  i termini sorgente dominano su tutti gli altri termini portando a zero il valore di velocità

In applicazioni di questo modello a problemi in cui non c'è mush region perché il CF avviene in condizioni isoterme la legge di incremento di  $A$  non necessita di particolari attenzioni.

In presenza di mushy esiste una regione assimilata ad un mezzo poroso, la cui permeabilità viene modellata in base alle caratteristiche fisiche del fenomeno di solidificazione. Uno dei modelli più diffusi secondo cui viene definito il termine  $A$  secondo la formulazione di Darcy è l'equazione di Carman-Kozeny

$$\nabla p = -C \frac{(1 - \lambda)^2}{\lambda^3} \mathbf{u} \quad (1.52)$$

Secondo questa formulazione il termine  $A$  può assumere la forma:

$$A = -C \frac{(1 - \lambda)^2}{(\lambda^3 + q)} \quad (1.53)$$

dove il valore di  $C$  dipende dalla morfologia del mezzo poroso.

Il termine sorgente  $S_b$  introdotto nella (1.50b) è termine di galleggiamento impiegato per innescare la convezione naturale nella cavità. Assumendo infatti valide le ipotesi di Boussinesq, ovvero che la densità è costante in tutti i termini dell'equazione (1.50) eccetto nel termine sorgente che assume forma di contributo alle forze di galleggiamento secondo l'espressione:

$$S_b = \rho g \beta (T - T_{rif}) \quad (1.54)$$

Dove  $\beta$  è il coefficiente di espansione termica.

Il termine sorgente  $S_h$  può essere ricavato dalla formulazione entalpica generale (1.27) in cui si sostituisce il valore di entalpia totale:

$$H = cT + \Delta H$$

Ricavando dalla (1.49) e (1.50)

$$S_h = \frac{\partial \rho \Delta H}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u} \Delta H) \quad (1.55)$$

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Quando si è in presenza di cambiamento di fase in condizioni isoterme, il termine advettivo assume valore nullo, nel caso di presenza di mushy region non può invece essere trascurato.

Voller e Prakash presentano in [20] un'applicazione del loro modello al caso di solidificazione in cavità quadrata bidimensionale ad alto numero di Prandtl ( $Pr=10^3$ ), risolvendo il sistema di equazioni proposte tramite un metodo ai volumi finiti.

I risultati trovati verranno in seguito presi a riferimento da altri Autori per attività di validazione dei propri contributi, pur se non sono stati supportati da attività di confronto sperimentale.

### **1.8 Modelli per lo studio del cambiamento di fase in sostanze binarie basati sulla fase di miscela solido-liquida con formulazione doppiamente diffusiva**

Finora sono stati affrontati i modelli matematici sviluppati per descrivere il cambiamento di fase di sostanze pure e sostanze a più componenti genericamente definite che sono caratterizzate dal presentare una mushy region entro l'intervallo di temperatura di cambiamento di fase.

Ciò che accomuna queste formulazioni è il loro fondarsi su ipotesi del mezzo continuo, descrivendo quindi la regione di mush come un mezzo poroso con permeabilità isotropa trascurando in questo modo la vera natura della zona di solidificazione, la cui morfologia dipende strettamente dalla natura della sostanza in cambiamento di fase.

Bennon e Incropera [33], partendo dalle formulazioni precedentemente viste, tentano di generalizzare le equazioni che governano i fenomeni di trasporto di calore, quantità di moto, e concentrazione di specie in sistemi in cambiamento di fase, fornendo [34] un esempio applicativo della formulazione proposta attraverso lo studio di un fenomeno di solidificazione di una miscela binaria in cavità rettangolare.

Le equazioni proposte da Incropera e Bennon, basano la loro formulazione su tre principi teorici su cui si fonda lo studio dei sistemi multicomponente:

1. I diversi componenti della miscela sono visti come sottosistemi isolati
2. le caratteristiche della miscela sono matematicamente correlate alle proprietà dei singoli componenti
3. il comportamento medio della miscela è governato da equazioni analoghe a quelle che governano i singoli componenti

I principi appena enunciati prevedono che la miscela studiata sia perfettamente inerte e quindi la loro applicazione a sistemi multifase e multicomponente richiede particolari attenzioni.



## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Infatti, mentre le fasi possono essere considerate isolate, i diversi componenti sono legati a livello atomico e sono considerati quasi sempre inscindibili.

Quest'ultima considerazione porta a considerare non più valido il secondo principio sopra enunciato per le miscele non inerti se non introducendo delle formulazioni aggiuntive in grado di descrivere i legami costituenti la miscela su scala atomica. Per la gran parte di applicazioni queste relazioni possono essere ricavate dai diagrammi di fase o da relazioni di tipo empirico.

Nella formulazione proposta in [33] le fasi (solida e liquida) dei diversi componenti vengono considerate distinte e separate e costituenti il mezzo continuo ma le singole non vengono considerate omogenee nella composizione chimica.

Ogni punto del mezzo continuo costituente il dominio può quindi essere occupato simultaneamente da parti di massa con presenza al proprio interno di più fasi  $k$  costituite da più componenti  $\alpha$ .

In questo modo si definiscono due velocità; una velocità di fase  $\mathbf{v}_k$  data dalla media delle velocità dei singoli componenti ed una velocità assoluta del singolo componente costituente la fase,  $\mathbf{v}_k^\alpha$ . La velocità di diffusione del singolo componente  $\alpha$  presente nella fase  $k$  è quindi data da:  $\mathbf{v}_k^\alpha - \mathbf{v}_k$ .

La formulazione su ipotesi di mezzo continuo richiede inoltre delle relazioni tra le densità e le frazioni in volume. Definendo quindi  $\bar{\rho}_k^\alpha$  e  $\mathbf{g}_k^\alpha$  rispettivamente la densità effettiva e la frazione in volume del componente  $\alpha$  presente nella fase  $k$ , la densità parziale della fase  $k$  si ottiene da:

$$\bar{\rho}_k^\alpha = \mathbf{g}_k^\alpha \rho_k^\alpha \quad (1.56)$$

In maniera analoga, se si definiscono  $\rho_k$  e  $\mathbf{g}_k$ , rispettivamente la densità e la frazione in volume effettivi della fase  $k$ , la densità parziale della fase  $k$  è data da:

$$\bar{\rho}_k = \mathbf{g}_k \rho_k \quad (1.57)$$

La frazione in massa del componente  $\alpha$ , nella fase  $k$  è data da:

$$f_k^\alpha = \frac{\bar{\rho}_k^\alpha}{\bar{\rho}_k} \quad (1.58)$$

e la frazione in massa della fase  $k$  è data da:

$$f_k = \frac{\bar{\rho}_k}{\sum_k \bar{\rho}_k} \quad (1.59)$$

Nel caso di miscele inerti è possibile riferirsi a semplici sommatorie per ottenere la densità totale sommando densità di fase di ogni singolo componente.

Questa sommatoria non è invece valida nel caso di miscele non inerti dove entrano in gioco relazioni interatomiche più complesse.

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Per tenere conto di queste relazioni si fa ricorso a formulazioni di tipo empirico, basate in gran parte sulle leggi che descrivono i diagrammi di fase, riconducendo quindi il problema a un insieme di volumi di controllo occupati da componenti considerati inerti.

Un'ulteriore considerazione da farsi riguarda la frazione volumetrica di fase  $g_k$  che viene descritta come funzione continua nello spazio senza precludere la possibilità di una sua applicazione a sistemi con intervalli discreti di cambiamento di fase. L'assunto valido in ogni caso è che tutte le fasi siano perfettamente complementari, ovvero valga la relazione:

$$\sum_k g_k = 1 \quad (1.60)$$

Partendo dalle formulazioni appena descritte Bennon ed Incropera, descrivono quindi delle leggi di conservazione che governano i fenomeni diffusivi e advettivi che avvengono durante il CF solido-liquido di una sostanza binaria [34] in una cavità bidimensionale.

Le leggi di conservazione di massa, quantità di moto ed energia, viste nei capitoli precedenti vengono quindi ad essere rielaborate per tenere conto delle differenti fasi e delle concentrazioni dei singoli componenti secondo le formulazioni appena descritte ((1.56)-(1.60)).

Inoltre rispetto agli approcci numerici fino ad allora presentati viene presa in considerazione un'ulteriore legge di conservazione che si riferisce alla concentrazione del singolo componente (soluto) della miscela.

La formulazione viene quindi ad essere descritta dalle seguenti equazioni:

*Conservazione della massa:*

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (1.61)$$

*Equazione di conservazione del momento della quantità di moto:*

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} u) = \nabla \cdot \left( \mu_1 \frac{\rho}{\rho_1} \nabla u \right) - \frac{\mu_1 \rho}{K \rho_1} (u - u_s) - \frac{\partial p}{\partial x} \quad (1.62a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} v) = \nabla \cdot \left( \mu_1 \frac{\rho}{\rho_1} \nabla v \right) - \frac{\mu_1 \rho}{K \rho_1} (v - v_s) - \frac{\partial p}{\partial y} \quad (1.62b)$$

$$+ \rho g [\beta_T (T - T_e) + \beta_s (f_1^\alpha - f_{1,e}^\alpha)]$$

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

*Equazione di conservazione dell'energia:*

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} h) = \nabla \cdot \left( \frac{k}{c_s} \nabla h \right) + \nabla \cdot \left[ \frac{k}{c_s} \nabla (h_s - h) \right] \\ - \nabla \cdot [\rho (h_1 - h)(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s)] \end{aligned} \quad (1.63)$$

*Equazione di conservazione della specie:*

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho f^\alpha) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} f^\alpha) = \nabla \cdot (\rho D \nabla f^\alpha) + \nabla \cdot [\rho D \nabla (f_1^\alpha - f^\alpha)] - \\ \nabla \cdot [\rho (f_1^\alpha - f^\alpha)(\mathbf{v} - \mathbf{v}_s)] \end{aligned} \quad (1.64)$$

I termini che compaiono nelle (1.61) (1.62) (1.63) (1.64) relativi a densità,  $\rho$ , velocità,  $\mathbf{v}$ , entalpia,  $h$ , e frazione in massa della concentrazione di soluto,  $f^\alpha$ , riferiti della miscela sono definiti secondo quanto descritto nelle equazioni (1.56)-(1.60) nel seguente modo:

$$\mathbf{v} = f_s \mathbf{v}_s + f_1 \mathbf{v}_1 \quad (1.65)$$

$$h = f_s h_s + f_1 h_1 \quad (1.66)$$

$$f^\alpha = f_s f_s^\alpha + f_1 f_1^\alpha \quad (1.67)$$

Dove l'entalpia di fase che compare nella (1.66) è data da:

$$h_k = \int_0^T c_k dT + h_k^0 \quad (1.68)$$

In maniera analoga la conduttività termica della miscela e il coefficiente di diffusione della miscela si ottengono da:

$$k = g_s k_s + g_1 k_1 \quad (1.69)$$

$$D = f_1 D_1^\alpha \quad (1.70)$$

Le condizioni sotto le quali si ritengono valide le equazioni (1.61)-(1.64) sono le seguenti:

- condizioni di miscela satura  $g_s + g_1 = 1$
- viscosità laminare costante e regime di tipo laminare nella fase liquida

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

- densità di fase costante eccetto che nei termini di galleggiamento della (1.62) (ipotesi di Boussinesq)
- condizioni locali di equilibrio termodinamico ( $T=T_k$ )
- diffusione trascurabile nella fase solida ( $D_s^g = 0$ )
- la fase solida è considerata indeformabile priva di tensioni interne
- la regione di mushy è assimilata ad un mezzo poroso con permeabilità isotropa
- calore specifico e la conduttività termica sono considerati costanti e non dipendenti dalla temperatura.

L'entalpia della fase solida e della fase liquida può essere quindi espressa tramite la (1.68), secondo le seguenti espressioni:

$$h_s = c_s T \quad (1.71)$$

$$h_l = c_l T + [(c_s - c_l)T_e + h_f] \quad (1.72)$$

Dove si assume che:

$$h_s|_T = 0 \quad (h_l - h_s)|_{T=T_c} = h_f$$

L'assunto di miscela satura, di una fase solida priva di tensioni interne, e di una fase solida impermeabile, presume l'assenza di una terza fase (possibile porosità) e necessita di un'ulteriore condizione tale per cui  $\rho_s = \rho_l$  e quindi presume alla base un'uguaglianza delle frazioni in massa delle fasi:  $g_k = f_k$ .

Senza questa ipotesi, la formazione di una eventuale terza fase di porosità andrebbe a violare la condizione di saturazione della miscela ( $g_s + g_l = 1$ ) nel caso in cui  $\rho_s > \rho_l$ , e violerebbe l'ipotesi di assenza di tensioni nella fase solida, nel caso in cui  $\rho_l > \rho_s$ .

Una semplificazione delle equazioni di conservazione può essere effettuata se si assume la fase solida priva di moto ( $\mathbf{v}_s = 0$ ).

Una descrizione accurata della permeabilità della regione bifasica in cambiamento di fase richiede considerazioni approfondite in merito alla particolare morfologia della struttura di solidificazione della miscela.

Nell'applicazione del modello al caso in esame in [34], la permeabilità viene assunta variabile in funzione della frazione liquida in volume secondo l'equazione di Kozeny-Carman:

$$K = K_0 \left[ \frac{g_l^3}{(1 - g_l)^2} \right] \quad (1.73)$$

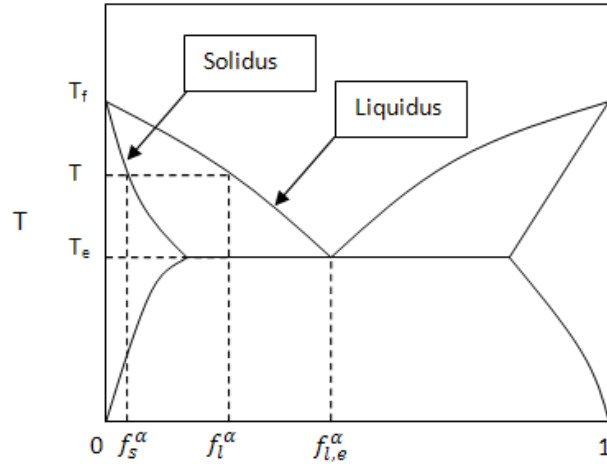


Fig. 1. 4 Diagramma di fase e regola della leva

dove  $K_0$  è una costante che dipende dalle caratteristiche morfologiche specifiche della regione multifase.

Nella fase completamente solida ( $g_s=0$ ) e nella fase completamente liquida ( $g_l=1$ ), l'equazione (1.73) assume i valori limite, rispettivamente  $K=0$  e  $K = \infty$ .

L'equazione (1.73) è generalmente considerata valida per flussi in regime laminare e per zone con frazione volumetrica di liquido  $g_l < 0.5$ .

Diventa quindi più incerta la sua corretta applicazione nelle zone della mushy immediatamente a ridosso della linea di liquidus dove il flusso risulta più vicino a condizioni di moto libero e dove quindi risulta difficilmente stimabile l'effetto penalizzante fornito dal valore di permeabilità definito dalla (1.73) che compare nella (1.62).

Il sistema delle equazioni di conservazione (1.61)-(1.64) viene quindi ad essere chiuso da ulteriori equazioni costitutive che coinvolgono le frazioni in massa delle due fasi  $f_k$  e le frazioni in massa dei diversi componenti della singola fase  $f_k^\alpha$ .

Assumendo condizioni di equilibrio locale, facendo riferimento al diagramma di fase di fig.4 è possibile ottenere le seguenti relazioni:

$$f_s = \frac{1}{1 - k_p} \left[ \frac{T - T_l}{T - T_f} \right] \quad (1.74)$$

$$f_s^\alpha = \left[ \frac{k_p}{1 + f_s(k_p - 1)} \right] f^\alpha \quad (1.75)$$

$$f_l^\alpha = \left[ \frac{1}{1 + f_s(k_p - 1)} \right] f^\alpha \quad (1.76)$$

Dove  $T_l$  è la temperatura di liquidus corrispondente a  $f^\alpha$ ,  $T_f$  è la temperatura di fusione per  $f^\alpha \rightarrow 0$ , e il coefficiente di ripartizione sotto l'ipotesi di equilibrio locale è ottenuto dal rapporto tra le pendenze della curva di liquidus e solidus  $k_p = m_l/m_s$ .

L'assunzione di equilibrio locale non preclude l'esistenza di condizioni di non equilibrio alla scala macroscopica. La redistribuzione macroscopica della specie per trasporto advettivo e diffusivo viene regolata dall'Eq. (1.64), da cui si ottiene il valore di  $f^\alpha$ .

### 1.9 Classificazione dei modelli a basati sulla fase di miscela solido-liquida

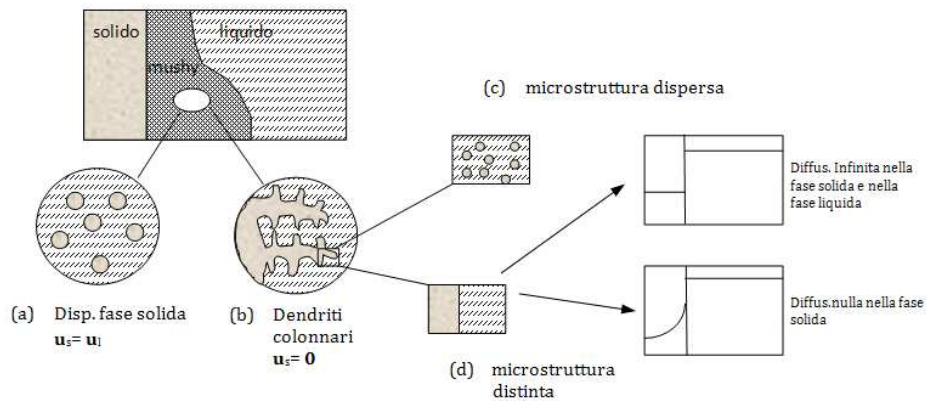
Le formulazioni trattate nel Cap. 1.7 (Voller e Prakash) e nel Cap. 1.8 (Bennon ed Incropera), rappresentano due esempi di modellazione numerica del cambiamento di fase in cui le equazioni che governano il problema sono valide su tutto il dominio di calcolo.

Determinando le caratteristiche di miscela in base alle formulazioni viste nel Cap 1.8 è possibile ricondurre anche la zona di cambiamento di fase a ad un mezzo continuo ipotizzando che le trasformazioni di fase avvengano in condizioni di equilibrio termodinamico locale, trattando la mush region da un punto di vista macroscopico.

Voller e Brent forniscono in [22] una valida classificazione dei modelli a singolo dominio basati sull'introduzione di una miscela solido-liquida.

Ciò che gli Autori sottolineano è come approcci basati su una sola formulazione di tipo macroscopico necessiti di opportuni accorgimenti per descrivere fenomeni che avvengono a livello microscopico nell'interazioni tra le singole interfacce di cambiamento di fase la cui morfologia e fenomenologia di processo interessa dimensioni ben più piccole (10-100  $\mu\text{m}$ ), rispetto alle dimensioni medie dei volumi di controllo impiegati nei modelli a singolo dominio (10<sup>-2</sup>-10<sup>-3</sup> m).

Partendo da queste considerazioni Voller e Brent introducono alcune importanti classificazioni della tipologia del fenomeno di solidificazione in base alla morfologia della mushy sia su scala macroscopia che su quella microscopica. Secondo la classificazione proposta è possibile identificare su scala *macroscopica* due tipologie di mushy, definendo:



**Fig. 1.5 Classificazione dei modelli basati su ipotesi di miscela solido-liquida**

- a- zone di cambiamento di fase con fasi solide completamente disperse nella fase liquida e con valori uguali di velocità assoluta delle due fasi:  $v_s = v_l$ . Questo schema corrisponde a ciò che avviene all'interno di sostanze vetrose e nelle paraffine e, entro certi limiti, può descrivere anche la solidificazione equiassica delle leghe, quando non siano presenti gradienti termici orientati secondo una direzione prevalente rispetto ad un'altra
- b- zone di cambiamento di fase in cui la matrice solida è ben distinta dalla fase liquida, come ad esempio nel caso di solidificazione colonnare nelle leghe metalliche

La categoria (b) può a sua volta essere suddivisa secondo ciò che avviene su scala *microscopica* in termini di diffusione dei diversi componenti della sostanza nelle due fasi.:

- c- si può ancora una volta ipotizzare su scala microstrutturale una rappresentazione di matrice solida dispersa nella fase liquida definendo una concentrazione media della miscela ottenuta in base alla concentrazione all'interno delle due fasi:  $\bar{C} = f_s C_s + f_l C_l$
- d- in alternativa si può rappresentare la microstruttura secondo due fasi distinte, separate da una interfaccia discreta di demarcazione. In questo caso è possibile ipotizzare un trasporto per diffusione infinita dei componenti all'interno delle fasi che porta ad ottenere nel volume di controllo, seguendo la regola della leva una composizione media:  $\bar{C} = f_s C_s + f_l C_l$ .

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Si può altresì ipotizzare che non vi sia diffusione all'interno della fase solida che risulta quindi più ricca in soluto nelle zone prossime all'interfaccia. Questo fenomeno può essere descritto mediante la formulazione di Sheil, per la quale  $\bar{C} = \int C_s + f_l C_l$

In base a questa classificazione generale è possibile quindi caratterizzare le formulazioni a singolo dominio fino ad ora affrontate a seconda della tipologia di fenomeno che si intende studiare.

Facendo riferimento da adesso in poi alle equazioni (1.49)-(1.52), in cui compaiono i termini sorgente  $S_x; S_y; S_b; S_h$  è possibile definire per ogni modello il termine che descrive nel modo più corretto il comportamento della fase solida e della fase liquida nella regione di loro compresenza.

Alla formulazione vista al Cap. 1.7 , si aggiunge inoltre l'equazione di conservazione della specie vista in modelli doppiamente diffusivi (1.64), che può essere scritta nella forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} C) = \nabla \cdot (D \nabla C) + S_c \quad (1.77)$$

dove compare un ulteriore termine sorgente  $S_c$ .

Nel primo caso (modello di mushy (a)) l'ipotesi di perfetta diffusione della fase solida all'interno della fase liquida permette di introdurre delle caratteristiche della mushy ottenute dalle caratteristiche delle singole fasi ovvero indicando con  $[-]^+$ , la generica caratteristica termofisica della mushy, si avranno i parametri seguenti di viscosità,  $\mu$ , coefficiente di diffusione del soluto,  $D$ , conduttività termica  $k$ :

$$\mu^+ = \mu_{\text{eff}} = \mu_s g_s + \mu_l g_l \quad (1.78)$$

$$D^+ = \rho_s g_s D_s + \rho_l g_l D_l / k \quad (1.79)$$

$$k^+ = k_s g_s + k_l g_l \quad (1.80)$$

Si definisce quindi caratteristiche di diffusione mediante una viscosità apparente della miscela ottenute mediando le caratteristiche delle due fasi.

L'introduzione di questa  $\mu_{\text{eff}}$  permette di descrivere in maniera corretta il moto del sistema all'interno della mushy imponendo un elevato valore di  $\mu_s$ .

In questo modo nelle zone in cui  $g_s$  diventa maggiore di  $g_l$  la velocità raggiunge valori vicini allo zero corrispondenti al moto nullo nella fase solida.

La conservazione del soluto nel modello (a) viene ottenuta ipotizzando il sistema in equilibrio termodinamico e assumendo che l'interfaccia di CF sia omogeneamente distribuita all'interno della mushy e la legge che lega la concentrazione tra le fasi sia quella ricavata dalla regola della leva  $C_s = k C_l$ .



## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Questo permette di esprimere la (1.77) all'interno dell' mushy in funzione della sola incognita  $C^*=C_s$ , assumendo come termine sorgente nella (1.77):

$$S_c = -\frac{\partial}{\partial t} \left[ \left( \frac{1}{k} - 1 \right) \rho f_l C_s \right] - \nabla \cdot \left[ \left( \frac{1}{k} - 1 \right) \rho f_l \mathbf{v} C_s \right] \quad (1.81)$$

L'ipotesi di perfetta disperisione della fase solida nella liquida permette infine di annullare i termini di scambio energetico nel momento in cui si sommano le equazioni formulate su due distinte regioni (solida e liquida) per ottenere un unico set di equazioni valido in ogni punto del dominio di calcolo, ottenendo:

$$S_x = S_y = 0$$

Il termine sorgente  $S_h$  nell'equazione dell'energia (1.50) assume il valore dato dal (1.55) in cui viene sostituito il valore di velocità  $\mathbf{v}=\mathbf{v}_l=\mathbf{v}_s$ :

$$S_h = -\frac{\partial}{\partial t} (\rho f_l \delta H) - \nabla \cdot (\rho f_l \mathbf{v} \delta H) \quad (1.82)$$

Il problema viene infine chiuso mediante la formulazione che lega temperatura, frazione in massa di liquido e concentrazione di soluto basata sulla regola della leva:

$$T = \frac{T_l - (1 - f_l)(1 - k)T_f}{[1 - (1 - f_l)(1 - k)]} \quad (1.83)$$

$$T_L = T_f - (T_f - T_e) \frac{C_{mis}}{C_e} \quad (1.84)$$

dove  $T_l$ ,  $T_f$ ,  $T_e$  sono rispettivamente la temperatura di liquidus, di fusione e eutettica riportate nel diagramma di fig.,  $C_e$  è la composizione eutettica della lega e  $C_{mis} = f_l C_l + f_s C_s$  è la composizione della miscela solido-liquida.

Nel modello (b) si è in presenza invece di una fase solida distinta dalla fase liquida che si trova in moto con velocità  $\mathbf{v}_s \neq \mathbf{v}_l$

Un caso particolare che può essere descritto da questo modello è quello riscontrabile nella solidificazione dendritica colonnare che avviene nelle leghe metalliche quando la solidificazione avviene in condizioni estremamente controllate e quando vi è una direzione principale del gradiente termico che comanda il raffreddamento.

In questo caso particolare la fase solida si considera a velocità nulla  $\mathbf{v}_s=0$  ed attraversata dal fluido con velocità  $\mathbf{v}=f_l \mathbf{v}_l$ .

L'assunto di una struttura colonnare ha validità su scala macroscopica, mentre nella scala microscopica la maniera in cui si schematizza l'interazione tra fase

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

solida e fase liquida a livello microstrutturale comporta differenze sostanziali nei due modelli (c) e (d) sopra descritti.

Ciò che accomuna le due formulazioni è l'assunto di una velocità nulla della fase solida  $\mathbf{v}_s=0$ .

Questo assunto richiede particolari accorgimenti per garantire la condizione di continuità del materiale e la consistenza del modello matematico nella mushy potendo quindi assumere la pressione della fase liquida uguale a quella della fase solida.

Per entrambi i modelli ((c) e (d)) si dimostra valida l'analogia proposta da Bennon ed Incropera nell'associare la regione di mush ad un mezzo continuo poroso secondo la formulazione di Darcy. Sotto le ipotesi già viste nel capitolo precedente i termini sorgente assumono la forma:

$$S_x = - \left[ K_0 \frac{(1 - g_l^2)}{g_l^3} \frac{\rho}{\rho_l} \right] u \quad (1.85)$$

$$S_y = - \left[ K_0 \frac{(1 - g_l^2)}{g_l^3} \frac{\rho}{\rho_l} \right] v \quad (1.86)$$

Inserendo questi termini sorgente nelle equazioni (1.51), la formulazione diventa a alla (1.62) dove  $u_s=v_s=0$ . Inoltre nel caso in cui si assuma una densità costante le (1.85) e (1.86) si riconducono alla (1.53).

Per descrivere invece i fenomeni di trasporto del soluto che avvengono durante un accrescimento colonnare della fase solida si ricorre ad un bilancio del soluto nel volume di controllo secondo una formulazione simile a quella visto su scala macroscopica (1.77), applicata nell'ipotesi di miscela solido-liquida:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C_{\text{mis}}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} C_l) = \nabla \cdot (\rho_s g_s D_s \nabla C_s + \rho_l g_l D_l \nabla C_l) \quad (1.87)$$

Ciò che differenzia questa equazione da quella predentemente vista risiede nel valutare la composizione di miscela  $C_{\text{mis}}$  basandosi su una media su un volume di controllo definito su scala microscopica, definito dalla somma di un volume  $V_s$ , occupato da fase solida ed un volume  $V_l$ , occupato da fase liquida.

Il termine di concentrazione di miscela  $C_{\text{mis}}$  viene quindi ad essere espresso dalla formula generale

$$C_{\text{mis}} = \frac{\int \rho_l C_l dV_l + \int \rho_s C_s dV_s}{\rho V} \quad (1.88)$$

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

I due approcci di schematizzazione della solidificazione colonnare, per matrice solida dispersa (c) o per interfaccia discreta (d), sono del tutto analoghi per quanto riguarda i parametri che descrivono la mushy su scala macroscopica e differiscono proprio nella formulazione del trasporto del soluto a livello microstrutturale.

Nel caso (c) il termine  $C_{mix}$  calcolato dalla (1.88) si ottiene ipotizzando una dispersione completa della fase solida in quella liquida ottenendo in tutti i punti della mushy:

$$C_{mis} = f_l C_l + f_s C_s \text{ dove } C_s = k C_l$$

L'equazione di conservazione del soluto può ancora essere scritta secondo una formulazione a singola fase (miscela) come la (1.77) dove  $C^+ = C$  e  $D^+ = \rho_s g_s D_s + \rho_l g_l D_l / k$

La viscosità e la conduttività delle mushy si ottengono da:

$$\mu^+ = \mu_l \frac{\rho}{\rho_l}$$

$$k^+ = k_s g_s + k_l g_l$$

I termini sorgente  $S_h$  ed  $S_c$  possono ancora essere calcolati in base alla (1.82) e (1.81) e le relazioni tra temperatura e frazione liquida (1.83) risultano valide anche per il modello (c).

Nello schema microstrutturale previsto dallo schema (d) (regione solida distinta dalla regione liquida) il termine  $C_{mis}$  che compare nella (1.87) può essere calcolato tramite due metodi diversi, in base al meccanismo di trasporto del soluto che si ritiene più adatto a descrivere il fenomeni di microsegregazione che avvengono su scala microscopica:

- una prima ipotesi prevede di assumere su scala microscopica una diffusione infinita del soluto sia nella fase liquida che nella fase solida. Questo assunto corrisponde a ritenere valida la legge costitutiva fornita dalla regola della leva, ipotizzando quindi condizioni di equilibrio fra tutte le fasi solide e tutte le fasi liquide e concentrazioni uniformi nelle due fasi
- sotto la seconda ipotesi si assume invece una diffusione infinita nel liquido e una diffusione nulla nella fase solida in accordo con l'equazione di Scheil. Questa condizione rispecchia quanto avviene dal punto di vista metallurgico in un'ampia casistica di fenomeni di solidificazione di leghe metalliche. In base alla legge di Scheil il profilo di distribuzione del soluto risulta uniforme nella fase liquida e invece con profilo curvo nella fase solida (Fig. 5). La mancata diffusione della specie nella fase solida fa sì che la contrazione di fase in ogni punto del solido non possa più variare una volta terminata la solidificazione.

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Poichè sotto la prima ipotesi si assume la perfetta dispersione del soluto attraverso la validità della regola della leva, è possibile ricondurre la legge di conservazione della concentrazione di soluto sotto le ipotesi di validità dello schema (a), ritenendo quindi ancora valide le equazioni (1.87)-(1.88).

Per descrivere matematicamente lo schema microstrutturale previsto dalla seconda ipotesi occorre invece modificare il termine sorgente che compare nella (1.77) definendo:

$$S_c = \frac{\partial}{\partial t}(\rho(1 - f_l)C_l) - \rho k_p C_l \frac{\partial(\rho f_s)}{\partial t}$$

Mentre, la relazione tra la temperatura e la concentrazione di fase risulta essere:

$$T = T_f - (T_f - T_e) \frac{C_l}{C_e}$$

### 1.10 Modelli a doppia fase basati su metodi di media delle variabili locali

Come già affermato in precedenza i modelli trattati nei precedenti capitoli sono accomunati dal trattare la regione di mush come una terza fase (miscela solido-liquida) su cui vengono applicate le formulazioni valide su scala macroscopica nelle rispettive fasi.

Questo approccio comporta necessariamente il ricorso a ulteriori equazioni che permettano la chiusura perfetta del problema matematico permettendo di tenere in conto, nelle equazioni di macroscopiche di bilancio, anche di fenomeni che avvengono a livello microstrutturale.

Come visto queste equazioni aggiuntive si basano sui fondamenti teorici di base della metallurgia attraverso il ricorso a modelli interpretativi dei diagrammi di fase binari, mediante note formulazioni come la regola della leva o di Scheil.

La validità di queste formulazioni è strettamente vincolata da ipotesi di equilibrio termodinamico e chimico locale che, nei fenomeni di solidificazione comuni in campo industriali, risulta essere un'assunzione non sempre adeguata.

Infatti, spesso, i fenomeni di solidificazione di leghe metalliche nei processi industriali avviene in condizioni di non equilibrio, con forti gradienti di concentrazione di specie nel solido e in presenza di forti sottoraffreddamenti della fase liquida in prossimità del fronte di solidificazione.

Questo scenario si presenta in particolare quando le condizioni di raffreddamento non sono controllate e la solidificazione della lega avviene sotto forma di dendriti equiassici completamente circondate da liquido a temperatura di sottoraffreddamento. Sotto queste ipotesi la microstruttura nuclea e si accresce secondo leggi che non possono basarsi su assunti di equilibrio chimico e termodinamico.

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Partendo da queste considerazioni Ni , Beckermann [37] e Viskanta [38] a partire dai primi anni '90 cercano di individuare strumenti matematico-numeriche in grado di calcolare in maniera esplicita gli effetti dei fenomeni microstrutturali che avvengono su piccola scala, cercando quindi di svincolare le formulazioni fino ad allora proposte dai limiti di validità delle ipotesi sopra citate.

L'approccio impiegato si fonda sulla definizione di equazioni di conservazione delle variabili su scala macroscopica ottenute mediando su un volume di controllo  $V_0$  tutte le equazioni che governano in maniera esatta i fenomeni che avvengono su scala microscopica.

Basandosi su un'analisi della scala dimensionale dei fenomeni microstrutturali ( $10^{-4}$ -  $10^{-5}$  m) rispetto alla dimensione caratteristica su scala macroscopica ( $10^0$ -  $10^{-3}$ ) Ni e Beckermann individuano una dimensione caratteristica adeguata del volume di controllo  $V_0$  compresa tra  $10^{-2}$  e  $10^{-3}$  m.

Oltre al concetto di volume di controllo su cui effettuare le operazioni di media delle variabili locali viene introdotto anche un termine  $A_k$  che rappresenta la superficie di interfaccia tra i diversi volumi di fase  $V_k$ , avente vettore normale  $\mathbf{n}_k$  e velocità di avanzamento  $\mathbf{w}_k$ .

La formula generale su cui si basa l'operazione di media della generica variabile  $\Psi$  riferita alla generica fase  $k$  viene espressa in questo modo:

$$\langle \Psi_k \rangle = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} X_k \Psi_k dV \quad (1.89)$$

Dove  $X_k$ , in analogia con le funzioni di forma dei metodi ad elementi finiti, risulta essere funzione di "fase" e viene assunta di valore uguale a 1 in corrispondenza della fase  $k$  e di valore nullo altrove.

Il valore medio intrinseco della fase  $k$  risulta:

$$\langle \Psi_k \rangle^k = \frac{1}{V_k} \int_{V_0} X_k \Psi_k dV \quad (1.90)$$

Per  $\Psi_k=1$  dalla (1.89) si ottiene la frazione in volume della fase  $k$ :

$$g_k = \frac{V_k}{V_c} \quad \text{inoltre ne consegue che :} \quad \sum_k g_k = 1$$

e che  $\langle \Psi_k \rangle = g_k \langle \Psi_k \rangle^k$

Viene così definito un termine fluttuante di  $\Psi_k$ :

$$\hat{\Psi}_k = (\Psi_k - \langle \Psi_k \rangle^k) X_k \quad (1.91)$$

La media del prodotto di due quantità  $\Psi_k$  e  $\Phi_k$  è data da:

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

$$\langle \Psi_k \Phi_k \rangle^k = \langle \Psi_k \rangle^k \langle \Phi_k \rangle^k + \langle \widehat{\Psi}_k \widehat{\Phi}_k \rangle^k \quad (1.92)$$

E infine è possibile definire alcuni teoremi per la media della derivata:

$$\left\langle \frac{\partial \Psi_k}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \Psi_k \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V_0} \int_{A_k} \Psi_k \mathbf{w}_k \cdot \mathbf{n}_k dA \quad (1.93)$$

$$\langle \nabla \Psi_k \rangle = \nabla \langle \Psi_k \rangle + \frac{1}{V_0} \int_{A_k} \Psi_k \mathbf{n}_k dA \quad (1.94)$$

$$\langle \nabla \Psi_k \rangle = g_k \nabla \langle \Psi_k \rangle^k + \frac{1}{V_0} \int_{A_k} \Psi_k \mathbf{n}_k dA \quad (1.95)$$

Attraverso gli operatori (1.89)-(1.9) appena descritti è quindi possibile considerare tutte le equazioni generali di conservazione scritte in forma esatta [37] su scala microscopica e integrarle sul volume  $V_0$  su si intende mediare le variabili, ottenendo in questo modo un sistema composto da equazioni di conservazione su scala macroscopica per la singola fase  $k$  e un insieme di equazioni di bilancio globale delle variabili nelle interfacce di cambiamento di fase.

Attraverso questo approccio vengono ad essere considerati tutti gli aspetti che riguardano le interazioni tra le diverse fasi e che avvengono su scala microstrutturale, ovvero bilanci tensionali lungo le interfacce, scambi termici e di concentrazione.

Attraverso le equazioni di bilancio all'interfaccia è possibile descrivere in maniera esatta i fenomeni microscopici che avvengono in prossimità del fronte di solidificazione, senza dovere ricorrere come nel caso di modelli visti in precedenza ad equazioni costitutive aggiuntive.

Si sottolinea a questo punto come le potenzialità del modello appena descritto risiedano proprio nella possibilità di "manipolare" le equazioni di bilancio all'interfaccia che descrivono le interazioni delle variabili di fase potendo trasferire su scala macroscopica informazioni derivanti da modelli microstrutturali.

Rimandando a [37] per ulteriori approfondimenti sulle modalità di trattamento delle equazioni di bilancio all'interfaccia (equazioni costitutive) e le relazioni termodinamiche, la presente trattazione si limita a riportare il sistema di equazioni finali del modello proposto da Ni e Beckermann nel caso particolare in cui si

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

intenda passare dalla formulazione generale a doppia fase alla formulazione basata sulle variabili di miscela solido-liquida :

*Equazione di conservazione della massa:*

$$\frac{\partial}{\partial t} (g_l \rho_l + g_s \rho_s) + \nabla \cdot (g_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l + g_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) = 0$$

*Equazione di conservazione del momento della quantità di moto:*

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (g_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l + g_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) + \nabla \cdot (g_l \rho_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l + g_s \rho_s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) = \\ -g_l \nabla \langle p_l \rangle^l - g_s \nabla \langle p_s \rangle^s + \nabla \cdot \mu_l^* \{ \nabla \langle g_l \rangle \langle \mathbf{v}_l \rangle^l + [\nabla \langle g_l \langle \mathbf{v}_l \rangle] ] - \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \nabla g_l - \nabla g_l \langle \mathbf{v}_s \rangle^s \} \\ + \nabla \cdot \mu_s^* g_s \{ \nabla \langle \mathbf{v}_s \rangle^s + [\nabla \langle \mathbf{v}_s \rangle^s]^t \} + g_l \rho_l \langle \mathbf{b}_l \rangle^l + g_s \rho_s \langle \mathbf{b}_s \rangle^s \end{aligned}$$

*Equazione di conservazione dell'energia:*

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (g_l \rho_l \langle h_l \rangle^l + g_s \rho_s \langle h_s \rangle^s) + \nabla \cdot (g_l \rho_l \langle h_l \rangle^l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l + g_s \rho_s \langle h_s \rangle^s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \\ = \nabla \cdot (k_l^* g_l \nabla \langle T_l \rangle^l) + \nabla \cdot (k_s^* g_s \nabla \langle T_s \rangle^s) \end{aligned}$$

*Equazione di conservazione della specie:*

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (g_l \rho_l \langle C_l \rangle^l + g_s \rho_s \langle C_s \rangle^s) + \nabla \cdot (g_l \rho_l \langle C_l \rangle^l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l + g_s \rho_s \langle C_s \rangle^s \langle \mathbf{v}_s \rangle^s) \\ = \nabla \cdot (\mathbf{D}_l^* g_l \rho_l \nabla \langle C_l \rangle^l) + \nabla \cdot (\mathbf{D}_s^* g_s \rho_s \nabla \langle C_s \rangle^s) \end{aligned}$$

Queste formulazioni generali, basate su ipotesi di miscela solido-liquida sono del tutto analoghe a quelle viste nei capitoli precedenti (Bennon ed Incropera), con la sostanziale differenza di riportare i valori delle variabili incognite mediati su un volume di controllo. Questo fa sì che il sistema di equazioni non abbia bisogno di ulteriori equazioni costitutive per descrivere il problema in maniera completa.

Nelle equazioni sopra enunciate non compaiono inoltre termini di bilancio delle variabili alle interfacce di cambiamento di fase e le uniche variabili che compaiono sono variabili macroscopiche.

Il sistema di equazioni quindi è formalmente in grado di descrivere in maniera completa il problema ma non è risolvibile per l'elevato numero di incognite e richiede, anche in questo caso, come nella formulazione classica basata sulla teoria della miscela, di conoscere a priori i legami costitutivi tra le diverse fasi.

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

Su questo punto Ni e Beckermann, evidenziano come le modalità impiegate da altri Autori per chiudere il problema possono avere un ristretto campo di applicabilità, in quanto necessitano di ipotesi forti alla base ; condizioni di equilibrio chimico e termodinamico, validità della regola della leva o di Sheil, velocità nulla della fase solida.

Ni e Beckermann spostano le ipotesi di validità assunte generalmente su scala macroscopica, al singolo volume di controllo entro cui vengono mediate le variabili incognite. In particolare fanno notare come nel caso delle leghe metalliche ipotesi di equilibrio termodinamico sul volume di controllo  $V_0$  siano molto più affidabili rispetto ad ipotesi di equilibrio chimico, cosa che appare evidente nel momento in cui si considera il rapporto tra coefficiente di diffusione termica e di soluto (numero di Lewis,  $Le$ ), risulta dell'ordine di  $10^4$ .

Questo conferma l'ipotesi già nota, per cui la solidificazione delle leghe sia controllata su scala microscopica soprattutto dalla concentrazione dei diversi componenti.

L'assunto di equilibrio termodinamico diventa più labile in casi particolari come ad esempio nella solidificazione di dendriti equiassiche circondate da liquido fortemente sottoraffreddato.

D'altro canto le ipotesi di una diffusione di specie infinita nella fase liquida di un volume di controllo risulta generalmente valida per il liquido che attraversa una matrice interdendrica, con uniche eccezioni nelle zone vicine alla punta delle dendriti e vicino al fronte di solidificazione eutettica.

In queste zone la lunghezza caratteristica di diffusione di specie è più elevata e quindi le condizioni di equilibrio chimico risultano più critiche. Questo è quanto avviene nel caso particolare di solidificazione dendritica colonnare, una tipologia di solidificazione che, come già detto, è scarsamente riscontabile nei comuni processi industriali.

### 1.11 Richiami e considerazioni conclusive

Lo studio numerico del cambiamento di fase ha conosciuto nell'ultima decade un vasto campo di applicabilità industriale grazie al continuo sviluppo di modelli numerici sempre più raffinati e grazie soprattutto all'implementazione di queste formulazioni all'interno di codici di calcolo commerciale.

In questo capitolo sono stati esposti i modelli matematici sviluppati per studiare il cambiamento di fase solido-liquido in problemi con complessità via via crescente.

Partendo dalla formulazione generale di Stefan (Cap. 1.2), che descrive in forma matematica il problema del cambiamento di fase solido-liquido monodimensionale in presenza di sola diffusione termica e con interfaccia discreta di CF, sono state



## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

quindi riportate le soluzioni analitiche del problema proposte da Neumann (Cap 1.3).

Nei Cap. 1.4-1.6 sono stati affrontati modelli matematici per lo studio del problema di Stefan in domini a più dimensioni attraverso il ricorso a formulazioni di tipo entalpico e metodi numerici di risoluzione basati sul bilancio energetico all'interfaccia. Si è quindi arrivati ad introdurre (Cap. 1.7) i modelli advettivi-diffusivi sviluppati per lo studio della solidificazione/fusione di sostanze pure in presenza di convezione naturale. Per questa categoria di problemi sono stati riportati esempi di soluzioni ad interfaccia mobile (Cap. 1.5) e più diffuse metodologie risolutive a griglia fissa che si sono dimostrate idonee per estendere lo studio del cambiamento di fase in sostanze multicomponente, dove non è possibile tracciare un interfaccia discreta di separazione tra le fasi.

Dopo aver presentato nel Cap. 1.8 le formulazioni basate sul principio di miscela solido/liquida sono state discusse (Cap. 1.9) le possibili classificazioni delle formulazioni matematiche generali proposte per descrivere il comportamento della fase fluida e della fase solida nella mushy region, mediante modelli a singolo dominio. Nello stesso capitolo è stato mostrato inoltre come nello studio numerico si possa tenere conto degli effetti diffusivi delle specie chimiche costituenti il sistema mediante il ricorso a modelli a doppia diffusione.

Si sono quindi evidenziati i limiti delle formulazioni in cui le variabili di calcolo sono riferite ad una "fase" apparente di miscela solido-liquida, che, se da un lato offrono un indubbio vantaggio dal punto di vista computazionale nella risoluzione del sistema di equazioni per via numerica, hanno come contropartita la necessità di essere integrate da equazioni costitutive aggiuntive che descrivano gli effetti dovuti alle interazioni tra le fasi su scala microscopica.

In tutti i modelli basati su principio di miscela solido-liquida queste equazioni costitutive sono basate su relazioni empiriche e modelli analitici (regola della leva, Sheil) e richiedono, per essere valide, di assumere condizioni di equilibrio chimico e termodinamico locale, ipotesi che non sempre adottabili in particolari casi di studio.

Ciò nonostante, i benefici in termini di strategie di calcolo ha portato a una maggiore diffusione applicativa di questi metodi attraverso la loro applicazione in codici di calcolo commerciale, dedicati alla previsione dei fenomeni di solidificazione e fusione in processi industriali, con particolare riferimento ai processi che interessano il cambiamento di fase di leghe metalliche.

Su queste formulazioni si baseranno inoltre i casi applicativi riportati nel secondo e terzo capitolo di questa trattazione dove saranno affrontate le attività messa a punto e validazione di strategie di impiego di un codice commerciale sia in casi applicativi di riferimento, sia in applicazioni industriali.

Infine nell'ultimo capitolo si è mostrato come i limiti di validità citati che interessano le formulazioni basate sulla teoria di miscela solido-liquida, siano

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

stati superati dal punto di vista teorico nel modello proposto e sviluppato da alcuni ricercatori (Beckermann, Ni, Viskanta) basato su metodi di media delle variabili locali su un volume di controllo.

Questo modello matematico, se scritto in forma generale bifasica, rappresenta senza dubbio la formulazione più avanzata, in grado di tenere in conto in modo adeguato di tutti gli effetti di interazione tra fase liquida e fase solida che avvengono su scala microscopica. Occorre però sottolineare come la sua applicazione nello studio di problematiche industriali sconti l'ingente onere dal punto di vista computazionale e richiede ancora una vasta attività di indagine e ricerca nel campo della modellazione dell'accrescimento microstrutturale.

E' quindi possibile affermare che la formulazione proposta da Beckermann e sviluppata successivamente da altri Autori rappresenta ad oggi un valido strumento di congiunzione tra formulazioni scritte su scala macroscopica e modelli dedicati alla previsione di fenomeni che avvengono su scala microstrutturale.

In questo campo si sono infatti concentrati gli studi dei ricercatori negli ultimi anni, nel tentativo di determinare modelli analitici e metodi numerici in grado di descrivere fenomeni di nucleazione dei grani e accrescimento dendritico nelle leghe metalliche in solidificazione [3], sia nel caso di microstrutture colonnari che nell'accrescimento equiassico.

---

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

### Riferimenti bibliografici

- [1] M. Necati Ozisik, *Heat Conduction*, 1980, New York, J. Wiley&S.
- [2] M. Pinelli, S. Piva, *Solid/liquid phase change on presence of natural convection: a thermal energy storage case study*, Jou. Ener. Resources Technology (Trans. ASME), Vol. 125, pp.1-9, (2003)
- [3] M. Pinelli, *Analisi numerica di sistemi con cambiamento di fase solido-liquido per l'accumulo di energia*, Tesi di Dottorato, XIII Ciclo, Università degli Studi di Bologna, (A.A. 1999-2000)
- [3] J. A. Dantzig, M. Rappaz, *Solidification*, EPFL Press, Lausanne, (2009)
- [5] E.M. Sparrow, S. V. Patankar, S. Ramadhyani, *Analysis of Melting in the Presence of Natural Convection in the Melt Region*, Asme Trans., vol. 99, pp. 520-526, 1977
- [6] M. Grae Worster, *Solidification of an alloy from a cooled boundary*, J. Fluid Mech.. vol. 167, pp. 481-501, 1986
- [7] M. Lacroix, V.R. Voller, *Finite difference solutions of solidification change problems: transformed versus fixed grids*, Numerical Heat Transfer B 17 (1990) 25-41
- [8] M. J. Raw e G. E. Schneider, *A new implicit solution procedure for multidimensional finite difference modeling of the Stefan problem*, Numerical Heat transfer, 8, 559-571 (1985)
- [9] A.D.Brent, V.R. Voller e K.J. Reid, *The enthalpy porosity technique for modeling convection-diffusion phase change: application to the melting of a pure metal*. Numerical Heat transfer, 13, 297-318 (1988)
- [10] Gadgil, D. Gobin, *Analysis of two-dimensional melting in rectangular enclosures in presence of natural convection in the melt region*, Journal of Heat Transfer , 99, 520-526 (1977)

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

- [11] C. Bonacina e G. Comini, *On the solution of the non linear heat conduction equation by rhe numerical methods*, Inter. Jou. of Heat and Mass transfer, 16, 581-589 (1973)
- [12] J. Yoo e B. Rubinsky, *A finite element method for the study of solidification processes in the presence of natural convection*, International Journal of Numerical Methods in EGINEERING, 23,1785-1805 (1986)
- [13] V.R. Voller, M. Cross e N.C. Markatos, *An enthalpy method for convection/diffusion phase change*, International Journal of Numerical Methods in EGINEERING 24, 271-284 (1987)
- [14] G. Comini, S. Del Giudice, R. W. Lewis e O.C. Zienkiewicz, *Finite element solution of non linear heat conduction problems with spectral reference to phase change*, International Journal of Numerical Methods in EGINEERING, 8, 613-624 (1974)
- [15] K. Morgan, R. W. Lewis, O.C. Zienkiewicz, *An improved algorithm for heat conduction problems with phase change*, International Journal of Numerical Methods in EGINEERING, 12, 1191-1195 (1978)
- [16] O.C. Zienkiewicz, *The Finite Element Method*, McGraw-Hill, NY, (1977)
- [17] S.V. Pathankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw-Hill, NY, (1980)
- [18] W. C. Schreiber, *The numerical simulation of heat conduction in irregularly-shaped materials of thermally dependent properties*, International Journal of Numerical Methods in EGINEERING, 30, 679-696 (1990)
- [19] C. Benard, D. Gobin e A. Zanolì, *Moving boundary problem: heat conduction in the solid phase of a phase-change material during melting driven by natural convection in the liquid*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 29, 11, pp. 1669-1681, 1986
- [20] V.R. Voller e C. Prakash, *A fixed numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 30, n.8, pp. 1709-1719, 1987

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

- [21] V.R. Voller e C.R. Swaminathan, *Fixed grid techniques for phase change problems: a review*, Int. Jou. Num. Meth. Eng., vol. 30, pp. 875-898, 1990
- [22] V.R. Voller, D. Brent e C. Prakash, *The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems*, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 32, n.9, pp. 1719-1731 (1989)
- [23] R. Bennacer e D. Gobin, *Cooperating thermosolutal convection in enclosures-I. Scale analysis and mass transfer*, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol 39, n.13 pp. 2671-2681, (1996)
- [24] D. Gobin e R. Bennacer, *Cooperating thermosolutal convection in enclosures-I. Scale analysis and mass transfer II. Heat Transfer and flow structure*, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol 39, n.13 pp. 2683-2697, (1996)
- [25] P. Nithiarasu, K. N. Seetharamu, T. Sundarajan, *Natural convective heat transfer in a fluid saturated variable porosity medium*, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol 40, n.16 pp. 3955-3967, (1997)
- [26] P. Nithiarasu, T. Sundarajan, K. N. Seetharamu, *Double-diffusive natural convection in a fluid saturated porous cavity with a freely convecting wall*, Int. Comm Heat Mass Transfer, vol. 24, n. 8, pp. 1121-1130, (1997)
- [27] P. Nithiarasu, *A new semi-implicit time stepping procedure for buoyancy driven flow in a fluid saturated porous medium*, Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 165, pp. 147-154, (1998)
- [28] P. Nithiarasu et al., *Numerical investigation of buoyancy driven flow in a fluid saturated non-Darcian porous medium*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 42, pp. 1205-1215, 1999
- [29] P. Nithiarasu, T. Sundarajan, K. N. Seetharamu, *Effect of porosity on natural convective heat transfer in a fluid saturated porous medium*, Int. Jou. Heat and Fluid Flow, 19, pp. 56-58, (1998)
- [30] P. Nithiarasu et al., *Non-Darcy natural convection in a hydrodynamically and thermally anisotropic porous medium*, Comput Methods Appl. Mech Engrg., 1888, pp. 413-430

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

- [31] R. Bennacer, *Double diffusive convection in a vertical enclosures filled with anisotropic porous media*, Int. J. Therm. Sci., vol. 40, pp. 30-41, (2001)
- [32] B. Goeau, J.P. Songbie e D. Gobin, *Numerical study of double-diffusive natural convection in a porous cavity using the Darcy-Brinkman formulation*, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol 39, n.7 pp. 1363-1378, (1996)
- [33] W.D. Bennon, F.P. Incropera, *A Continuum Model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems – I. Model Formulation*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 30, pp. 2161-2170, 1987
- [34] W.D. Bennon, F.P. Incropera, *A Continuum Model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems – II. Application to solidification in a rectangular cavity*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 30, pp. 2171-2187, 1987
- [35] C. Beckermann e R. Viskanta, *Natural convection solid/liquid phase change in porous media*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 31, n.1, pp. 35-46 (1988)
- [36] C. Beckermann e R. Viskanta, *Double-diffusive convection due to melting*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 31, n. 10, pp. 2077-2089 (1988)
- [37] J. Ni e C. Beckermann, *Volume-averaged two-phase model for transport phenomena during solidification*, Met. Trans. B, vol. 22B, pp. 349-361 (1991)
- [38] C. Beckermann, R. Viskanta, *Mathematical modeling of transport phenomena during alloy solidification*, ASME, Vol. 46, n.1 (1993)
- [39] M.C. Shneider e C. Beckermann, *A numerical study of the combined effects of microsegregation, mushy zone permeability and flow, caused by volume contraction and thermosolutal convection, on macrosegregation and eutectic formation in binary alloy solidification*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 38, n.18, pp. 3455-3473 (1995)
- [40] J. Ni, F. Incropera, *Extension of the continuum model for transport phenomena occurring during metal alloy solidification-I. The conservation equations*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 38, n.7, pp. 1271-1284 (1995)

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

- [41] J. Ni, F. Incropera, *Extension of the continuum model for transport phenomena occurring during metal alloy solidification-II. Microscopic considerations*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 38, n.7, pp. 1285-1296 (1995)
- [42] S. Chang e D.M. Stefanescu, *A model for inverse segregation: the case of directionally solidified Al-Cu alloys*, Acta Mater, Vol. 44, n.6 , pp 2227-2235 (1996)
- [43] V. R. Voller, *A similarity solution for the solidification of a multicomponent alloy*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 40, n.12, pp. 2869-2877 (1997)
- [44] V. R. Voller, *A numerical scheme for solidification of an alloy*, Canadian Metallurgical Quarterly, Vol. 37, n. 3-4, pp. 169-177, (1998)
- [45] R. Viskanta et al., *Solidification Processes of Solutions*, Cryobiology, vol. 34, pp. 346-362 (1997)
- [46] C. Beckermann, *Modeling of macrosegregation: past, present, future*, Acts presented at the Flemings Symposium, Boston, MA, June 2000
- [47] C. Beckermann et al. *Modeling Melt Convection in phase field simulations of solidification*, Jou. Of Computational Physics, vol. 154, pp. 468-469, (1999)
- [48] Fisher Kurtz
- [49] Gau C. Viskanta R. , *Melting and solidification of a pure metal from a vertical wall*, Journal Heat Transfer – T ASME 108 (1986) 174-181
- [50] C.S. Magirl, F. P. Incropera, *Flow and morphological conditions associated with unidirectional solidification of aqueous ammonium chloride*, Trans. ASME, Vol. 115, pp. 1036-1043 (1994)
- [50] P.J.Prescott e F.P Incropera, *Convective transport phenomena and macrosegregation of a binary metal alloy: I – Numerical Predictions*, Trans. ASME, Vol. 116, pp.735-741, (1994)
- [51]P.J.Prescott et al. *Convective transport phenomena and macrosegregation of a binary metal alloy: II – Experiments and comparisons with numerical predicrtions*, Trans. ASME, Vol. 116, pp.742-749, (1994)

## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

[52] M.S.Christenson e F.P. Incropera, *Solidification of an aqueous ammonium chloride solution in a rectangular cavity-I Experimental study*,

[53] M.S.Christenson, W.D.Bennon e F.P. Incropera *Solidification of an aqueous ammonium chloride solution in a rectangular cavity-II- Comparison of predicted and measured results*,



## Cap. 1 Rassegna della letteratura

---

## Cap. 2.1 Analisi del cambiamento di fase in sostanze pure

### 2.1.1 Obiettivi

Obiettivo delle attività trattate in questo capitolo è stata la validazione dello strumento di calcolo per lo studio della solidificazione di sostanze pure, che non presentano intervalli di temperatura di cambiamento di fase, e che non manifestano pertanto la presenza di una mushy region con contemporanea presenza di fase solida e fase liquida.

Le analisi numeriche qui condotte sono da considerarsi parte di una fase preliminare necessaria per validare il comportamento del codice attraverso lo studio di un caso applicativo adeguatamente indagato nel passato su cui è possibile riscontrare in letteratura una casistica di risultati.

In particolare, è stato preso a riferimento lo studio di un processo di fusione in cavità quadrata bidimensionale innescato da condizioni di isothermicità imposte lungo pareti verticali.

Ciò che caratterizza il fenomeno è il manifestarsi del cambiamento di fase solido-liquido e la contemporanea presenza di un regime di moto della zona fluida governato da convezione naturale, innescata dal gradiente termico orizzontale imposto.

Il caso in esame è stato ampiamente indagato nel corso degli anni, sia dal punto di vista sperimentale [18]-[23], sia tramite applicazioni di modelli numerici.

Gobin e Le Querè hanno in passato preso in rassegna diversi risultati ottenuti tramite metodi numerici e strategie di calcolo proposte da diversi Autori [1]-[2], fornendo un esaustivo raffronto tra i diversi risultati raggiunti e confrontando gli stessi con soluzioni analitiche di riferimento. I metodi proposti dai contributi presi in rassegna sono riconducibili sostanzialmente a due differenti approcci:

- Metodi FEM o FVM applicati a formulazioni a singolo dominio accomunati dal ricorso al modello entalpico nella legge di conservazione dell'energia e della variabile primitiva nella conservazione del momento della quantità di moto.
- Metodi detti "Front-tracking" caratterizzati dal calcolo tramite metodi espliciti del posizionamento del fronte di solidificazione e il ricorso a schemi up-wind nella discretizzazione dei termini convettivi. Questi schemi sono in genere risolti tramite sinergie tra metodi ai volumi finiti in una prima fase di risoluzione delle equazioni che governano la convezione nel fluido, passando quindi a risolvere equazioni di bilancio locale dell'energia attraverso metodi agli elementi finiti e a griglie non strutturate adattative, determinando per questa via il posizionamento del profilo di interfaccia di cambiamento di fase.

Per un maggior approfondimento sui modelli matematici di base e le procedure numeriche risolutive adottate dai diversi Autori si rimanda a [1].

### 2.1.2 Formulazione del problema

Il problema proposto da Gobin e Le Querè affronta il fenomeno di convezione naturale in cavità quadrata bidimensionale di lato  $L$  riempita da una sostanza pura, che, come già affermato, possiede un valore discreto di temperatura di cambiamento di fase (Fig. 2.2.1).

Il materiale all'interno della cavità si trova inizialmente in fase solida a temperatura uniforme corrispondente a quella di fusione-solidificazione  $T_F$ .

A partire dall'istante  $t=0$  la temperatura di una parete verticale viene mantenuta ad un valore  $T_1 > T_F$ , mentre, sulla seconda parete verticale viene imposto un valore di temperatura uguale al valore iniziale  $T_F$ , pari cioè alla temperatura di fusione della sostanze studiata.

Sulle pareti orizzontali si impongono condizioni di adiabaticità e di aderenza.

Il campo di moto del fluido viene considerato in regime laminare, e le caratteristiche termofisiche del materiale sono considerate costanti, fatta eccezione per la densità, la cui variazione in funzione della temperatura fornisce l'unico contributo all'innescarsi della convezione.

I raggruppamenti adimensionali che caratterizzano il sistema sono i seguenti : il numero di Prandtl,  $Pr$ ; il numero di Rayleigh,  $Ra$ ; il numero di Stefan,  $Ste$ .

Le lunghezze vengono adimensionalizzate rispetto ad  $L$ , per il tempo si ricorre al prodotto  $t^* = SteFo = Ste(\alpha t / H^2)$ .

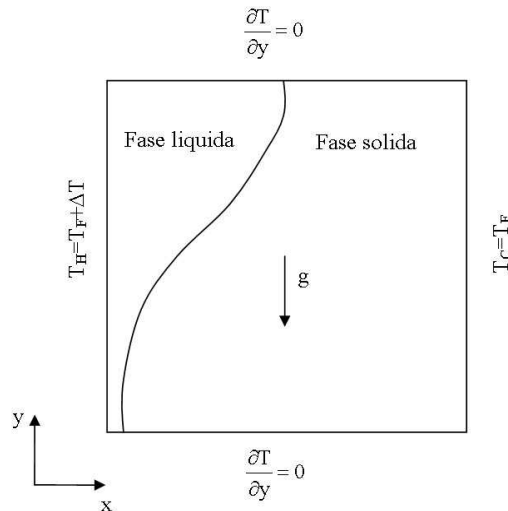
I casi studiati in [1]-[2] vengono differenziati mediante il numero di Rayleigh per un materiale rispettivamente a basso numero di  $Pr$  ( $Pr=0.02$ ), e ad alto numero di  $Pr$  ( $Pr=50$ ), parametri adimensionali che corrispondono a materiali simili alle paraffine nel primo caso e a metalli come gallio o stagno nel secondo caso (materiali con basso punto di fusione caratterizzati dall'ordine di grandezza del numero di  $Pr$  di circa  $10^2$ ).

Per ogni caso proposto, i termini di confronto dei risultati numerici ottenuti, interessano in particolare l'andamento del valore di Nusselt medio lungo la parete calda; la frazione di liquido  $e$ , infine, il posizionamento dell'interfaccia di Cambiamento di Fase (CF), in corrispondenza dei seguenti istanti di tempo adimensionali  $t_1^* = 4 \cdot 10^{-3}$ ;  $t_2^* = 10^{-2}$ ;  $t_3^* = 4 \cdot 10^{-2}$ ;  $t_4^* = 10^{-2}$ .

**Tab. 2.1.1 Casi studiati**

Casi di test: parametri adimensionali

$Pr=0.02$	$Ra=2.5 \times 10^4$	$Ra=2.5 \times 10^5$
$Ste=0.01$	Caso 1	Caso 2
$Pr=50$	$Ra=10^7$	$Ra=10^8$
$Ste=0.1$	Caso 3	Caso 4



**Fig. 2.1.1** Rappresentazione schematica del problema

### 2.1.3 Analisi di scala

Come fatto notare da Gobin e Le Querè la difficoltà principale nell'ottenere risultati sperimentali utili a ottenere una validazione accurata dei metodi numerici è anzitutto da ricondurre a ovvie complessità delle fasi operative specialmente quando ad essere studiate sono sostanze come i metalli liquidi, che non consentono per loro natura un rigoroso controllo e messa a punto delle condizioni sperimentali (uniformità di temperatura sulle pareti verticali, adiabaticità su quelle orizzontali).

Per queste ragioni, i confronti effettuati in passato tra risultati numerici raggiunti approcciando il problema per via adimensionale (generalmente studiando casi ad alto numeri di Ra), e i risultati sperimentali si limitano a considerazioni di tipo qualitativo, specialmente per gli aspetti che riguardano il posizionamento dell'interfaccia di cambiamento di fase.

Un'analisi di scala del problema proposto è stata già affrontata da P. Jany e A. Bejan [3], e suddivide il fenomeno osservato principalmente in tre fasi: un breve transitorio iniziale dominato da conduzione pura è accompagnato dalla formazione di un sottile strato di liquido a ridosso della parete calda (Fig. 2.1.2-(a)) e viene seguito dall'innescarsi graduale del moto convettivo di risalita di fluido caldo a densità minore lungo la parete riscaldata (Fig. 2.1.3-(b))

Nell'ultima fase il fenomeno convettivo si estende all'intera cavità con una penetrazione più accentuata della fase di liquido nella zona superiore (Fig. 2.1.3-(c)).

Con l'iniziale formazione di uno strato di liquido di spessore  $s$  lungo la parete calda, il flusso termico orizzontale attraverso lo strato liquido formatosi può essere assunto completamente bilanciato dalla quantità di energia assorbita dall'interfaccia solido-liquida.

$$k \frac{T_H - T_F}{s} \sim \rho L_F \frac{ds}{dt} \quad (2.1.1)$$

Dall'equazione 1 è quindi possibile risalire allo spessore dello strato di liquido in formazione in funzione del tempo:

$$s \sim \left[ \frac{k(T_H - T_F)t}{\rho L_F} \right]^{1/2} \sim L\theta^{1/2} \quad (2.1.2)$$

dove la variabile tempo,  $\theta$ , in accordo con la terminologia comunemente adottata nell'analisi adimensionale dello scambio termico, assume il valore:

$$\theta = \frac{c_p(T_H - T_F)\alpha t}{L_F} = \text{Ste} \cdot \text{Fo} \quad (2.1.3)$$

Il numero di Stefan,  $\text{Ste}$ , è funzione del grado di surriscaldamento del liquido, il numero di Fourier,  $\text{Fo}$ , è un parametro adimensionale legato alla velocità di diffusione del calore attraverso la lunghezza caratteristica  $L$ .

Il numero di Nusselt, entro il limite di validità di condizione del regime di pura conduzione risulta quindi essere:

$$\text{Nu} = \frac{Q}{k(T_H - T_F)} \sim \frac{L}{s} \sim \theta^{-1/2} \quad (2.1.4)$$

dove  $Q$  è il flusso termico per unità di lunghezza attraverso la parete laterale sinistra della cavità in direzione normale al piano.

Le considerazioni fatte trovano piena corrispondenza con quanto ottenuto dalla soluzione di Neumann per cui:

$$\frac{s}{L} = 2C\text{Fo}^{1/2} \quad (2.1.5)$$

$$\text{Nu} = \frac{\pi^{-1/2}\text{Fo}^{-1/2}}{\text{erf}(C)} \quad (2.1.6)$$

dove  $C$  si ottiene per via implicita dall'equazione:

$$\text{Ste} = \pi^{1/2} C \frac{\text{erf}(C)}{\exp(-C^2)} \quad (2.1.7)$$

Si fa notare come il grado di approssimazione dell'analisi di scala rappresentata dalle equazioni (2.1.1-2.1.5) entro i limiti di validità della condizione di sola conduzione sia del primo ordine.

Sussequente al primo transitorio di propagazione del flusso termico per conduzione, la fenomenologia del problema presenta una seconda fase in cui, all'interno dello strato di liquido formatosi lungo la parete calda, si ha un innesco graduale di un moto convettivo con risalita di liquido a minore densità lungo la parete calda e discesa lungo il fronte di interfaccia.

Infine, nella terza fase, si osserva un moto convettivo di ricircolo in senso orario pienamente sviluppato nella zona di liquido e un'interfaccia di cambiamento di fase che tende a raggiungere la parete fredda, allontanandosi dalla condizione di parallelismo alla parete verticale che caratterizza la prima parte del fenomeno di regime di sola conduzione.

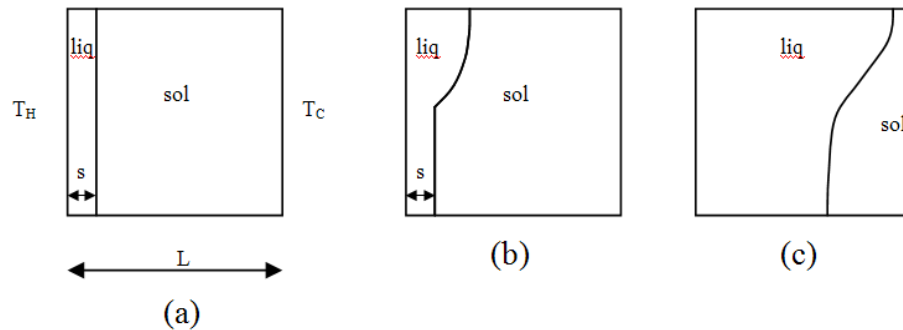


Fig. 2.1.2 Evoluzione del fenomeno

Durante la fase di insorgenza del moto convettivo il valore di Nu risulta decrescere secondo un andamento che si allontana progressivamente dalla curva di Nusselt che prevede una diminuzione secondo la funzione  $1/\sqrt{t}$ .

Gobin e Benard nel corso degli anni hanno proposto alcune correzioni alle correlazioni di Churchill e Chu (1975) per lo studio dello scambio termico per convezione in regime laminare e turbolento, lungo una parete cilindrica orizzontale, arrivando quindi a definire l'andamento dei numeri di Nu in funzione del tempo secondo le leggi:

$$Nu(\tau) = Nu_{\infty} + \frac{1}{\sqrt{2\tau}} \left[ 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{[(Ra \cdot Pr)^{0.36} \tau^{0.75}]^2}}} \right] \quad (2.8)$$

per  $Pr \ll 1$

$$Nu(\tau) = \frac{1}{\sqrt{2\tau}} + \frac{Nu_{\infty} - 1/\sqrt{2\tau}}{\sqrt{1 + \frac{1}{(0.0175 Ra^{3/4} \tau^{3/2})^2}}} \quad (2.9)$$

Per  $Pr \geq 1$

dove

$$Nu_{\infty} = 0.33 Ra^{0.25}$$

per  $Pr \gg 1$ , in accordo con Benard et al. [9]

e

$$Nu_{\infty} = 0.29 Ra^{0.27} Pr^{0.18}$$

per  $Pr \ll 1$  secondo quanto proposto da Gobin e Benard [4]

#### 2.1.4 La formulazione matematica

Il problema è stato studiato attraverso una formulazione matematica basata sul modello proposto da Voller e Prakash (Cap. 1.7) per lo studio del cambiamento di fase di sostanze che presentino un intervallo di temperatura di cambiamento di fase e, conseguentemente una zona di mushy.

Le equazioni che governano il fenomeno secondo tale formulazione sono:

*Equazione di conservazione della massa:*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.10)$$

*Equazione di conservazione dell'energia:*

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) - \nabla \cdot (k \nabla T) = 0 \quad (2.11)$$

L'entalpia  $h$  è funzione della temperatura secondo la relazione:

$$h(T) = \int_0^T c_p dT + L_F [1 - f_s(T)] \quad (2.12)$$

*Equazione di conservazione della quantità di moto:*

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} + \nabla p - \mu \left( \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{3} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) \right) + \rho \mathbf{g} + \frac{\mu}{K} = 0 \quad (2.13)$$

Per modellare il moto del fluido nella mush region la formulazione prevede il ricorso all'analogia del mezzo poroso secondo la teoria di Darcy, aggiungendo un termine nell'equazione (2.1.13) di conservazione della quantità di moto in cui compare la permeabilità, K, calcolata attraverso la costante di Kozeny-Carmen:

$$K = \frac{f_1^3}{5M_s^2(1 - f_1)^2} \quad (2.1.14)$$

Dove il valore della costante  $M_s$  risulta dipendente da un fattore di forma legato alle caratteristiche della matrice interstiziale di solido. La formulazione impiegata non ricorre all'approssimazione di Boussinesq presentando la densità variabile in tutti termini delle equazioni (2.1.3) secondo la legge:

$$\rho = \rho_0(1 - \beta_T(T - T_0)) \quad (2.1.15)$$

Le equazioni di conservazione sopra esposte possono essere adimensionalizzate ricorrendo alle seguenti variabili:

$$T^* = \frac{T - T_c}{\Delta T}$$

$$\mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{u_c} = (u_x^*; u_y^*)$$

$$p^* = \frac{p + \rho_0 \mathbf{g} \cdot \mathbf{y}}{\Delta p_c}$$

$$x^* = \frac{x}{H} \quad y^* = \frac{y}{H}$$

$$t^* = \frac{t}{t_c}$$

Le grandezze caratteristiche assunte sono:

$$u_c = \sqrt{g\beta_T\Delta T \cdot H} \quad (2.1.16)$$

$$\Delta p_c = \rho_0 u_c^2 \quad (2.1.17)$$

$$\Delta T = T_H - T_C \quad (2.1.18)$$



$$t_c = \frac{L}{u_c} \quad (2.1.19)$$

Si impone inoltre come temperatura di riferimento nella (2.1.15)  $T_0=T_c$

Sostituendo le variabili adimensionalizzate in (2.1.10-2.1.13) e considerando la dipendenza della densità dalla temperatura secondo la legge (2.1.15) si ottiene il seguente sistema di equazioni adimensionali:

*Equazione di conservazione della massa:*

$$-\beta_T \Delta T \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + (1 - \beta_T \Delta T \cdot T^*) \left( \frac{\partial u_x^*}{\partial x^*} + \frac{\partial u_y^*}{\partial y^*} \right) = 0 \quad (2.1.20)$$

*Equazioni di conservazione della quantità di moto:*

$$\begin{aligned} \left( \frac{\rho_0 u_c^2}{L} \right) \left( \frac{\partial(1 - \beta_T \cdot \Delta T \cdot T^*) u_x^*}{\partial t^*} + u_x^* \frac{\partial(1 - \beta_T \cdot \Delta T \cdot T^*) u_x^*}{\partial x^*} + u_y^* \frac{\partial(1 - \beta_T \cdot \Delta T \cdot T^*) u_x^*}{\partial y^*} \right) \\ = - \frac{\rho_0 u_c^2}{L} \frac{\partial p^*}{\partial x^*} + \mu_0 \frac{u_c}{L^2} \left( \frac{\partial^2 u_x^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u_x^*}{\partial y^{*2}} + \frac{1}{3} \left( \frac{\partial^2 u_x^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u_y^*}{\partial x^* \partial y^*} \right) \right) + Lu_c \frac{\mu}{K} u_x^* \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left( \frac{\rho_0 u_c^2}{L} \right) \left( \frac{\partial(1 - \beta_T \cdot \Delta T \cdot T^*) u_y^*}{\partial t^*} + u_x^* \frac{\partial(1 - \beta_T \cdot \Delta T \cdot T^*) u_y^*}{\partial x^*} + u_y^* \frac{\partial(1 - \beta_T \cdot \Delta T \cdot T^*) u_y^*}{\partial y^*} \right) \\ = - \frac{\rho_0 u_c^2}{L} \frac{\partial p^*}{\partial y^*} - g \rho_0 - g \rho_0 (1 - \beta_T (\Delta T \cdot T^*)) \\ + \mu_0 \frac{u_c}{L^2} \left( \frac{\partial^2 u_y^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u_y^*}{\partial y^{*2}} + \frac{1}{3} \left( \frac{\partial^2 u_y^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 u_x^*}{\partial x^* \partial y^*} \right) \right) + Lu_c \frac{\mu}{K} u_y^* \end{aligned}$$

Dividendo i termini a destra e sinistra per  $(\rho_0 u_c^2)/L$  sostituendo la (2.1.15) e identificando:

$$\frac{\mu_0}{\rho_0 L u_c} = \frac{\mu_0}{\rho_0 \sqrt{g \beta_T \Delta T L^3}} = \frac{1}{\sqrt{Gr}}$$

$$Da = \frac{K}{L^2}$$

$$\varphi = (1 - \beta_T T^* \Delta T) \quad (2.1.21)$$

Le equazioni sopra riportate possono essere espresse come segue:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial \varphi u_x^*}{\partial t^*} + u_x^* \frac{\partial \varphi u_x^*}{\partial x^*} + u_y^* \frac{\partial \varphi u_x^*}{\partial y^*} \right) &= - \frac{\partial p^*}{\partial x^*} \\ + \frac{1}{\sqrt{Gr}} \left( \frac{\partial^2 u_x^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u_x^*}{\partial y^{*2}} + \frac{1}{3} \left( \frac{\partial^2 u_x^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u_y^*}{\partial x^* \partial y^*} \right) \right) &+ \frac{Da}{\sqrt{Gr}} u_x^* \end{aligned} \quad (2.1.22)$$

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial \varphi u_y^*}{\partial t^*} + u_x^* \frac{\partial \varphi u_y^*}{\partial x^*} + u_y^* \frac{\partial \varphi u_y^*}{\partial y^*} \right) &= - \frac{\partial p^*}{\partial y^*} + T^* \\ + \frac{1}{\sqrt{Gr}} \left( \frac{\partial^2 u_y^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 u_y^*}{\partial y^{*2}} + \frac{1}{3} \left( \frac{\partial^2 u_y^*}{\partial y^{*2}} + \frac{\partial^2 u_x^*}{\partial x^* \partial y^*} \right) \right) &+ \frac{Da}{\sqrt{Gr}} u_y^* \end{aligned} \quad (2.1.23)$$

*Equazione di conservazione dell'energia:*

Sostituendo la (2.1.12) nella (2.1.11) si ottiene l'equazione di bilancio nella forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial((\rho c_p)T)}{\partial t} - L_f \frac{\partial(\rho f_s(T))}{\partial t} + c_p \left( \frac{\partial(\rho u_x T)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y T)}{\partial y} \right) \\ - L_f \rho \left( \frac{\partial(u_x f_s(T))}{\partial x} + \frac{\partial(u_y f_s(T))}{\partial y} \right) = k \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \end{aligned}$$

Sostituendo nell'equazione le variabili adimensionali e la densità in funzione della temperatura la formulazione in termini adimensionali diventa:

$$\begin{aligned} \frac{c_p \Delta T u_c}{L} \rho_0 \frac{\partial(\varphi T^*)}{\partial t^*} - \rho_0 \frac{L_f u_c}{L} \frac{\partial(\varphi f_s(T^*))}{\partial t^*} + \rho_0 \frac{c_p \Delta T u_c}{L} \left( \frac{\partial(\varphi u_x^* T^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(\varphi u_y^* T^*)}{\partial y^*} \right) \\ - \rho_0 \frac{L_f u_c}{L} \left( \frac{\partial(\varphi u_x^* f_s(T^*))}{\partial x^*} + \frac{\partial(\varphi u_y^* f_s(T^*))}{\partial y^*} \right) = \frac{k \Delta T}{L^2} \left( \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right) \end{aligned}$$

Dividendo a destra e sinistra per

$$\frac{c_p \Delta T u_c \rho_0}{L}$$

Identificando :

$$\frac{L_f}{c_p \Delta T} = \frac{1}{Ste}$$

$$\frac{g\beta_T\Delta TL^3}{\alpha_0^2} = \text{Pr} \cdot \text{Ra}$$

Si ottiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi T^*}{\partial t^*} - \frac{1}{\text{Ste}} \left( \frac{\partial(\varphi f_s(T^*))}{\partial t^*} + \left( \frac{\partial(\varphi u_x^* f_s(T^*))}{\partial x^*} + \frac{\partial(\varphi u_y^* f_s(T^*))}{\partial y^*} \right) \right) \\ + \left( \frac{\partial(\varphi u_x^* T^*)}{\partial x^*} + \frac{\partial(\varphi u_y^* T^*)}{\partial y^*} \right) = (\text{Pr} \cdot \text{Ra})^{-1/2} \left( \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\partial^2 T^*}{\partial y^{*2}} \right) \end{aligned} \quad (2.24)$$

Le condizioni al contorno del problema adimensionale riferendosi allo schema di Fig. 2.1.3 vengono quindi ad essere le seguenti:

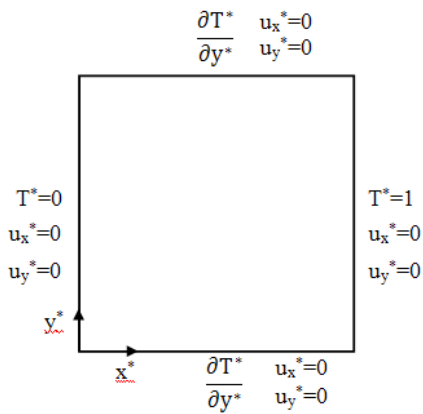
$$\begin{aligned} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} \Big|_{y^*=0,L} &= 0 \\ T^*(x^* = 0) &= T_H = 0 \\ T^*(x^* = 1) &= T_C = 1 \\ u_x^*|_{\text{wall}} &= u_y^*|_{\text{wall}} \end{aligned}$$


Fig. 2.1.3 Condizioni al contorno adimensionali

#### Fase 1- Conduzione

In una prima fase di studio si è deciso di studiare il fenomeno prendendo in considerazione il regime di sola conduzione.

Questa fase si è dimostrata necessaria, sia per una validazione iniziale dei risultati numerici mediante confronto con la soluzione analitica di Neumann, sia per mettere a punto una strategia di impiego del codice in grado di fornire un corretto tracciamento dell'interfaccia di cambiamento di fase.

Infatti, il codice impiegato non permette di escludere la presenza di una mushy region nonostante il sistema studiato presenti una temperatura di cambiamento di fase definita.

E' pertanto risultato necessario definire un intervallo di temperatura  $\Delta T_\epsilon$  entro il quale ipotizzare la compresenza di fase solida e fase liquida.

Il valore di frazione di solido assume pertanto valore  $f_s=0$  per  $T=T_F$ ,  $f_s=1$  per  $T=T_F+\Delta T_e$ ,  $f_s=(T-T_F)/\Delta T_e$  nell'intervallo  $(T_F, T_F+\Delta T_e)$  di cambiamento di fase.

In questa fase le analisi numeriche hanno preso in considerazione tre diversi valori di intervallo  $\Delta T_e$  pari a 0.01 °C, 0.1°C, 1°C.

Durante questa prima fase di studio la formulazione matematica sopra esposta viene ricondotta alla sola equazione di propagazione in forma non lineare:

$$\rho \frac{\delta h}{\delta T} \frac{\delta T}{\delta t} - \nabla[k\nabla T] = 0 \quad (2.1.25)$$

in cui l'entalpia  $h$  dipende da  $T$  secondo la legge (2.1.12), e la conduttività è funzione della temperatura.

#### *Fase 2- Convezione*

Nella seconda fase di studio, quando si tiene conto anche dell'innescio della convezione nel liquido e nella mushy region, nella formulazione precedente si prende in considerazione anche il termine di advezione in regime laminare che compare nella (2.1.11), dove velocità  $\mathbf{u}$  della fase completamente liquida risulta penalizzata nella zona di cambiamento di fase attraverso la formula:

$$\mathbf{u}_l=(1-f_s)\mathbf{u}$$

Il campo di velocità nella zona di cambiamento di fase risulta quindi governato dall'ultimo termine dell'equazione (2.1.13) attraverso la risoluzione dell'equazione di conservazione della quantità di moto, in cui la velocità è penalizzata per via di una permeabilità isotropa  $K$  che è funzione della frazione di solido e di un fattore di forma  $\gamma$ . Il valore assunto dal codice nel calcolo della costante  $M_s$  è un parametro caratteristico corrispondente ad una matrice solida costituita da dendriti di forma conica e con un diametro medio di 100 micron, per cui:

$$M_s = \frac{\gamma}{D_p} = 680\text{cm}^{-1} \quad (2.26)$$

Il metodo risolutivo implementato da PROcast v.2004 prevede una soluzione del sistema di equazioni attraverso un metodo agli elementi finiti consentendo una discretizzazione del dominio di calcolo con griglie destrutturate ad elementi triangolari (Cap. 1.6.3).

Il problema in esame è stato studiato discretizzando la cavità quadrata attraverso una griglia uniforme con 50 nodi per lato e con ampiezza di cella pari a 2 mm, generata automaticamente dal software. L'ampiezza del passo temporale impiegato è risultata legata alla strategia di calcolo e alle scelte operative.

Considerando prevalente la conduzione, escludendo quindi la possibilità di moto convettivo nella zona del liquido, la convergenza nella risoluzione numerica è stata ottenuta con un passo temporale di  $10^{-2}$  s.

Includendo anche la circolazione naturale del liquido, per garantire la convergenza nella risoluzione dell'equazione di conservazione della quantità di moto è stato impiegato un passo temporale pari a  $10^{-3}$  s.

La strategia di calcolo ha richiesto alcune scelte specifiche che saranno discusse analizzando i singoli casi.

### 2.1.5 Casi Analizzati

#### Caso 2

Il primo caso studiato fa riferimento alle seguenti caratteristiche termofisiche del materiale, corrispondenti a quelle dello stagno puro:  $k= 60 \text{ W/(mK)}$ ,  $c_p=200$

$\text{J/kgK}$ ,  $\rho=7500 \text{ kg m}^{-3}$ ,  $\alpha= 4 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $\nu=8 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $L_F=6 \times 10^4 \text{ J kg}^{-1}$ ,  $T_F= 232$  °C,  $\beta=8/3 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ .

Le caratteristiche geometriche imposte prevedono un'altezza della cavità  $L=0.1$  m.

Viene quindi imposta una condizione di aderenza sulle pareti della cavità e l'adiabaticità delle pareti orizzontali. Lungo una parete verticale si impone una differenza di temperatura  $\Delta T=3$  °C rispetto alla temperatura  $T_F$  che è anche condizione al contorno lungo la seconda parete verticale. La condizione iniziale prevede una temperatura uniforme del materiale all'interno della cavità  $T_i=T_F$ .

I parametri adimensionali che caratterizzano il problema esaminato sono:  $Ra=2.5 \times 10^5$ ,  $Pr=0.02$ ,  $Ste=0.01$ .

E' quindi possibile calcolare i valori delle grandezze adimensionali che compaiono nelle equazioni (2.1.20)-(2.1.22)-(2.1.24):

$$\frac{1}{\sqrt{Gr}} = 2.83 \cdot 10^{-4} \quad \frac{Da}{\sqrt{Gr}} = 7.65 \cdot 10^{-2} \quad \beta_T \Delta T = 8 \cdot 10^{-4}$$

Dove il valore di  $Da$  è calcolato per una permeabilità corrispondente ad una frazione solida  $fs=0.5$ .

Le grandezze che interessando la conservazione dell'energia assumono invece i seguenti valori:

$$\frac{1}{Ste} = 100 \quad Ra \cdot Pr = 5 \cdot 10^3$$

#### Caso 3

Il secondo caso affrontato per via numerica (Caso 3) è riferito a caratteristiche termofisiche dell'octodecano:  $k = 0.2 \text{ W/mK}$ ;  $c_p = 1250 \text{ J kgK}^{-1}$ ;  $\rho=800 \text{ kg m}^{-3}$ ;  $\alpha = 2 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ ;  $\nu=10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ ;  $T_F= 30$  °C;  $\beta_T=2 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ ;  $L_F = 1.25 \cdot 10^5 \text{ Jkg}^{-1}$

Le condizioni al contorno sono le stesse del caso precedente, fatta eccezione per la differenza di temperatura imposta alla parete calda, pari a  $\Delta T=10$  °C. Anche in questo caso la temperatura iniziale della sostanza all'interno della cavità corrisponde a quella di cambiamento di fase  $T_F$ . I parametri adimensionali corrispondenti sono:  $Ra=10^7$ ,  $Pr=50$ ,  $Ste=0.1$ .

Le grandezze caratteristiche adimensionali precedentemente individuate assumono per il Caso 3 i seguenti valori:

$$\frac{1}{\sqrt{Gr}} = 7.07 \cdot 10^{-4} \qquad \frac{Da}{\sqrt{Gr}} = 3.06 \cdot 10^{-2} \qquad \beta_T \Delta T = 2 \cdot 10^{-3}$$
$$\frac{1}{Ste} = 10 \qquad Ra \cdot Pr = 5 \cdot 10^8$$

### 2.1.6 Risultati

In una prima sessione di studio è stato preso in considerazione il Caso 2, e si è proceduto ad una validazione dei risultati ottenuti in regime di sola conduzione.

I risultati ottenuti da questa prima fase, riportati in Fig. 2.1.4 e Tab. 2.1.2-2.1.3, sono stati studiati confrontando il valore di flusso termico medio calcolato lungo la parete calda con la soluzione analitica di Neumann [7](Eq. 2.1.6), presa a riferimento.

Il calcolo del valore del flusso medio lungo la parete calda è stato effettuato considerando in diversi istanti temporali i flussi termici adimensionali calcolati per via numerica e integrando lungo il lato L della cavità secondo la regola di Simpson, secondo la formula:

$$\Phi = \sum_{i=0}^N \frac{(q_i - q_{i+1})}{2 \cdot k(T_H - T_F)} (y_i - y_{i+1}) \qquad (2.27)$$

dove  $x_i$  è la coordinata del nodo i-esimo di parete e  $q_i$  il flusso termico calcolato nel nodo. Si è poi proceduto alla determinazione dell'interfaccia in corrispondenza dei seguenti valori di frazione solida:  $fs=0$ ,  $fs=0.5$ ,  $fs=1$ . Le distanze dell'interfaccia dalla parete calda sono riportate in Tab. 2.1.3 e confrontate con la soluzione analitica di riferimento (Eq. 2.1.5).

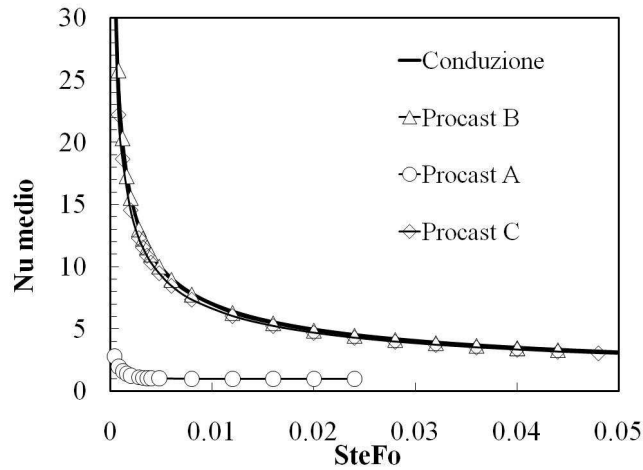


Fig. 2.1.4 Risultati simulazioni in regime di sola conduzione: effetto dell'intervallo di CF

Tab.2.1.2 - Risultati della simulazione B.

SteFo	flusso di parete		interfaccia			
	analitico	numerico	analitico	numerico		
			x(m)	fs=1	fs=0.5	fs=0
			x(m)	x(m)	x(m)	x(m)
0.00039	35.6	33.6	0.003	0.024	0.009	0.004
0.00079	25.1	25.8	0.004	0.099	0.022	0.004
0.00119	20.4	20.3	0.005	0.100	0.030	0.005
0.00199	15.8	15.5	0.006	0.100	0.043	0.008
0.00279	14.4	13.0	0.007	0.100	0.047	0.009
0.00319	13.4	12.2	0.008	0.100	0.050	0.009
0.00359	12.5	11.5	0.009	0.100	0.053	0.011
0.00399	11.8	11.0	0.009	0.100	0.054	0.011
0.00479	11.2	10.0	0.010	0.100	0.055	0.012
0.00599	9.11	8.93	0.011	0.100	0.056	0.013
0.00800	7.89	7.75	0.013	0.100	0.057	0.014
0.01200	6.44	6.27	0.016	0.100	0.058	0.017
0.01600	5.58	5.44	0.018	0.100	0.059	0.021
0.02000	4.99	4.85	0.020	0.100	0.061	0.022
0.02399	4.56	4.43	0.022	0.100	0.061	0.023

**Tab. 2.1.3 - Risultati della simulazione C.**

SteFo	flusso di parete		interfaccia			
	analitico	numerico	analitico	numerico		
			x(m)	fs=1	fs=0.5	fs=0
			x(m)	x(m)	x(m)	x(m)
0.00040	33.8	32.2	0.003	0.072	0.003	
0.00080	24.4	22.2	0.004	0.088	0.005	0.002
0.00120	20.1	18.7	0.005	0.092	0.005	0.003
0.00200	15.6	14.6	0.006	0.094	0.007	0.004
0.00280	13.3	12.3	0.007	0.096	0.007	0.005
0.00320	12.4	11.6	0.008	0.097	0.008	0.005
0.00360	11.7	10.9	0.009	0.097	0.009	0.006
0.00400	11.1	10.3	0.009	0.098	0.009	0.006
0.00480	10.2	9.5	0.010	0.1	0.010	0.007
0.00600	8.83	8.48	0.011	0.1	0.011	0.007
0.00800	7.70	7.36	0.013	0.1	0.012	0.009
0.01200	6.34	6.04	0.016	0.1	0.015	0.011
0.01600	5.51	5.24	0.018	0.1	0.017	0.012
0.02000	4.94	4.70	0.020	0.1	0.019	0.013
0.02400	4.52	4.29	0.022	0.1	0.021	0.014

La Fig. 2.1.4 mostra come un intervallo di temperatura di definizione di mush region eccessivamente piccolo, pari cioè a  $\Delta T_\varepsilon=0.01^\circ\text{C}$  (Simulazione A) porti a scostamenti significativi della curva di riferimento con una pronunciata sovrastima dello scambio termico a parete e un rapido decadimento del flusso medio calcolato.

Le soluzioni numeriche che forniscono valori di flusso termico di parete più vicini ai valori analitici sono quelli ricavati ipotizzando un intervallo di mush region  $\Delta T_\varepsilon =0.1^\circ\text{C}$  (Simulazione B) oppure  $\Delta T_\varepsilon=1^\circ\text{C}$  (Simulazione C).

Per quanto concerne invece il posizionamento dell'interfaccia di cambiamento di fase, come è possibile osservare dai valori riportati in Tab. 2.1.2-2.1.3, riferite alle simulazioni B e C, il posizionamento dell'interfaccia in corrispondenza del valore  $fs=0.5$ , preso a riferimento dalla maggior parte dei contributi al benchmark, porta a risultati lontani da quelli analitici. I valori della coordinata di interfaccia che sono risultati confrontabili con la soluzione di Neumann si hanno in corrispondenza di  $fs=1$ , ovvero sul piano di separazione tra fase liquida e mush region.

Dalla lettura della coordinata del piano di separazione tra la zona di solido e la zona in cambiamento di fase ( $fs=1$ ), si osserva come, in tutte le simulazioni confrontate, questo si collochi rapidamente in prossimità della parete fredda, indicando la presenza di una mush region che si diffonde rapidamente e che interessa l'intero dominio della cavità fin dai primi istanti di osservazione.



Questo fenomeno inoltre, fa cadere l'ipotesi di parete seminfinita su cui si basa la formulazione analitica di Neumann ed è strettamente legato alla "criticità" prevista dal benchmark nell'assumere come valore di temperatura iniziale del dominio quello di cambiamento di fase.

Per ovviare al problema incontrato si è quindi assunto per la temperatura iniziale e come temperatura al contorno di parete fredda un valore di 231.9 °C (Simulazione D), quindi leggermente inferiore a quella di cambiamento di fase, sotto l'ipotesi  $\Delta T_e = 0.1^\circ\text{C}$ .

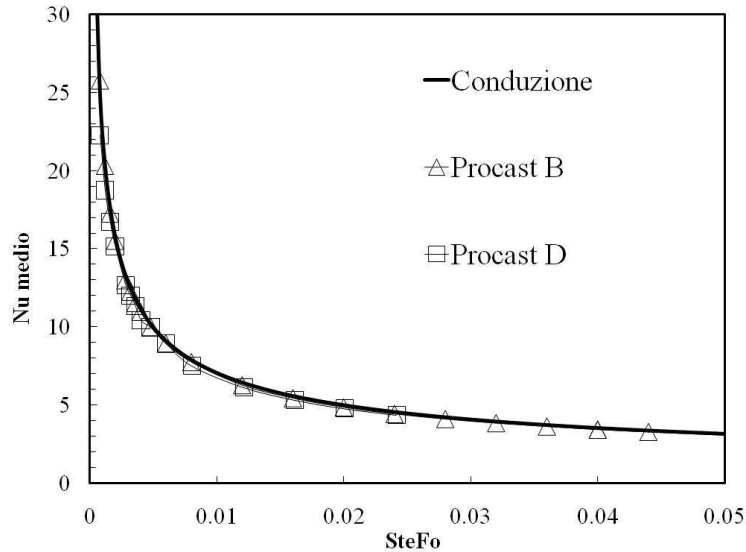
In questo modo si è ottenuta una zona di mush più ristretta e la presenza di una percentuale di fase solida per tutta la durata del fenomeno (Tab. 2.1.4) ricavando valori di flusso termico adimensionale vicini a quelli ottenuti dalle simulazioni svolte sotto la precedente ipotesi (Fig. 2.1.5).

Nella seconda fase il Caso 2 è stato affrontato includendo la circolazione del fluido nella zona di liquido. In questa fase l'analisi dei risultati si è concentrata sul confronto fra il numero di Nusselt medio calcolato lungo la parete calda secondo la (2.27), e la correlazione di riferimento di Gobin e Benard [6].

Inizialmente l'attenzione è stata concentrata sul corretto intervallo di temperatura entro cui definire la "mushy region" prendendo quindi in considerazione i seguenti valori:  $\Delta T_e = 0.1$  e  $\Delta T_e = 0.2$ .

**Tab. 2.1.4 - Risultati della simulazione D**

SteFo	flusso di parete		interfaccia			
	analitico	numerico	analitico	numerico		
			x(m)	fs=1	fs=0.5	fs=0
			x(m)	x(m)	x(m)	x(m)
0.00080	24.4	22.2	0.004	0.03	0.014	0.005
0.00120	20.1	18.7	0.005	0.037	0.019	0.006
0.00200	15.6	15.1	0.006	0.046	0.024	0.007
0.00283	13.3	12.7	0.008	0.052	0.029	0.009
0.00323	12.4	12.0	0.008	0.053	0.029	0.009
0.00360	11.7	11.3	0.009	0.054	0.031	0.011
0.00405	11.1	10.4	0.009	0.055	0.032	0.011
0.00479	10.2	10.0	0.010	0.056	0.033	0.011
0.00599	8.83	8.93	0.011	0.056	0.035	0.013
0.00805	7.70	7.47	0.013	0.058	0.036	0.014
0.01215	6.34	6.10	0.016	0.060	0.039	0.017
0.01615	5.51	5.30	0.018	0.061	0.041	0.020
0.02005	4.94	4.76	0.020	0.063	0.042	0.021
0.02415	4.52	4.34	0.022	0.063	0.045	0.024



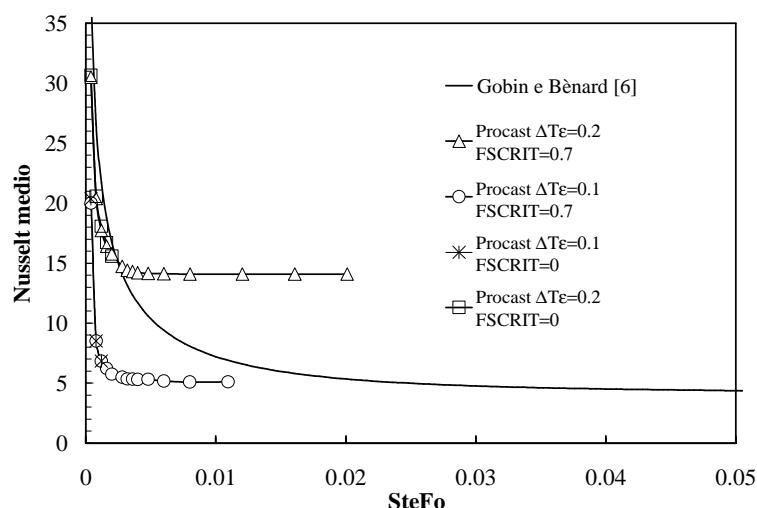
**Fig. 2.1.5 Risultati numerici in regime di sola conduzione: effetto della temperatura iniziale**

Come osservabile in Fig. 2.1.5 Il valore assegnato all'intervallo di temperatura  $\Delta T_e$  influisce sul valore del numero di Nusselt asintotico. Un valore  $\Delta T_e=0.1$  ha permesso di ottenere un valore asintotico del numero di Nusselt vicino a quello della correlazione di Gobin e Benard [6], in accordo anche con quanto ottenuto dall'analisi svolta trascurando la circolazione del liquido.

Indipendentemente dal valore di questo parametro, la fase iniziale, caratterizzata dal predominio dello scambio termico conduttivo, non è risultata correttamente risolta.

In una fase successiva è stata valutata l'influenza di un'ulteriore variabile prevista dal codice che permette di definire il valore limite di frazione di solida sotto il quale il materiale viene considerato liquido (parametro di seguito definito FSCRIT).

L'importanza di questo parametro e l'influenza sui risultati è principalmente legata alla presenza o meno dell'ultimo termine nell'equazione di conservazione della quantità di moto (Eq. 2.13). Infatti in tutti i punto del dominio in cui il valore di temperatura calcolato è corrispondente a valori di  $f_s$  compresi tra 0 e FSCRIT il codice calcola le dinamiche di moto fluido sia nella zona di liquido ( $f_s=0$ ) sia nella regione pastosa ( $f_s>0$ ), attraverso l'equazione (2.13), dove l'ultimo termine tiene in conto degli effetti penalizzanti legati alla formazione della matrice solida. Nelle celle del dominio di calcolo in cui il valore di  $f_s$  è corrispondente alla  $T$  calcolata



**Figura 2.1.6 Risultati numerici in regime di convezione: effetto dell'intervallo di CF**

supera il limite critico FSCRIT, il sistema di equazioni che governa il problema non comprende l'equazione del moto, e si limita a risolvere la propagazione di calore per conduzione nella fase solida. Il codice assume di base come valore critico FSCRIT=0.7.

I valori considerati sono: FSCRIT=0.7 (valore di default del codice) e FSCRIT=0. Il confronto delle curve di andamento del numero di Nusselt medio di parete è riportato in Fig. 2.1.6. I calcoli sono stati interrotti una volta stabilizzatosi il valore del numero di Nusselt.

Quello che ci si attende è che nella fase iniziale della fusione prevalga un comportamento di tipo conduttivo, mentre per tempi più lunghi la convezione diventi significativa. Tale andamento (Fig. 2.1.6) resta confermato solo in larga misura, in quanto è evidente che il numero di Nusselt medio alla parete calda cala più rapidamente del previsto e si attesta rapidamente sui valori caratteristici di uno stato stazionario. Infine, l'intervento sul parametro FSCRIT non ha influito sui risultati delle simulazioni.

L'esame dell'evoluzione dell'interfaccia mostra come, per tutti e quattro i casi di Fig. 2.1.6, il cambiamento di fase solido-liquido sia piuttosto rapido e interessi rapidamente tutta la cavità. Partendo da quanto ottenuto nella fase di studio in regime di sola conduzione, è stata imposta una temperatura iniziale e di contorno sulla parete

fredda di 231.9 °C al fine di ottenere un restringimento della "mushy region" e, di conseguenza, della zona di liquido in cui promuovere il campo di moto.

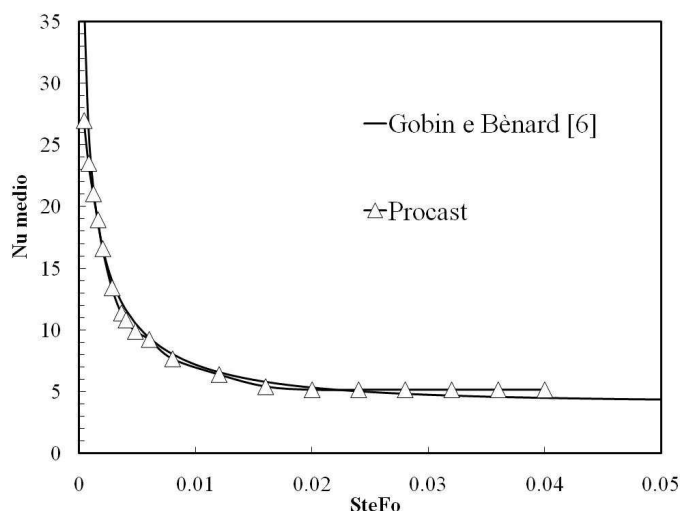
Infatti, la rapidità con cui viene a svilupparsi il ricircolo convettivo è risultata dipendere dalla percentuale di frazione di liquido via via formatosi all'interno del dominio.

Come secondo “espediente” per frenare l’insorgere del moto convettivo, si è intervenuti sulla frequenza di risoluzione dell’equazione di conservazione della quantità di moto. Le equazioni del moto sono state risolte ogni 200 passi temporali (intervenendo sul parametro definito FFREQ) fino a un tempo adimensionale  $SteFo=0.05$ , ogni 70 passi fino al tempo  $SteFo=0.012$  e solo da questo istante in avanti a ogni iterazione.

I risultati ottenuti sono riportati in Fig. 2.1.7 e in Tab. 2.1.5; l’andamento del numero di Nusselt approssima meglio la curva di riferimento, pur attestandosi su un valore asintotico leggermente superiore. L’avanzamento dell’interfaccia non viene proposto in quanto, come già emerso dall’analisi della conduzione, la presenza della “mushy region” rende difficile il confronto con soluzioni ottenute escludendo l’esistenza di zona bifasica.

**Tab. 2.1.5 Risultati caso 2 - convezione**

<b>SteFo</b>	<b>Gobin e</b>	<b>numerico</b>	<b>FFREQ</b>
	<b>Benard [6]</b>		
	<b>Nusselt</b>	<b>Nusselt</b>	
0.000396	37.5	27.0	
0.000797	26.6	23.5	
0.001196	21.8	21.0	
0.001596	18.8	18.9	
0.002000	16.8	16.6	200
0.002799	14.1	13.4	
0.003599	12.4	11.4	
0.003999	11.7	10.8	
0.004798	10.6	9.89	
0.005996	9.41	9.23	
0.007998	8.08	7.66	70
0.011998	6.60	6.38	
0.016003	5.82	5.41	
0.019999	5.35	5.15	
0.023998	5.05	5.15	
0.028002	4.84	5.15	1
0.031998	4.70	5.15	
0.035998	4.59	5.15	
0.039998	4.51	5.15	



**Fig. 2.1.7 Risultati numerici in regime di convezione: frequenza di risoluzione del campo di moto variabile (caso 2)**

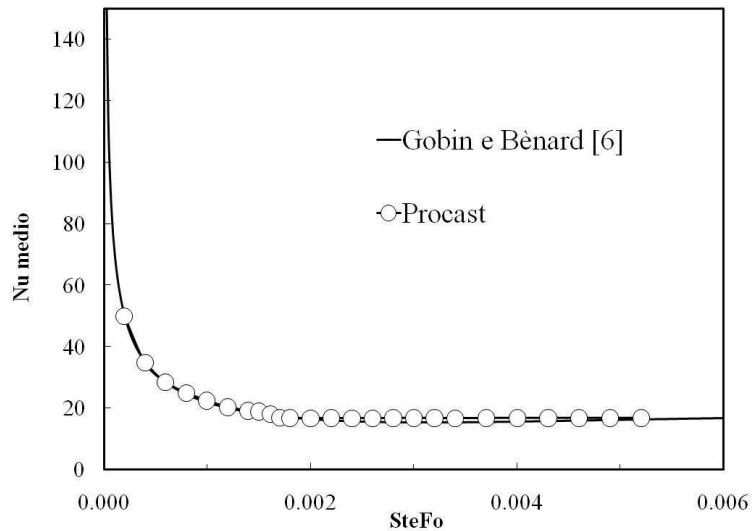
Tuttavia si può dire che, almeno qualitativamente, l'avanzamento dell'interfaccia è quello atteso, con una maggiore penetrazione della zona fusa nella parte superiore della cavità.

Infine, per il Caso 3 in esame è stato fatto un ulteriore cambiamento di strategia, risolvendo il problema in completa assenza di moto per i primi 800 s (sola conduzione), attivando il solutore del moto da quest'istante in poi (convezione).

I risultati di questa simulazione sono riportati in Fig. 2.1.8 dove è possibile osservare come l'andamento del numero di Nusselt medio approssima bene la curva di riferimento [6] per quasi tutta la sua estensione e presenta una leggera discontinuità in corrispondenza dell'istante in cui viene incluso nel calcolo il moto del fluido.

Il valore del numero di Nusselt asintotico su cui si assesta la curva risulta essere ancora più vicino a quello di riferimento rispetto alle altre strategie di calcolo utilizzate in precedenza (fluido sempre in moto e soluzione del moto con frequenza diversa dalla temperatura).

La scelta dell'istante in cui iniziare il calcolo del campo di velocità si è però dimostrato di difficile determinazione rendendo quindi la strategia impiegata poco incline a possibili applicazioni in casi diversi da quello di studio.



**Fig. 2.1.8 Risultati delle simulazione in regime di conduzione seguita da convezione (caso 3)**

### **Risultati ottenuti con il codice PROCAST v.2009**

In una fase successiva lo studio è stato affrontato applicando una versione aggiornata del codice di calcolo che implementa un diverso schema risolutivo dell'equazione di conservazione dell'energia (2.11), consentendo di impiegare l'entalpia come variabile principale.

A tal proposito occorre specificare che non è stato possibile trovare nella manualistica del software [31], dei riferimenti specifici al particolare schema risolutivo adottato nel risolvere l'equazione di bilancio (2.11).

Alcune considerazioni possono però essere effettuate rimandando al Cap. 1.6.4, dove vengono messe in luce le criticità intrinseche di metodi numerici basati sulla capacità termica apparente, soprattutto per quello che concerne la risoluzione del termine capacitivo e le strategie di calcolo delle due incognite: la temperatura e curva di frazione di solido in funzione della temperatura.

E' infatti noto, riferendosi a esempi applicativi riportati in letteratura [16], come la particolare strategia risolutiva di questo termine, che può essere di tipo implicito o esplicito, può influire in maniera determinante sulla correttezza della soluzione numerica.

*Fase 1 – Conduzione*

Inizialmente è stato risolto il Caso 2 in regime di sola conduzione, al fine di verificare la consistenza dei risultati forniti dalla nuova versione del codice di calcolo, concentrando l'attenzione sulla previsione di avanzamento del fronte di solidificazione. Sfruttando i risultati e le considerazioni scaturite dalla precedente esperienza, per risolvere il problema in regime di sola conduzione, si è fatto ricorso ad un passo temporale di  $10^{-2}$  s e si è impostata un intervallo di temperatura di cambiamento di fase  $\Delta T_e = 0.1$  °C , risolvendo quindi il problema secondo la strategia adottata in Sim B (Cap. 2.1.4).

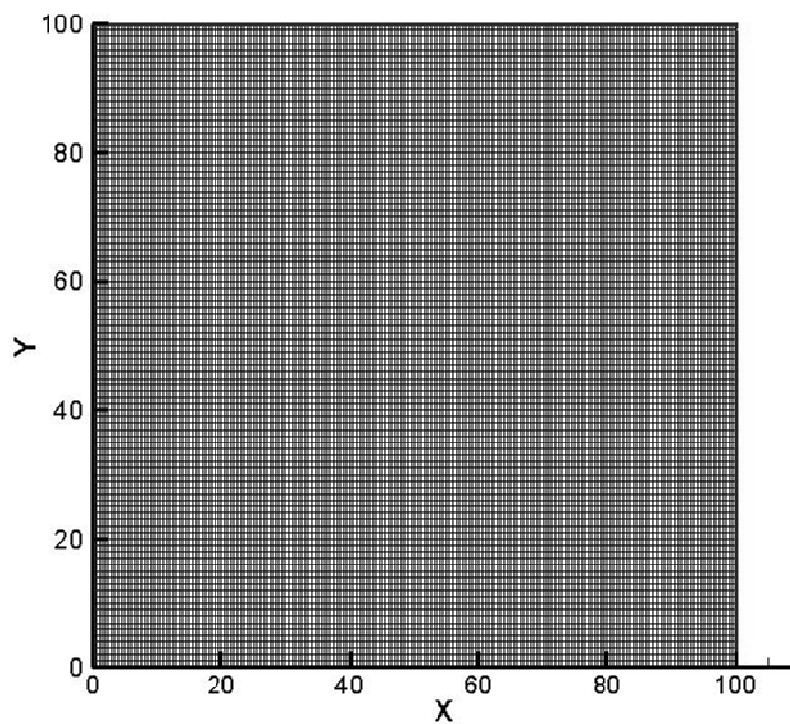
Il problema è stato risolto mediante una griglia ad elementi triangolare avente lo stesso grado di raffinatezza dello studio condotto in precedenza.

I risultati ottenuti al termine di questa prima fase di nuova campagna di sperimentazione numerica hanno mostrato un buon livello di accuratezza nella soluzione del problema di Neumann.

Come è possibile osservare dai dati in Tab. 2.1. confrontando le distanze raggiunte dalle isocurve riferite ai due valori di frazione di solido che delimitano la mushy, il posizionamento dell'interfaccia risulta calcolato numericamente in maniera significativamente più accurata. Dalla differenza tra le coordinate corrispondenti a  $fs=1$  e  $fs=0$  è possibile notare come la zona di CF sia questa volta limitata ad un ristretto intervallo dimensionale, in accordo con soluzioni numeriche fornite dagli altri contributi [1].

**Tabella 2.1.6 Confronto avanzamento interfaccia v.2004-v.2009(conduzione)**

SteFo	analitico	v. 2004 (Sim B)		v. 2009	
		fs=1	fs=0	fs=1	fs=0
	x(m)	x(m)	x(m)	x(m)	x(m)
0.00039	0.003	0.024	0.004	0.0085	0.003
0.00079	0.004	0.099	0.004	0.009	0.004
0.00119	0.005	0.100	0.005	0.011	0.005
0.00199	0.006	0.100	0.008	0.013	0.007
0.00279	0.007	0.100	0.009	0.015	0.008
0.00319	0.008	0.100	0.009	0.015	0.009
0.00359	0.009	0.100	0.011	0.016	0.01
0.00399	0.009	0.100	0.011	0.017	0.011
0.00479	0.010	0.100	0.012	0.019	0.012
0.00599	0.011	0.100	0.013	0.020	0.014
0.00800	0.013	0.100	0.014	0.022	0.015
0.01200	0.016	0.100	0.017	0.026	0.019
0.01600	0.018	0.100	0.021	0.030	0.022
0.02000	0.020	0.100	0.022	0.032	0.025
0.02399	0.022	0.100	0.023	0.034	0.026



**Fig.2.1.9** Griglia di calcolo fase 2 (convezione)

*Fase 2 Convezione*

Il Caso 2 e il Caso 3 sono stati quindi nuovamente affrontati mediante l'applicazione della v.2009 del codice di calcolo, sfruttando il nuovo schema risolutivo, discretizzando nuovamente il dominio secondo una griglia ortogonale ad elementi rettangolari ottenuti suddividendo i lati  $x$  e  $y$  del dominio rispettivamente in 200 e 100 parti con passo costante (Fig. 2.1.9)

Tramite questa griglia strutturata è stato quindi studiato il Caso 2 risolvendo fin dall'istante iniziale il sistema accoppiato comprendente l'equazione dell'energia



nella variabile entalpia e le equazioni del moto. Il passo temporale impiegato è stato di 0.01s.

I risultati ottenuti hanno mostrato un comportamento differente rispetto alle soluzioni precedentemente trovate.

Il campo termico mostra ancora, nei primi 100 secondi di propagazione una stratificazione termica riconducibile ad un regime di pura conduzione, in accordo con quanto previsto dall'analisi di scala.

A partire dall'istante adimensionale  $t^*=0.01$ , corrispondente all'istante dimensionale  $t=250$  s, possono essere osservate degli iniziali scostamenti dei profili isotermici rispetto alla verticale con deformazioni che tendono ad accentuarsi con l'avanzare del fenomeno fino al raggiungimento della distribuzione di temperatura riportata in Fig. 2.1.13.

Osservando il campo di moto negli stessi istanti (Fig. 2.1.14 – 2.1.21), si osserva come il ricircolo convettivo previsto all'istante  $t^*=0.004$ , presenta alcuni punti di iniziale instabilità, ancora più evidenti se si osservano le linee di flusso riportate in Fig. 2.1.15.

Con il procedere del fenomeno, osservando il moto innescatosi nello strato di fluido si osserva una tendenza alla formazione di piccoli ricircoli lungo l'altezza della cavità. Questo comportamento trova un periodo di momentanea stabilità in corrispondenza dell'istante  $t^*=0.01$  con la formazione di tre distinti ricircoli (Fig. 2.1.16).

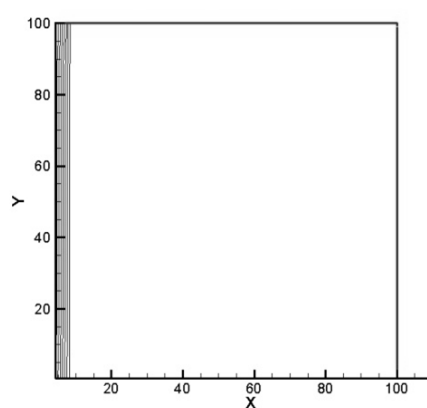
Con il procedere dell'interfaccia verso la parete fredda, si assiste alla graduale fusione dei suoi ricircoli inferiori e un incremento della dimensione del ricircolo nella zona superiore.

Il fenomeno all'istante  $t^*=0.10$  mostra quindi condizioni quasi stazionarie con la presenza di una vasta area di circolazione che coinvolge la metà superiore della cavità e un ricircolo più piccolo nella zona inferiore.

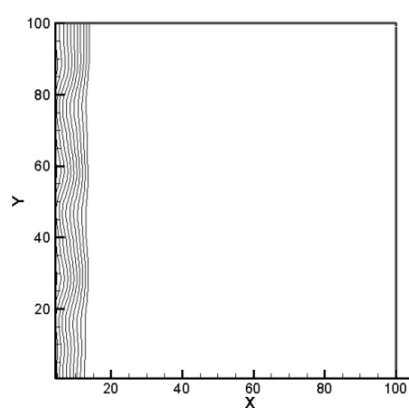
Ne consegue che l'interfaccia di cambiamento di fase assume un profilo fortemente distorto con precisi punti di discontinuità in corrispondenza dei punti di tangenza dei diversi ricircoli.

Se si osserva la curva di andamento del valore di Nu calcolato lungo la parete riscaldata (Fig. 2.1.22) e dal confronto riportato in Tab. 2.1.7, si osserva come in questo caso i valori numerici approssimino in maniera sufficientemente adeguata la curva di correlazione [6].

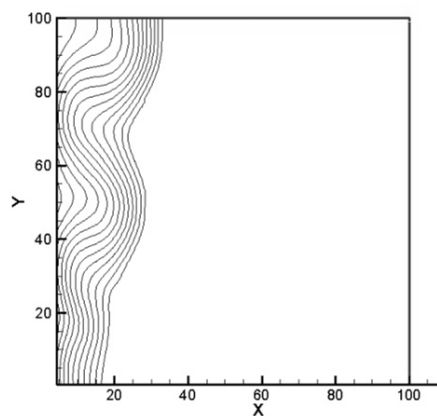
Questo comportamento del moto convettivo all'interno del fluido fu trovato per la prima volta per via numerica da Dantzig, il quale nel 1989 propone in [16] i risultati ottenuti da un'attività di sperimentazione numerica condotta studiando la fusione in cavità quadrata di una sostanza a basso numero di Pr come il gallio. Dantzig risolve il problema attraverso un metodo agli elementi finiti applicato ad una formulazione entalpica basata sulla capacità termica apparente vista nel Cap. 1.6.



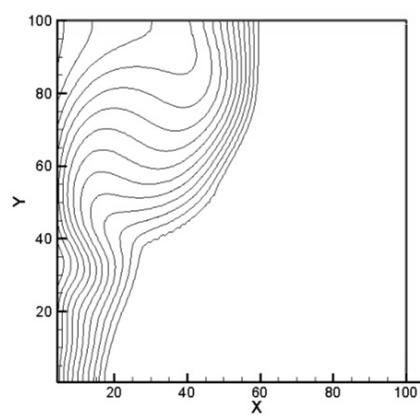
**Fig. 2.1.10** Caso2- isoterme  $t^*=0.004$



**Fig. 2.1.11** Caso2 -isoterme  $t^*=0.01$



**Fig. 2.1.12** isoterme  $t^*=0.04$



**Fig. 2.1.13** isoterme  $t^*=0.10$

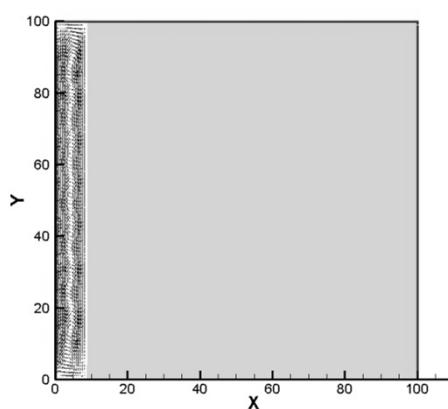


Fig. 2.1.14 Campo di moto  $t^*=0.004$

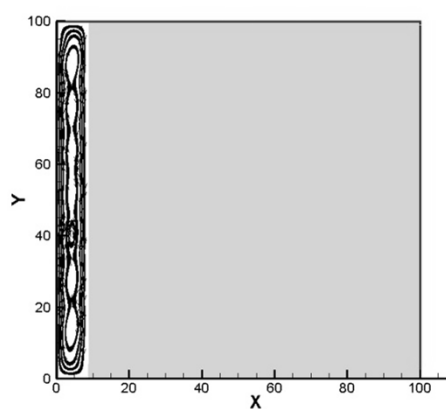


Fig. 2.1.15 Streamline  $t^*=0.004$

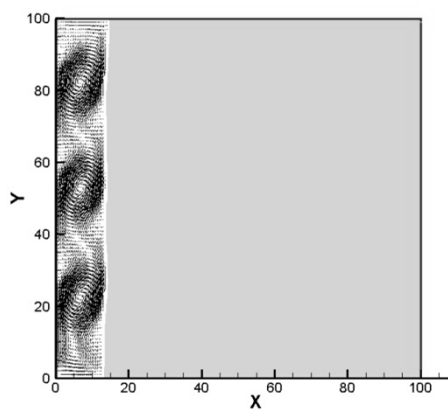


Fig. 2.1.16 Campo di moto  $t^*=0.01$

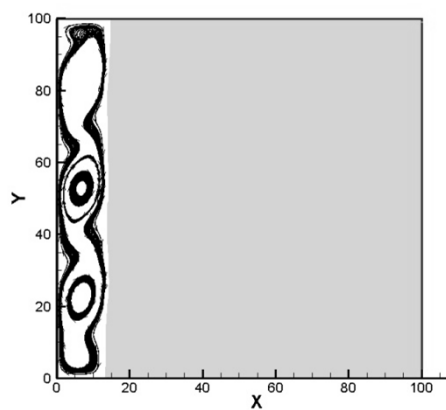


Fig. 2.1.17 Streamline  $t^*=0.01$

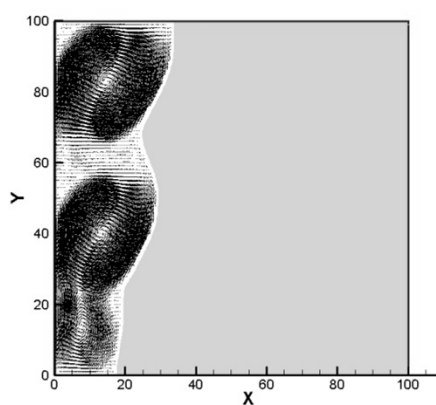


Fig. 2.1.18 Campo di moto  $t^*=0.04$

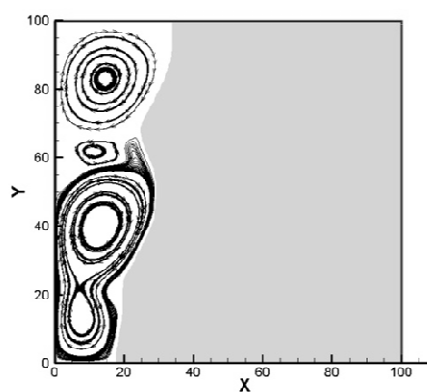


Fig. 2.1.19 Streamline  $t^*=0.04$

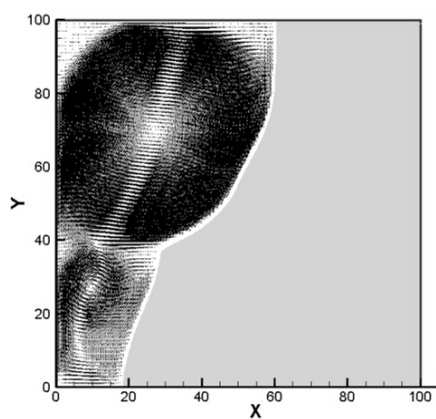


Fig. 2.1.20 Campo di moto  $t^*=0.10$

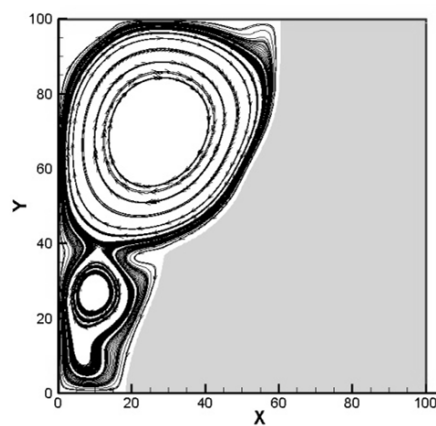


Figura 2.1.21 Streamline  $t^*=0.10$

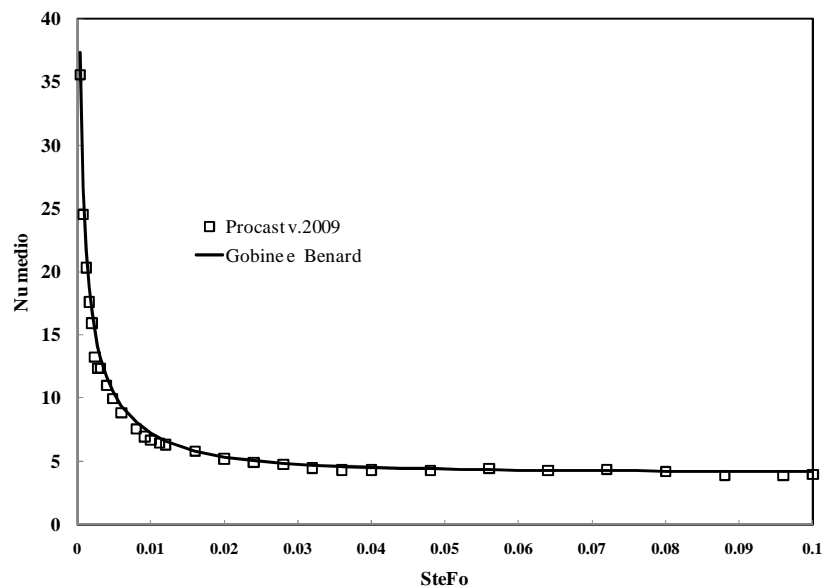


Fig. 2.1.22 Caso 2 – Andamento del Nu medio (v.2009)

Rimaneggiando secondo questa formulazione le equazioni di base implementate sul codice commerciale FIDAP, e impiegando una griglia adattativa nella zona di liquido, i risultati proposti da Dantzig mostrano un comportamento del moto nella zona fluida corente con quanto ottenuto nel presente studio applicato al Caso 2 (basso numero di Pr).

L'innesco graduale della convezione avviene anche nel caso del gallio con l'iniziale comparsa comparsa di strutture multicellulari lungo l'altezza della cavità e la successiva fusione dei ricircoli in strutture più grandi con la stabilizzazione del fenomeno in presenza di due ricircoli convettivi, di cui uno di maggiore estensione collocato nella zona alta della cavità.

L'Autore si sofferma su un'attenta analisi dei risultati presentati, ricercando le cause di significativi scostamenti, nella previsione dei moti convettivi, da quanto mostrato in precedenza da Voller e Prakash [30] attraverso l'applicazione del modello numerico da loro proposto.

Dantzig sottolinea in particolare il ricorso nella soluzione di Voller a schemi risolutivi di calcolo di tipo up-wind, che, come noto, sono caratterizzati dalla presenza di una forte diffusione numerica.

**Tab. 2.1.7 Risultati caso 2 - convezione**

SteFo	Gobin e v.2009	
	Benard [6]	Nusselt
0.000396	37.5	35.6
0.000797	26.6	24.5
0.001196	21.8	20.3
0.001596	18.8	17.6
0.002000	16.8	15.9
0.002799	14.1	13.2
0.003999	11.7	11.0
0.004798	10.6	9.94
0.005996	9.41	8.82
0.007998	8.08	7.55
0.011998	6.60	6.32
0.016003	5.82	5.80
0.019999	5.35	5.19
0.023998	5.05	4.93
0.028002	4.84	4.76
0.031998	4.70	4.48
0.035998	4.59	4.31
0.039998	4.51	4.27

Tra i risultati presentati in [16] viene inoltre mostrato come l'applicazione dello modello impiegato, risolto tramite schema up-wind fornisca risultati in accordo con la soluzione di Voller, non evidenziando strutture multicellulari all'interno del liquido, presentando altresì la formazione di un unico ricircolo convettivo che interessa la cavità in tutta la sua altezza.

Come seconda giustificazione dei risultati presentati l'Autore segnala la differente dimensione caratteristica della griglia che, nella soluzione di Voller, non risulta adeguatamente raffinata per potere cogliere strutture fluidodinamiche di piccole dimensioni.

In ultimo in [16] vengono effettuate alcune considerazioni in merito ai risultati di precedenti esperienze sperimentali condotte da Gau e Viskanta [23] mediante osservazione della solidificazione-fusione in cavità rettangolare riempita da gallio puro. Dantzig sottolinea infine che la sola osservazione del fronte di avanzamento del cambiamento di fase per via sperimentale non è in grado di escludere o confermare la presenza di strutture multicellulari nella zona di liquido.

Nel corso degli anni le strutture multicellulari che compaiono nei risultati qui proposti sono state confermate da alcuni Autori [27]-[28]-[29], e non individuate in altri contributi [17].

Il confronto tra risultati del Caso 2, riportati in [1]-[2] pur non effettuando un confronto del campo di moto all'interno della zona di liquido, mostrano in cinque contributi su dieci un profilo di interfaccia di cambiamento di fase all'istante  $t^*=0.004$  in pieno accordo con quello riportato in Fig. 2.1.19 .

In particolare Gobin e Le Querè in [1] fanno notare come le cinque soluzioni che forniscono un profilo coerente con le ipotesi di presenza di più ricircoli convettivi siano ottenute attraverso diversi modelli matematici basati su formulazioni sia a singolo che a doppio dominio ,risolti con metodi numerici differenti (FEM o FVM) e con schemi risolutivi sia a griglia fissa sia con interfaccia mobile. Questo porta ad escludere l'ipotesi di una maggiore accuratezza o affidabilità di un metodo rispetto all'altro.

Ciò che accomuna tutti i contributi in accordo con la soluzione riportata in questa trattazione è l'impiego di griglie sufficientemente raffinate e schemi risolutivi di ordine più accurato [29].

Gobin in [32] fornisce un approfondimento sul fenomeno di instabilità riscontrato in alcuni contributi al benchmark collegandolo a noti fenomeni di instabilità idrodinamica solitamente noti come "instabilità da regime conduttivo".

L'insorgenza di questi fenomeni di instabilità è legata al valore del numero di Gr ( $g\beta\Delta TL^3/\nu^2$ ), calcolato in base allo spessore L dello strato liquido oppure funzione del numero di Ra (GrPr) e dipende dal particolare fattore di forma della parte di cavità occupata dalla fase liquida.

Da questa analisi di scala risulta che lo strato fluido diventa linearmente instabile quando il valore di Re calcolato in base al rapporto tra numeri di Pr e numero di Gr calcolato su L raggiunge il valore critico:

$$Re_c \cong Gr_c(Pr)/125$$

che, secondo questa analisi, corrisponde all'istante:

$$t_c \cong 0.5 \frac{H^2}{\alpha Ste} \left( \frac{Gr_c}{Gr_H} \right)^{2/3}$$

In corrispondenza di questo istante temporale critico il fattore di forma della cavità è dato da:

$$A_c \cong \left( \frac{Gr_H}{Gr_c} \right)$$

Seguendo quindi le considerazioni riportate in [32], Gobin arriva a concludere che fenomeni di instabilità come quelli trovati numericamente sono da attendersi per sostanze a basso numero di Pr, e per valori di  $Gr \geq 5 \cdot 10^6 \approx 10^7$ .

*Caso 3*

Il Caso 3 è stato quindi risolto attraverso la nuova versione del codice di calcolo risolvendo anche in questo il sistema di equazioni accoppiato. Anche in questo caso si è ottenuta una zona ristretta di cambiamento di fase in accordo con quanto presentato nei contributi messi a confronto.

Ossevando i risultati riportati nelle Fig. 2.1.22-2.1.24 relative alla stratificazione termica a parete, si osserva un profilo coerente con quello atteso e previsto dalle analisi di scala. Osservando in particolare l'avanzamento del profilo di interfaccia nei diversi istanti temporali di controllo si può riscontrare un andamento in pieno accordo con i contributi di altri Autori [1].

Il campo di moto presenta in questo caso un graduale innesco dei moti convettivi in un sottile strato di parete nei primi istanti di osservazione.

Il fenomeno tende quindi a stabilizzarsi con la formazione di un unico ricircolo convettivo che interessa l'intera altezza della cavità, mostrando, come atteso, una penetrazione più accentuata del fronte liquido nella parte superiore della cavità rispetto alla zona inferiore.

Osservando quindi i valori numerici del flusso termico medio calcolato lungo la parete calda (Fig. 2.1.23), si trova un andamento nel tempo che approssima in maniera accettabile la curva di correlazione presa a riferimento (Eq. (2.1.9)).

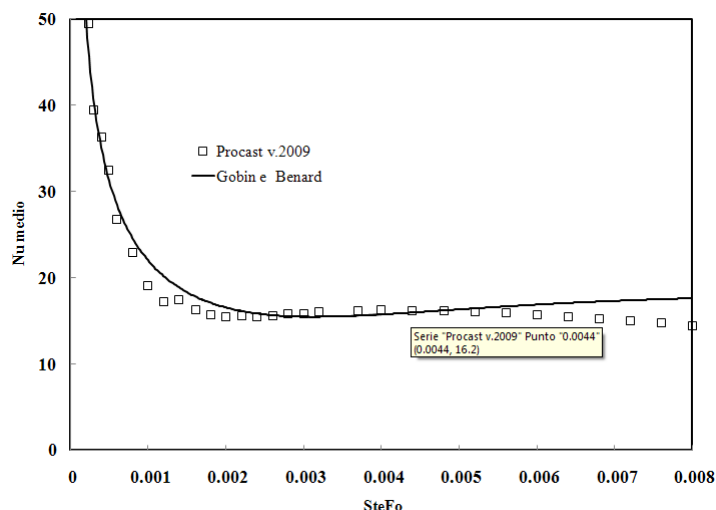
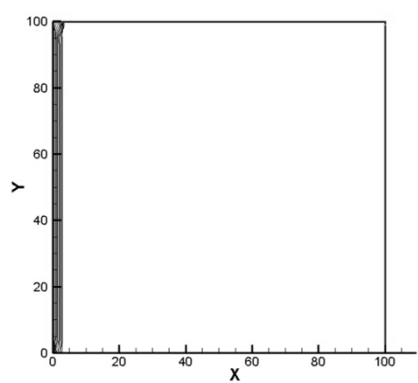


Fig. 2.1.23 Andamento del valore di Nu - Caso 3 (v.2009)

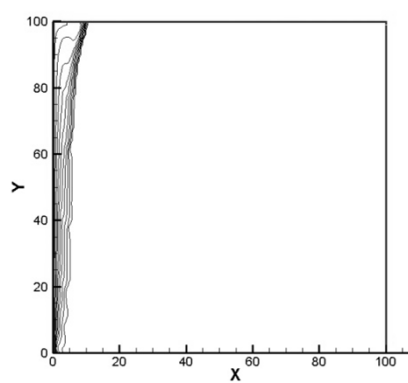


**Tabella 2.1.8 Confronto Nu calcolato-correlazione (Caso 3)**

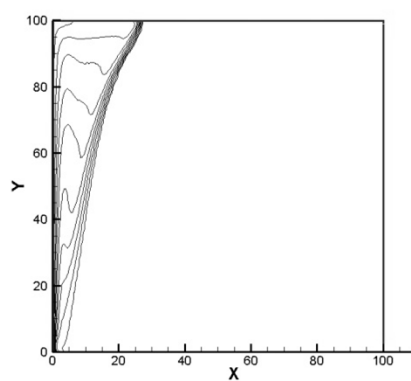
SteFo	Gobin e v.2009 Benard [6]	
	Nusselt	Nusselt
0.00002	158.1	198.1
0.00004	111.8	99.2
0.00006	91.3	98.7
0.00008	79.1	84.4
0.00010	70.7	66.3
0.00014	59.8	65.9
0.00016	55.9	59.4
0.00024	45.6	49.4
0.00030	40.8	39.5
0.00040	35.5	36.3
0.00050	31.8	32.5
0.00080	25.1	22.9
0.00100	22.4	19.1
0.00120	20.4	17.3
0.00180	16.7	15.7
0.00200	15.8	15.5
0.00220	15.1	15.5
0.00300	12.9	15.8
0.00400	11.2	16.3
0.00560	9.4	16.0
0.00600	9.1	15.7
0.00760	8.1	14.7
0.00800	7.9	14.4



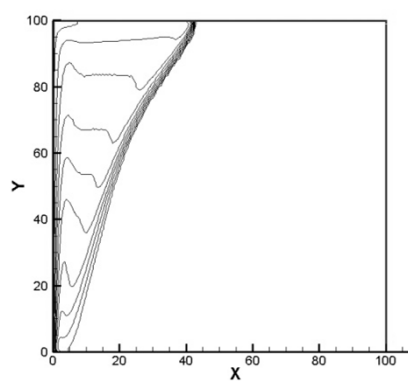
**Fig. 2.1.24** Isotherme  $t^*=0.0005$



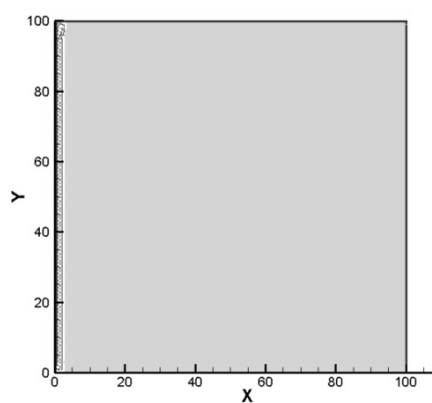
**Fig. 2.1.25** Isotherme  $t^*=0.002$



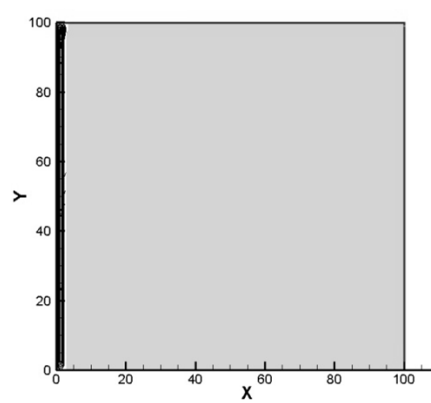
**Fig. 2.1.26** Isotherme  $t^*=0.006$



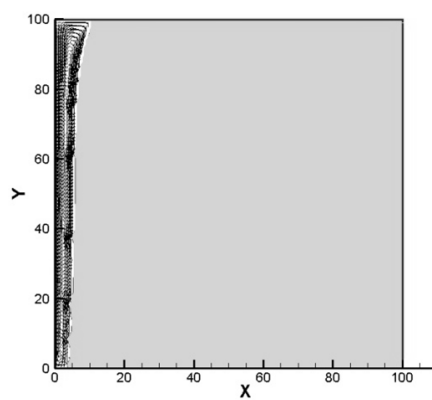
**Fig. 2.1.27** Isotherme  $t^*=0.010$



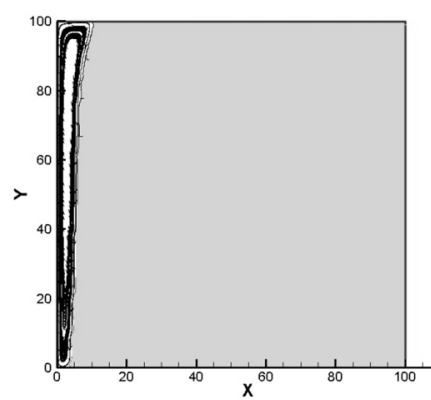
**Fig. 2.1.28** Campo di moto  $t^*=0.0005$   
(caso 3)



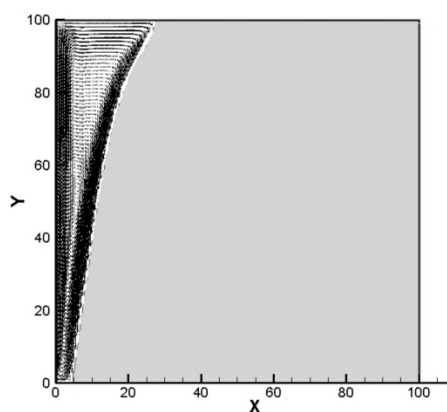
**Fig. 2.1.29** Streamline  $t^*=0.0005$   
(caso 3)



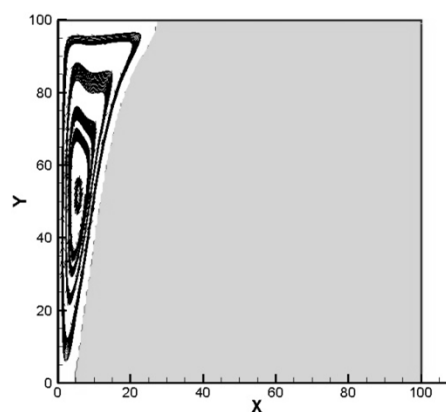
**Fig. 2.1.30** Campo di moto  $t^*=0.002$   
(caso 3)



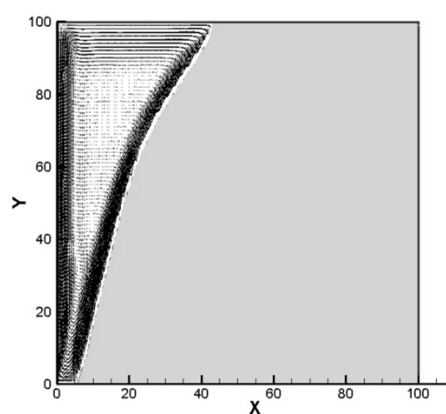
**Fig. 2.1.31** Streamline  $t^*=0.002$   
(caso 3)



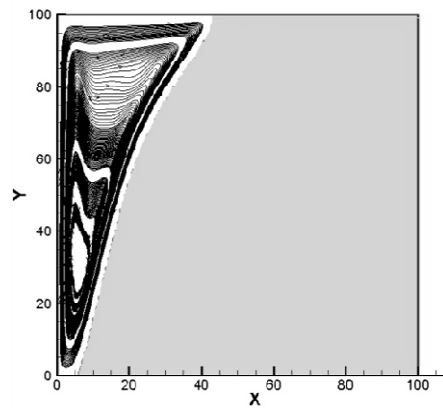
**Fig. 2.1.32 Campo di moto  $t^*=0.006$   
(caso 3)**



**Fig. 2.1.33 Streamline  $t^*=0.006$   
(caso 3)**



**Fig. 2.1.34 Campo di moto  $t^*=0.010$   
(caso 3)**



**Fig. 2.1.35 Streamline  $t^*=0.010$   
(caso 3)**

## Cap. 2.2 Cambiamento di fase per sostanze multicomponente

### 2.2.1 Obiettivi

Dopo avere esposto i risultati raggiunti in alcuni casi applicativi di studio della solidificazione di sostanze pure in presenza di convezione naturale (Cap 2.1), nei successivi capitoli vengono riportati i risultati raggiunti applicando i modelli numerici precedentemente impiegati, per lo studio del processo di fusione in cavità bidimensionale rettangolare di sostanze a due componenti.

A differenza di quanto visto nella prima sezione di questo capitolo, il fenomeno fisico preso in considerazione presenta in questo caso un cambiamento di fase che avviene con la coesistenza in una zona più o meno estesa del dominio di una fase solida-liquida.

La zona di fluido e una parte di mush region risultano quindi interessate da un regime di convezione innescato da gradienti di temperatura e da un contributo dovuto ai gradienti di concentrazione di soluto.

Le diverse concentrazioni di soluto all'interno della zona liquida del dominio, sono da ricondursi ai fenomeni di micro segregazione, i cui effetti possono essere considerati dal punto di vista numerico riconducendosi ad una delle due formulazioni viste nel Cap.1 (regola della leva, Sheil).

I casi presi in esame in questa fase di indagine sono stati:

1. applicazione del codice di calcolo ad un problema già indagato in passato, sia dal punto di vista numerico [13]-[15] che sperimentale [14] e che vede lo studio della solidificazione di una soluzione  $\text{NH}_4\text{Cl}-\text{H}_2\text{O}$  su cui è stato possibile ottenere ampio riscontro di risultati in letteratura
2. applicazione dello studio numerico al caso di solidificazione di una lega Al-6.2%Cu, fornendo un contributo al benchmark discussa a Giens [20] nel 2005.

L'obiettivo della prima fase di studio è stato in particolare quello di analizzare il grado di affidabilità del modello di calcolo adottato, descritto nel Cap 2.1, effettuando un confronto tra le soluzioni ottenute nei diversi casi applicativi e i risultati forniti dalla formulazione matematica di riferimento proposta da Bennon ed Incropera [13], già approfondita nel Cap 1.8.

Occorre qui sottolineare come la formulazione presa a riferimento [13] si differenzia dal modello matematico impiegato nella descrizione numerica del problema, fondamentalmente per due aspetti.

In primo luogo la presenza nel modello di Bennon e Incropera di un' equazione di propagazione di una quantità scalare, che, rappresenta la concentrazione di soluto (Eq. (1.64)), permette di calcolare direttamente la propagazione per

diffusione di uno dei componenti, sia nella fase solida che in quella liquida, risolvendo l'equazione (1.64) nell'incognita  $f^\alpha$ .

Il secondo aspetto vede il calcolo degli effetti dovuti alla presenza dei gradienti di soluto nella fase liquida, attraverso una estensione della legge di variazione di densità (2.1.15) che compare nei termini di galleggiamento delle equazioni di conservazione della quantità di moto.

Nello studio del problema, pur non disponendo di un modello matematico di base in grado di calcolare gli effetti diffusivi del soluto, è stato comunque possibile mettere a punto alcune strategie di calcolo in grado di tenere conto dei contributi alla convezione forniti dai fenomeni di segregazione attraverso l'interfaccia e la conseguente presenza di zone liquide a più alto tenore di soluto in vicinanza del fronte di solidificazione.

La prima fase di questo studio ha permesso di validare la metodologia numerica impiegata attraverso un confronto con soluzioni numeriche e sperimentali di riferimento, mentre, nella seconda fase, si è voluto fornire un contributo a un progetto di benchmark discusso a Giens in occasione di un convegno SFT [20], che prevede lo studio numerico della solidificazione in cavità rettangolare di leghe bi-componenti.

Lo scopo del benchmark vede in prima istanza il confronto dei risultati ottenuti attraverso differenti procedure numeriche di risoluzione delle equazioni matematiche di base già viste nel Cap. 1, e, in secondo luogo, si propone di effettuare un confronto tra risultati ottenuti impiegando modelli matematici messi a punto attraverso specifiche modifiche dei termini che compaiono nelle equazioni di base.

### 2.2.2 Formulazione del problema

Il fenomeno di solidificazione studiato interessa la cavità rettangolare riportata in Fig. 2.2.1, inizialmente riempita da una sostanza bicomponente di composizione iniziale  $f_{l,0}^\alpha$  e temperatura iniziale  $T_0$ ; il sistema è in condizione di equilibrio termodinamico.

In questo studio sono stati analizzati due casi caratterizzati dai parametri geometrici e condizioni al contorno riportati in Tab. 2.2.1.

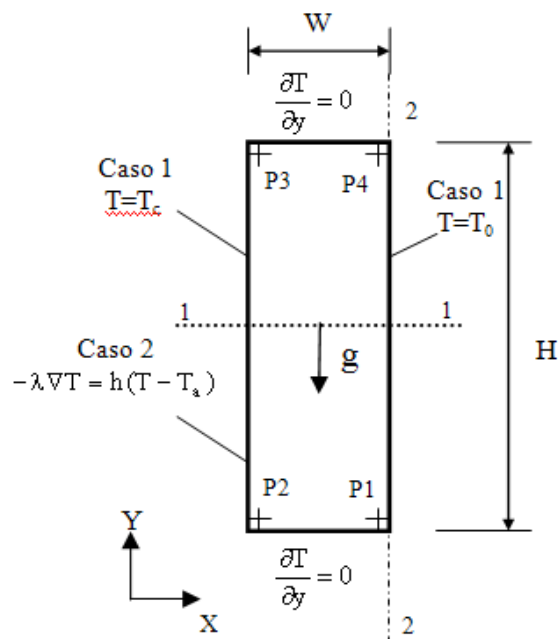
Nel Caso 1 la cavità è riempita da  $\text{NH}_4\text{Cl-H}_2\text{O}$  allo stato liquido, a temperatura di surriscaldamento  $T_0$  e viene fatta solidificare imponendo una temperatura  $T_c$  minore della temperatura eutettica,  $T_e$ , lungo una parete verticale e mantenendo la seconda parete verticale alla temperatura iniziale  $T_0$ .

Nel Caso 2, la cavità è riempita da una lega  $\text{Al-6.2\%Cu}$ .

Lungo la parete raffreddata viene imposta una condizione al contorno di tipo convettivo (temperatura esterna  $T_a$ ). Lungo la parete opposta viene imposta una condizione di simmetria. In entrambi i casi le pareti superiore e inferiore che racchiudono la cavità sono considerate adiabatiche.

**Tabella 2.2.1 Parametri caratteristici del problema**

	W (m)	H (m)	T <sub>0</sub> (K)	T <sub>a</sub> (K)	T <sub>c</sub> (K)	h(W/m <sup>2</sup> K)	f <sub>l,0</sub> <sup>α</sup>
Caso 1	0.025	0.1	311		223		0.70
Caso 2	0.1	0.4	919	293		100	0.062



**Fig. 2.2.1 Rappresentazione schematica del problema**

Le caratteristiche termofisiche dei materiali impiegati nei due casi di studio sono riportate in Tab. 2.2.2.

### 2.2.3 Formulazione matematica

Il modello matematico impiegato nella risoluzione del Caso 1 e del Caso 2 è stato già discusso nel Cap 2.1.

Come già affermato in precedenza la formulazione adottata non presenta caratteristiche di doppia diffusività, pertanto nelle equazioni non compare l'equazione di conservazione del soluto.

Inoltre, la formulazione matematica di base prevista dal codice permette di prevedere l'eventuale insorgenza di moti convettivi, esclusivamente attraverso una legge di variazione della densità in funzione della temperatura (2.1.15), che

**Tab. 2.2.2 Caratteristiche termofisiche della sostanza**

		Caso1 – NH <sub>4</sub> Cl-H <sub>2</sub> O		Caso2 – Al-6.2%Cu	
		Solido	Liquido	Solido	Liquido
k <sub>s</sub> ,k <sub>l</sub>	W/(mK)	0.393	0.468	85	85
c <sub>s</sub> , c <sub>l</sub>	J/(kgK)	1870	3249	1070	1070
L	kJ/kg	313.8	-	397	-
T <sub>f</sub>	K	-	633.59	-	933
T <sub>e</sub>	kg/ms	-	257.75	-	821
T <sub>l</sub>	K	-	306	-	911
T <sub>s</sub> = T <sub>e</sub>	K	257.75	-	821	-
k <sub>p</sub>		0.3	0.3	0.17	0.17
β <sub>T</sub>	1/K	-	3.83x10 <sup>-4</sup>	-	4.95x10 <sup>-5</sup>
β <sub>c</sub>		-	0.257	-	-0.72
f <sup>α</sup> <sub>l,e</sub>		-	0.803	-	-
ρ <sub>0</sub>	kg/m <sup>3</sup>	1078	-	2532	-
ρ <sub>l</sub>	kg/m <sup>3</sup>	-	(17)	-	(18)
ρ <sub>s</sub>	kg/m <sup>3</sup>	1078	-	(18)	-
v	kg/ms	-	1.3x10 <sup>-3</sup>	-	1.1x10 <sup>-3</sup>
D <sub>l</sub>	m <sup>2</sup> /s	-	4.8x10 <sup>-9</sup>	-	3x10 <sup>-9</sup>
m <sub>l</sub>	K/w%	-	468	-	-3.4
m <sub>s</sub>	K/w%	1560	-	-20	-

compare in tutti i termini di galleggiamento dell'equazione di conservazione della quantità di moto (2.1.13).

Risulta a questo punto chiaro come la mancanza di una equazione di propagazione/bilancio della concentrazione di soluto porti inevitabilmente a trascurare dal punto di vista numerico i fenomeni di segregazione di uno dei due componenti della sostanza attraverso l'interfaccia e, conseguentemente, non consente di tenere conto attraverso la legge di variazione della densità degli effetti indotti sulla convezione dalla presenza di zone liquide a più alta concentrazione di soluto immediatamente a ridosso dell'interfaccia di cambiamento di fase.

Per tenere conto delle forze di galleggiamento generate dai questi gradienti, nella risoluzione del Caso 1, la densità è stata quindi considerata variabile in tutti i termini delle equazioni di conservazione della quantità di moto (2.1.13), secondo la seguente legge:

$$\rho(T) = \rho_0 [1 + \beta_T(T - T_e) + \beta_c(f_1^\alpha - f_{l,e}^\alpha)] \quad \begin{array}{l} \text{Per } T_e < T < T_l \\ \text{per } T > T_l \\ \text{per } T < T_e \end{array} \quad (2.2.1)$$



Il valore di  $\rho_s = \rho_0$  è quello riportato in Tab. 2, mentre  $\rho_l$  è ricavato dall'Eq. (2.2.1) per  $T = T_l$ .

Nella risoluzione del Caso 2 la densità viene calcolata secondo la legge:

$$\begin{aligned} \rho(T) &= \rho_0 [1 - \beta_T(T - T_0) - \beta_c(f_1^\alpha - f_{1,0}^\alpha)] && \text{Per } T_e < T < T_l && (2.2.2) \\ \rho(T) &= \rho_0 [1 - \beta_T(T - T_0)] && \text{per } T_l < T < T_0 \\ \rho(T) &= \rho_0 && \text{per } T > T_0 \\ \rho(T) &= \rho_s && \text{per } T > T_e \end{aligned}$$

Il valore di  $\rho_0$  è quello riportato in Tab. 2;  $\rho_s$  e  $\rho_l$ , si ottengono dalla (2.2.2) rispettivamente per  $T = T_s$ ,  $T = T_l$ .

Il valore di frazione in massa della fase liquida di soluto,  $f_1^\alpha$ , che compare nelle Eq. (2.2.1-2.2.2), in assenza dell'equazione di conservazione, può essere ottenuto considerando la regola della leva, sotto l'ipotesi di equilibrio locale nella zona bifasica e trascurando le curvature delle linee di liquidus e di solidus, ricavando:

$$f_1^\alpha = \left[ \frac{1}{1 + f_s(k_p - 1)} \right] f^\alpha \quad (2.2.3)$$

dove

$$f_s = \frac{1}{1 - k_p} \left[ \frac{T - T_l}{T - T_f} \right] \quad (2.2.4)$$

A differenza di quanto avviene nella formulazione proposta da Incropera, che prevede anche il calcolo per diffusione della variabile  $f^\alpha$ , nel modello qui impiegato il termine  $f^\alpha$  risulta costante in tutto il dominio, pari al valore di  $f_{1,0}^\alpha$  riportato in Tab.1 e che corrisponde alla concentrazione nominale della sostanza all'inizio della solidificazione.

Il valore di  $f_1^\alpha$  risulta invece variare all'interno del dominio in funzione della temperatura seguendo il diagramma di fase del materiale secondo la regola della leva (Fig. 1.4).

I termini che compaiono moltiplicati per il coefficiente  $\beta_c$  che compare nella (2.2.1) e (2.2.2) possono essere riscritti attraverso alcuni semplici passaggi nella seguente forma:

$$f_1^\alpha - f_{1,e}^\alpha = f^\alpha \left[ \frac{T - T_e}{T_l - T_f} \right] \quad (2.2.5)$$

$$f_1^\alpha - f_{1,0}^\alpha = f^\alpha \left[ \frac{T - T_l}{T_l - T_f} \right] \quad (2.2.6)$$

La (2.2.5) e la (2.2.6) risultano valide per  $T_l < T < T_e$ .

Sostituendo la (2.2.5) e (2.2.6), nella (2.2.1) e (2.2.2) si ottiene rispettivamente:

$$\rho(T) = \rho_0 \left[ 1 + \beta_T(T - T_e) + \beta_c \left( f^\alpha \left( \frac{T - T_e}{T_1 - T_f} \right) \right) \right] \quad (2.2.7)$$

$$\rho(T) = \rho_0 \left[ 1 - \beta_T(T - T_0) - \beta_c \left( f^\alpha \left( \frac{T - T_1}{T_1 - T_f} \right) \right) \right] \quad (2.2.8)$$

Assumendo per comodità come temperatura di riferimento per il Caso 2  $T_0=T_1$ , le espressioni (2.2.7) e (2.2.8) possono quindi essere riscritte introducendo un coefficiente di espansione termica equivalente,  $\beta_{T,eq}$ , nella forma:

$$\rho(T) = \rho_0 [1 + \beta_{T,eq}(T - T_e)] \quad (2.2.9) \quad \text{per il Caso 1}$$

$$\rho(T) = \rho_0 [1 - \beta_{T,eq}(T - T_1)] \quad (2.2.10) \quad \text{per il Caso 2}$$

dove  $\beta_{T,eq}$  assume il valore:

$$\beta_{T,eq} = \beta_T + \beta_c \left( \frac{f^\alpha}{T_1 - T_f} \right) \quad (2.2.11)$$

E' quindi possibile introdurre un raggruppamento adimensionale che è funzione degli effetti sulla convezione dovuti alla micro segregazione del soluto rispetto al contributo dei gradienti di temperatura, ed è dato dal rapporto:

$$\beta^* = \frac{\beta_{T,eq}}{\beta_T} = 1 + \frac{\beta_c}{\beta_T} \left( \frac{f^\alpha}{T_1 - T_f} \right) \quad (2.2.12)$$

Si avrà quindi che gli effetti dei gradienti di soluto saranno predominanti sulla convezione quando :

$$\beta^* \gg 1 \quad \text{ovvero quando} \quad \frac{\beta_c}{\beta_T} \left( \frac{f^\alpha}{T_1 - T_f} \right) \gg 0$$

Si avranno invece predominanti effetti dei gradienti termici nell'innescare della convezione quando:

$$\beta^* \ll 1 \quad \text{ovvero quando} \quad \frac{\beta_c}{\beta_T} \left( \frac{f^\alpha}{T_1 - T_f} \right) \ll 0$$

Nei due casi presi in esame avremo che assumendo  $f^\alpha = f_{l,0}^\alpha$

$$\text{Per il Caso 1} \quad \frac{\beta_c}{\beta_T} \left( \frac{f^\alpha}{T_1 - T_f} \right) = -1.43 \quad \text{ovvero} \quad \beta^* \sim -0.5$$

Per il Caso 2  $\frac{\beta_c}{\beta_T} \left( \frac{f^\alpha}{T_1 - T_f} \right) = 40.99$  ovvero  $\beta^* \gg 1$

E' quindi possibile ipotizzare un contributo alla convezione dato dai gradienti di soluto più significativo nel caso di solidificazione della lega Al-6.2%Cu, rispetto al primo caso studiato.

Infine, per concludere la descrizione del modello matematico, nella zona di cambiamento di fase, la conduttività termica  $k$ , e l'entalpia  $h$ , vengono ad essere descritte anch'esse in funzione della temperatura seguendo la regola della leva, secondo le espressioni:

$$h = f_s h_s + f_l h_l \quad (2.2.13)$$

$$k = f_s k_s + f_l k_l \quad (2.2.14)$$

dove  $f_s$  è dato dalla (2.2.4) e, grazie all'ipotesi miscela satura, si ha  $f_l = 1 - f_s$ .

Il valore dell'entalpia in funzione della temperatura si ricava secondo il metodo entalpico visto al Cap 1.6.

Si assume infine come ipotesi di base che la natura della fase fluida sia newtoniana, che il regime di moto sia laminare.

Entrambi i casi sono stati studiati ricorrendo ad una griglia strutturata a maglia uniforme di 100 x 100 nodi per lato.

Il passo temporale impiegato è risultato pari a  $10^{-2}$  s.

### 2.2.4 Risultati

#### Caso 1

Il fenomeno di solidificazione in esame è stato osservato prendendo in considerazione i campi di velocità, temperatura e frazione di solido nei seguenti istanti di tempo adimensionali  $t^* = 0.009, 0.018, 0.036, 0.071$ .

Come è possibile osservare dalla Fig. 2.2.2, nella fase iniziale il fenomeno è caratterizzato da una rapida propagazione del fronte di liquidus che tende a rimanere verticale e a seguire l'andamento caratteristico di un regime di solidificazione dominato dalla conduzione.

Si innesca successivamente un moto convettivo di ricircolo di debole entità con la graduale discesa di fluido lungo il profilo di liquidus che delimita la mush region a ridosso della parete fredda e con la risalita di liquido caldo lungo la parete mantenuta al valore di temperatura iniziale  $T_0$ .

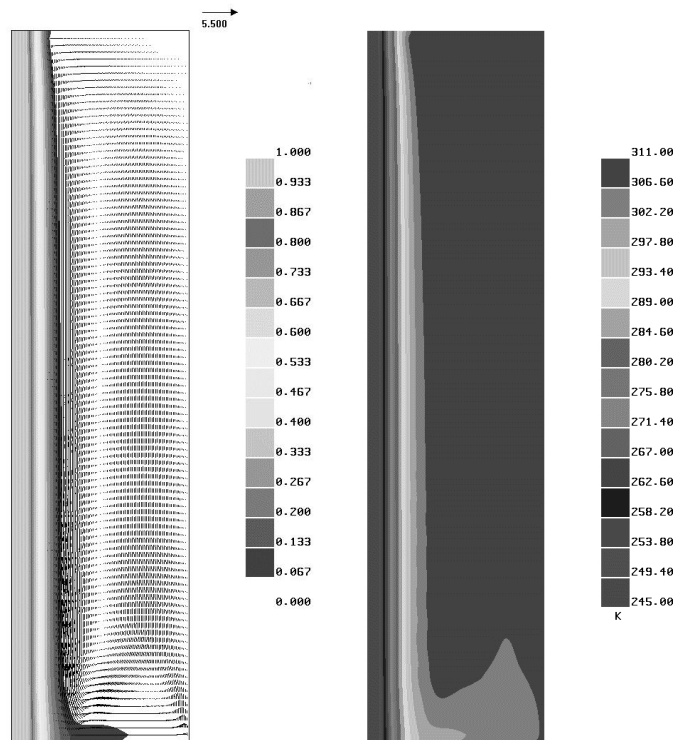


Fig. 2.2.2 Caso 1:  $t^*=0.009$  Campo di moto e frazione di solido (sx) - Isotherme (dx)

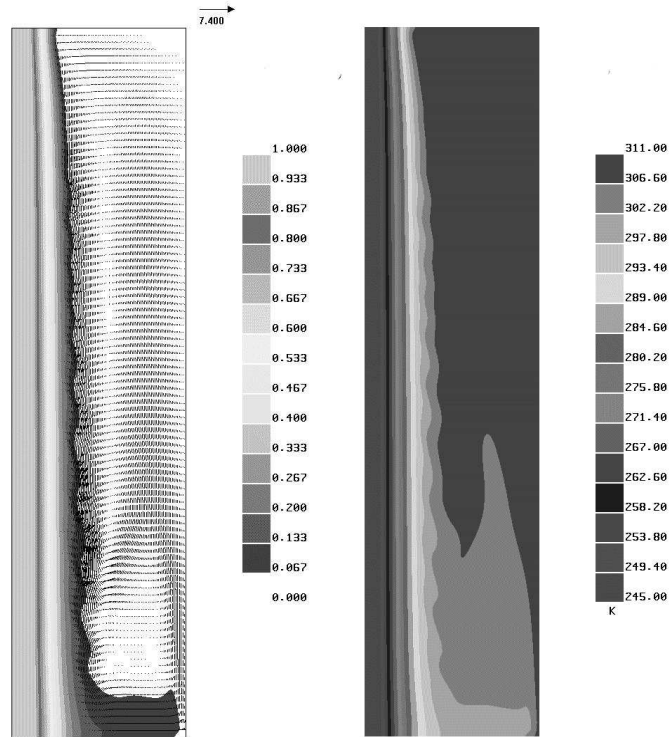


Fig. 2.2.3 Caso 1:  $t^*=0.018$  Campo di moto e frazione di solido (sx) - Isotherme (dx)

Dall'osservazione delle isoterme (Fig. 2.2.2) si evidenzia come i gradienti di temperatura siano concentrati nella mushy region. L'andamento verticale delle isoterme conferma le condizioni di dominanza della conduzione, sebbene sia possibile osservare, nella parte inferiore della cavità, un'iniziale deformazione delle isoterme vicine alla temperatura di liquidus, per via degli iniziali effetti della convezione. All'istante  $t^*=0.018$  (Fig. 2.2.3) l'interfaccia di liquidus si presenta maggiormente deformata e fortemente scostata dal profilo verticale, indice di un regime convettivo più intenso. Come già precedentemente osservato in [13], a partire da questo istante sono evidenti fenomeni di distorsione del fronte di liquidus che sono stati attribuiti a episodi di rifusione localizzata del fronte di solidificazione quando entra in contatto con il fluido caldo di risalita. Come in [13] sono stati inoltre riscontrati gli effetti di fluttuazione indotti sul campo di moto dalle distorsioni che compaiono lungo il profilo di interfaccia.

Osservando la Fig. 2.2.3 è possibile riscontrare come anche i profili delle isoterme rispecchino le distorsioni del fronte.

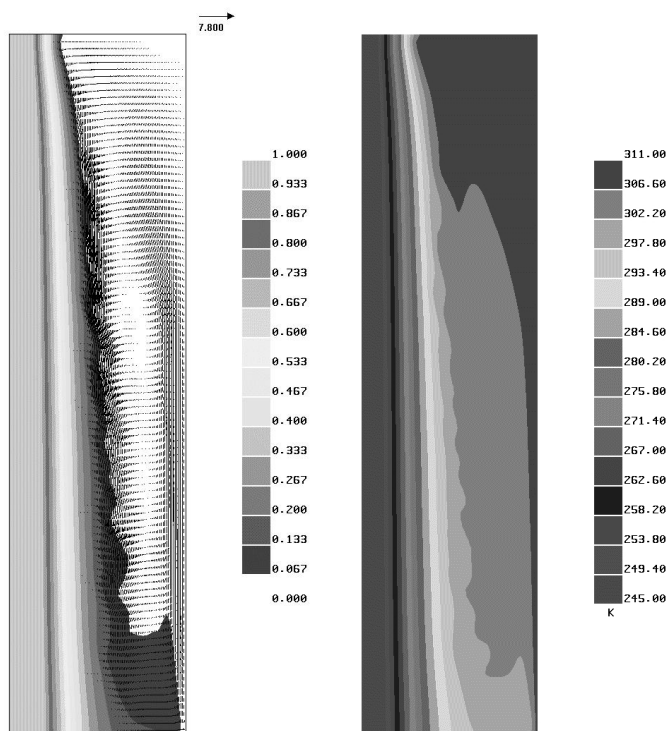


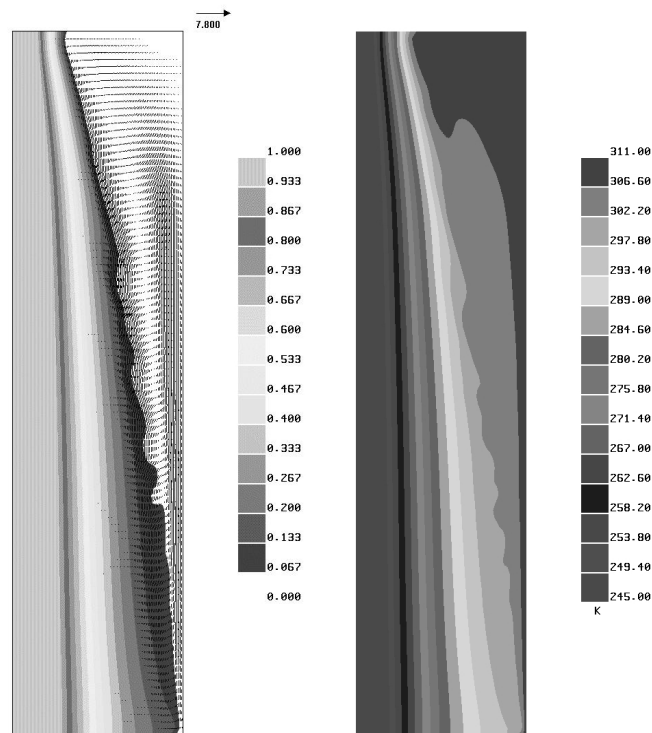
Fig. 2.2.4 Caso 1:  $t^*=0.036$  Campo di moto e frazione di solido ( $s_x$ ) - Isotherme ( $dx$ )

All'istante  $t^*=0.036$  (Fig. 2.2.4) si osserva una forte deformazione del fronte di liquidus. La mushy region si presenta fortemente dilatata nella parte bassa della cavità dove è maggiore la distanza tra la linea di liquidus e quella di solidus rispetto a quanto osservabile nella parte superiore.

Questo fenomeno è correlabile a una differente velocità di avanzamento del fronte di solidificazione che, nella parte superiore della cavità, incontra una maggiore resistenza fornita dal moto di ricircolo della zona di liquido.

All'istante  $t^*=0.072$  (Fig. 2.2.5) il fenomeno ha raggiunto condizioni di regime quasi-stazionario.

La parte inferiore della cavità risulta interamente occupata dalla mushy region; nella parte superiore persiste un zona in fase liquida che continua a essere interessata dal ricircolo convettivo antiorario. I risultati raggiunti sono stati confrontati con le soluzioni numeriche ottenute da Bennon e Incropera [13] e con i risultati sperimentali proposti da Christenson e Incropera [14]-[15].



**Fig. 2.2.5 Caso 1:  $t^*=0.072$  Campo di moto e frazione di solido ( $s_x$ ) - Isotherme ( $dx$ )**

Dal confronto tra le soluzioni numeriche si evidenzia una buona corrispondenza tra i risultati forniti dalle due formulazioni matematiche poste a confronto.

La morfologia del profilo di interfaccia di liquidus che delimita la mushy region, in entrambi i casi, si propaga più rapidamente nella parte inferiore e presenta un profilo fortemente distorto dai fenomeni localizzati precedentemente descritti.

Osservando i risultati ottenuti nel presente studio si riscontra, nel complesso, una maggiore rapidità di propagazione del fenomeno di solidificazione e una più alta percentuale di cavità solidificata in condizione di regime, rispetto a quanto previsto in [13]. Questa più elevata velocità di avanzamento del fronte di solidificazione sembra essere in accordo con i risultati di Christenson e Incropera [14], che attribuiscono al modello di Bennon e dello stesso Incropera una tendenza a sottostimare il fenomeno.

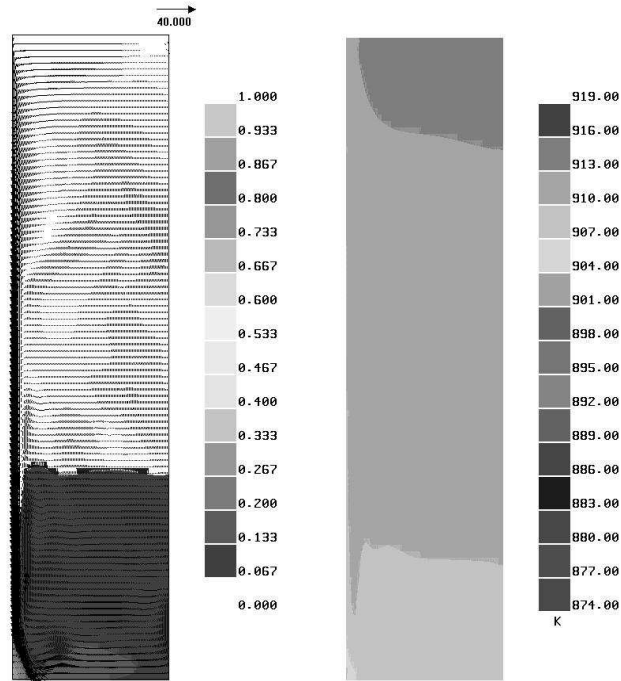


Fig. 2.2.6  $t=100$  s Campo di moto e frazione di solido (sx) - Isotherme (dx)

*Caso 2*

Nella seconda fase è stato analizzato il Caso 2 sfruttando la procedura messa a punto nello studio del Caso 1 e descritta nel paragrafo 2.2.3.

Le Fig. (2.2.6-2.2.9) riportano la distribuzione di frazione di solido, temperatura e campo di velocità per gli istanti  $t=100$ s,  $t=200$ s,  $t=300$ s,  $t=600$ s.

Come è possibile osservare in Fig. 2.2.6, dopo 100 s dall'inizio dell'osservazione la cavità risulta per circa due terzi occupata dalla fase liquida. La mushy region che interessa la parte inferiore della cavità risulta compresa tra le isocurve di frazione di solido corrispondenti a  $f_s=0$  e  $f_s=0.13$ .

Grazie alla discesa di fluido lungo la parete raffreddata, l'intera cavità viene interessata da un moto convettivo che si innesca sia nella zona di liquido, sia nella mushy region, dove la permeabilità è sufficientemente alta da non ostacolare il moto di fluido interdendritico.

A conferma della presenza di un moto convettivo già molto accentuato fin dai primi istanti del fenomeno di solidificazione, il profilo di interfaccia di liquidus in corrispondenza dell'istante  $t=100$ s si presenta orizzontale (Fig. 2.2.6).



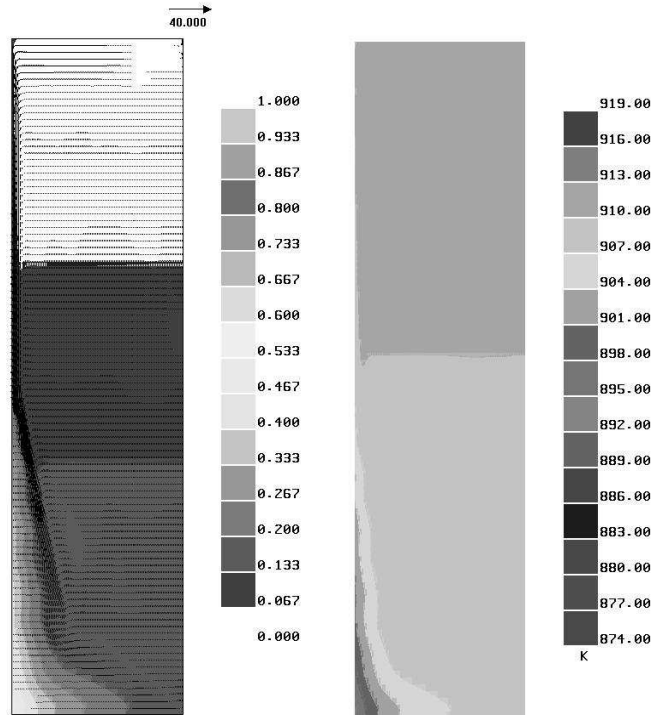


Fig. 2.2.7 Caso 2:  $t=200s$  Campo di moto e frazione di solido (sx) - Isoterme (dx)

Osservando il profilo delle isoterme (Fig. 2.2.6) si riscontra una debole stratificazione termica in direzione verticale. I valori di temperatura in tutto il dominio risultano compresi tra  $T_0=919$  K e  $T=907$  K.

In corrispondenza dell'istante  $t=200s$  (Fig. 2.2.7) la mushy region è delimitata da un profilo di liquidus che permane orizzontale e risulta occupare circa due terzi dell'intera cavità. Le isolinee di frazione di solido mostrano come la mushy region sia in gran parte composta da una regione a bassa frazione di solido.

Una solidificazione più accentuata è riscontrabile in corrispondenza dell'angolo inferiore sinistro, dove è presente una regione parzialmente solidificata caratterizzata da un valore di frazione di solido  $f_s=0.7$ .

Osservando il campo vettoriale di velocità, si riscontra un moto di fluido con intensità massima lungo la linea di frazione di solido  $f_s=0.2$ , valore oltre il quale diventa influente il coefficiente di permeabilità nel calcolo del campo di moto all'interno della mushy region. Per  $t=300s$  (Fig. 2.2.8) il dominio è quasi interamente occupato dalla mushy.

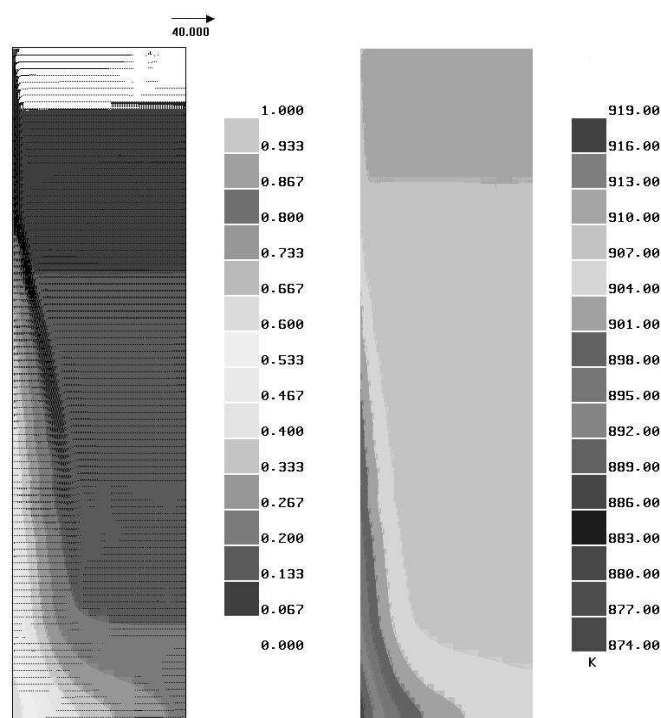


Figura 2.2.8 Caso 2:  $t=300s$  Campo di moto e frazione di solido ( $s_x$ ) - Isoterme ( $dx$ )

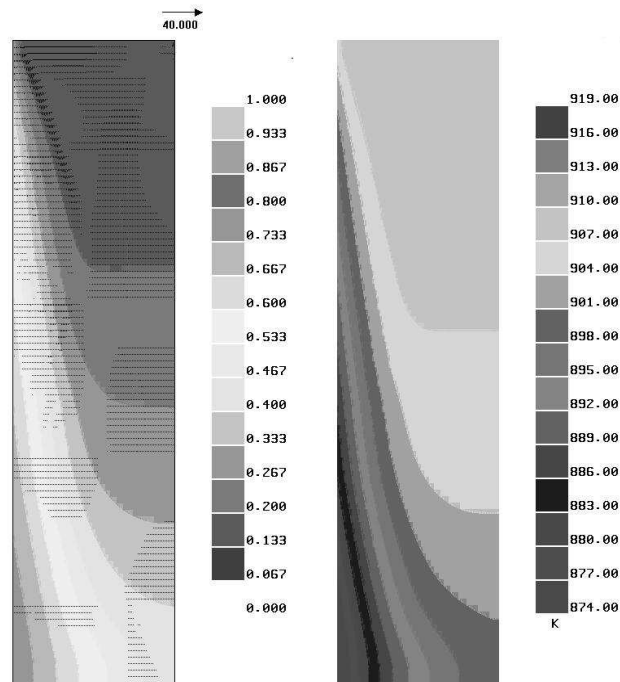
Il moto convettivo risulta ancora presente, sebbene con debole intensità.

Per  $t=600s$  (Fig. 2.2.9) il fenomeno assume un comportamento tipicamente conduttivo. A differenza di quanto osservato nello studio del Caso 1, l'intero dominio, lungo tutto il periodo di osservazione, si trova ad un valore di temperatura sempre superiore alla temperatura eutettica.

Al termine del periodo di osservazione la cavità appare quindi interamente in cambiamento di fase e non si riscontrano zone completamente solidificate ( $f_s=1$ ). Il valore di frazione di solido risulta compreso tra  $f_s=0$  e  $f_s=0.7$ .

Con riferimento alla Fig. 2.2.1, il benchmark [20] richiede la rappresentazione degli andamenti di temperatura lungo il piano 1-1 (Fig. 2.2.10), frazione di solido lungo il piano 1-1 (Fig. 2.2.11), temperatura lungo il piano di simmetria 2-2 (Fig. 2.2.12) e frazione di solido lungo 2-2 (Fig. 2.2.13).

Osservando le Fig. 2.2.11-2.2.12 si evidenzia come sia la stratificazione termica, sia il cambiamento di fase, in tutto il periodo di osservazione, interessino una zona compresa tra la parete verticale raffreddata (origine dell'asse  $x$ ) e  $x=0.04$ .



**Fig. 2.2.9 Caso 2:  $t=600$  s Campo di moto e frazione di solido ( $s_x$ ) - Isotherme ( $dx$ )**

Per  $x > 0.04$  m la temperatura si mostra sostanzialmente uniforme e costante e si assesta su un valore di compreso tra i 905 K e i 910 K.

Si osserva un avanzamento significativo della solidificazione (Fig. 2.2.11) solo vicino alla parete fredda per  $t=600$  s, dove la frazione solida raggiunge il valore  $f_s=0.65$ .

Se si osservano i profili di temperatura lungo il piano di simmetria (Fig. 2.2.12), si nota come la temperatura sia sostanzialmente uniforme e costante per  $t < 300$  s.

La discontinuità del profilo corrispondente a  $t=20$  s che si riscontra a 0.12 m dalla base può ricondursi a una stratificazione termica fortemente influenzata, nella zona inferiore della cavità, dai ricircoli di fluido presenti nei primi istanti di osservazione, quando il regime di solidificazione è dominato dalla convezione.

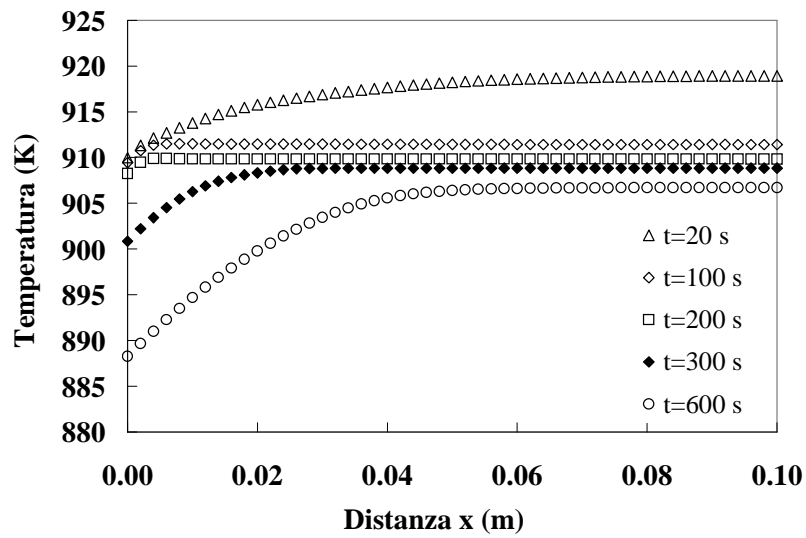


Figura 2.2.10 Profilo di temperatura lungo il piano 1-1

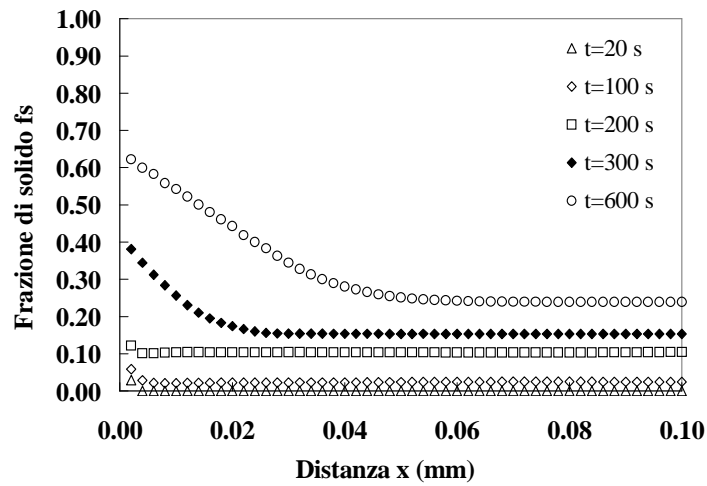


Figura 2.2.11 Profilo di frazione di solido lungo il piano 1-1

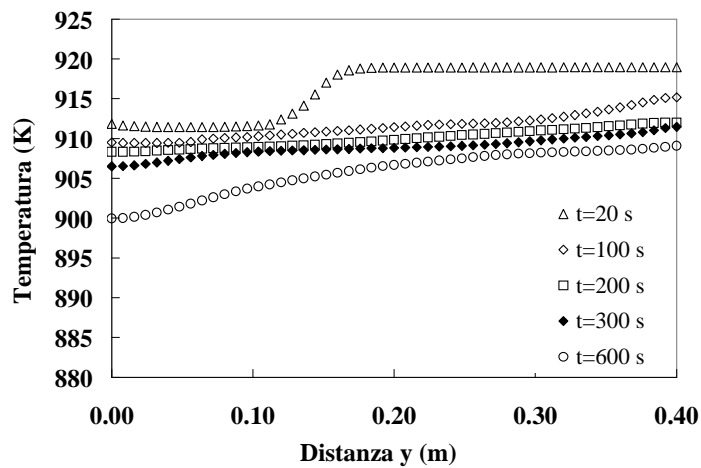


Fig. 2.2.12 Profilo di temperatura lungo il piano 2-2

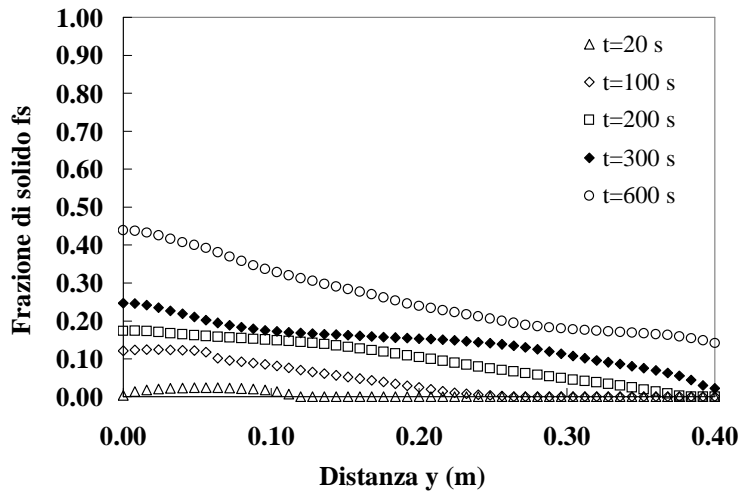


Fig. 2.2.13 Profilo di frazione di solido lungo il piano 2-2

### Riferimenti Bibliografici

- [1] D. Gobin, P. Le Quèrè et al., Melting driven by natural convection – A comparison exercise: first results, *Int. J. Therm. Sci.*, (1999) 38, 5-26
- [2] D. Gobin, P. Le Quèrè, Melting from an isothermal vertical wall. Synthesis of a numerical comparison exercise, *Comp. Ass. Mec. And Eng Sciences* (2000), 7, 289-306
- [3] P. Jany and A. Bejan, *Scaling theory of melting with natural convection in an enclosure*, *Int. J. Heat Mass Transfer* (1988), Vol. 31, 6, 1221-1235
- [4] E. Gregorini, M. Pilotelli, A.M. Lezzi, *Melting driven by thermal convection: A contribution to the Gobin-Le Quéré Benchmark*, Atti XXII Congresso nazionale UIT, Genova, 2004
- [5] J.S. Lim and A. Bejan, The Prandtl Number Effect on Melting Dominated by Natural Convection, *Trans. of ASME*
- [6] D. Gobin and C. Benard, Melting of Metals Driven by Natural Convection in the Melt: Influence of Prandtl and Rayleigh Numbers, *Jour. of Heat Transfer* (1992), 114, 521-524
- [7] M. Necati Ozisik, *Heat Conduction*, 1980, New York, J. Wiley&S.
- [8] A. Bejan, and A. Kraus, *Heat Transfer Handbook*, 2003, Hoboken (New Jersey), J. Wiley&S.
- [9] C. Benard, D. Gobin, F. Martinez, Melting in Rectangular Enclosures: Experiments and Numerical Simulations, *Jour. of Heat Transfer*
- [10] J. Szimmat, Numerical simulation of solidification processes in enclosures, *Heat and Mass Transfer*, 38 (2002)
- [11] Benchmark Project-Solidification of a binary alloy, A.M. Lezzi, comunicazione privata
- [12] ESI Software© , Procast™ v. 2004
- [13] W.D. Bennon, F.P. Incropera, A Continuum Model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems – II. Application to

solidification in a rectangular cavity, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 30, pp. 2171-2187, 1987

[14] M.S. Christenson, F.P. Incropera, *Solidification of an aqueous ammonium chloride solution in a rectangular cavity – I. Experimental study*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 32, pp 47-67, 1989

[15] M.S. Christenson, F.P. Incropera, *Solidification of an aqueous ammonium chloride solution in a rectangular cavity – II. Comparison of predicted and measured results*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 32, pp.69-79, 1989

[16] J. A. Dantzig, *Modelling liquid-solid phase changes with melt convection*, International Journal of Numerical Methods in Engineering, 28, 1769-1785 (1989)

[17] Viswanath R, Jaluria Y., A comparison of different solution methodologies for melting and solidification problems in enclosures, Numerical Heat Transfer B 1993; 24:77-105

[18] Campbell T.A., Koster J.N., Visualization of solid-liquid interface morphologies in gallium subject to natural convection, Journal of Crystal Growth 140 (1994) 414-425

[19] K. Morgan, *A numerical analysis of freezing and melting with convection*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 28, 3, pp. 275-284, (1981)

[20] *Benchmark Project-Solidification of a binary alloy*, A. M. Lezzi, comunicazione privata

[20] M. J. M. Krane e F. P. Incropera, *A scaling analysis of the unidirectional solidification of a binary alloy*, Inter. Jou. of Heat and Mass transfer, vol. 39, n. 17, pp. 3567-3579 (1996)

[21] P.J. Prescott, F. Incropera, Convective Transport phenomena and macrosegregation during solidification of a binary metal alloy: I-Numerical Predictions, ASME Trans., Vol. 116, pp.735-741 (1994)

[22] Z.Xiang Gong e A. S. Mujumdar, Flow and heat transfer in convection-dominated melting in a rectangular cavity heated from below, Inter. Jou. of Heat and Mass transfer, vol. 41, n. 17, pp. 2573-2580, (1998)

- [23] Gau C. Viskanta R. , *Melting and solidification of a pure metal from a vertical wall*, Journal Heat Transfer – T ASME 108 (1986) 174-181
- [24] Rady MA, Mohanty AK Natural convection during melting and solidification of pure metals in a cavity., Numerical Heat Transfer A 1996; 29: 49-63
- [25] S. Piva, R. Squatrito, *Analisi numerica del cambiamento di fase solido-liquido in cavità quadrata in presenza di convezione laminare: un contributo al benchmark di Gobin-Le Querè*, Atti del XXIII Congresso Nazionale UIT sulla Trasmissione del Calore, Parma, 20-22 Giugno 2005
- [26] R. Squatrito, S. Piva, *Analisi numerica della solidificazione di leghe binarie in cavità rettangolare in presenza di convezione laminare*, Atti del XXIV Congresso Nazionale UIT sulla Trasmissione del Calore, Napoli, 21-23 giugno 2006
- [27] J. Mencinger *Numerical simulation of melting in two-dimensional cavity using adaptive grid*, Jou. Comp. Physics, vol. 198, pp. 243-264, (2004)
- [28] R.T. Tenchev et al. *Finite element moving mesh analysis of phase change problems with natural convection*, Int. Jou. of Heat and Fluid Flow, vol 26, pp. 597-612, (2005)
- [29] M.M. Cerimele, D. Mansutti, F. Pistella, *Numerical modelling of liquid/solid phase transitions Analysis of a gallium melting test*, Computer & Fluid, vol. 31, pp. 437-451, (2002)
- [30] V.R. Voller e C. Prakash, *A fixed numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 30, n.8, pp. 1709-1719, 1987
- [31] ESI Software© , Procast™ v. 2009
- [32] P. Le Quéré, D. Gobin, *A note on possible flow instabilities in melting from the side*, Int. J. Therm. Sci. Vol. 38, pp. 595-600 (1999)





## Cap. 3 Esempi applicativi e attività sperimentali

### Introduzione

In questo capitolo verranno sinteticamente descritte una serie di attività applicative teorico-sperimentali portate a termine affrontando alcuni casi di studio di particolare interesse industriale.

Il settore industriale entro cui sono state indirizzate le attività di ricerca è stato in particolare quello legato alla produzione di cerchi in lega di alluminio attraverso tecnologie di produzione in bassa pressione.

Le attività sono state svolte all'interno di progetti di ricerca finanziati da BBS-Riva e hanno riguardato lo studio degli aspetti fluidodinamici e di scambio termico che avvengono durante i processi di fonderia, attraverso applicazioni numeriche e validazioni sperimentali dei risultati.

Le attività di studio previste possono sinteticamente essere suddivise in due fasi:

- 1) Studio numerico-sperimentale dei fenomeni fluidodinamici che avvengono durante un processo di riempimento di uno stampo
- 2) Analisi numerica dei fenomeni termofluidodinamici che interessano le fasi di riempimento dello stampo e la solidificazione di una lega di alluminio in processi di produzione di cerchi con tecnologie di bassa pressione

Queste attività sono state svolte applicando i metodi numerici, trattati nei precedenti capitoli, a casi industriali a complessità geometrica e tecnologica via via crescente, cercando, quando possibile, di validare i risultati numerici ottenuti attraverso riscontri sperimentali forniti da esperienze di laboratorio, e da misure dirette delle variabili di processo effettuate presso lo stabilimento di produzione di BBS-Riva.

### 3.1 Fase 1- Confronto numerico-sperimentale di riempimenti di stampo per gravità in caduta

#### 3.1.1 Obiettivi

Il fine dell'indagine sperimentale svolta è stato quello di effettuare un confronto tra un processo di riempimento di stampo riprodotto in laboratorio con i risultati ottenuti da modelli numerici realizzati tramite il codice di calcolo PROcast.

Basandosi sulle analisi dei risultati ottenuti da simulazioni numeriche e dal confronto con il fenomeno osservato in laboratorio si è cercato di trarre considerazioni in merito al livello di attendibilità del software nella simulazione dei fenomeni fluidodinamici che si verificano nei processi di fonderia.

Per effettuare un riscontro attendibile dei risultati ottenuti dal modello numerico è stato riprodotto in laboratorio un fenomeno di riempimento di stampo per caduta in gravità che, a differenza dei processi di pressofusione, presenta il vantaggio di una grande stabilità nel tempo e permette di ottenere un controllo più accurato delle condizioni al contorno del fenomeno studiato.

Le esperienze di laboratorio si sono concentrate in particolare sull'osservazione di due tipologie di riempimento, in entrambi i casi sotto l'azione della sola gravità:

- Riempimento in caduta dall'alto con ingresso nella cavità in corrispondenza del punto sommitale
- Riempimento della cavità in sorgente.

Le osservazioni sperimentali sono state condotte riempiendo con acqua due tipologie di cavità di forma cilindrica aventi sezioni più massive nel primo caso e sezione più sottile nel secondo caso.

### **3.1.2 Descrizione dell'apparato sperimentale**

L'apparato sperimentale, rappresentato schematicamente in Fig. 3.1, è costituito da una cavità cilindrica riempita dall'alto tramite un impianto di alimentazione a torre.

#### ***a) Stampo***

Il primo stampo preso in esame è costituito da un cilindro con asse a giacitura orizzontale riempito al centro della generatrice di sommità. Il cilindro (Fig. 3.5) è stato realizzato con una sezione di tubo in plexiglas racchiusa frontalmente da una superficie piana trasparente, necessaria per poter osservare il comportamento del fluido durante il riempimento.

Per agevolare l'osservazione, la parte posteriore della cavità è stata realizzata in resina opaca di color grigio scuro. Il cilindro è collegato rigidamente ad una base in alluminio la cui orizzontalità viene assicurata per mezzo di tre bulloni controrotanti (Fig. 3.3) che consentono di rendere orizzontale il piano di appoggio. In questo modo si garantisce la condizione di perfetta simmetria rispetto all'asse verticale durante il fenomeno di riempimento.

#### ***b) Impianto di alimentazione***

L'impianto di alimentazione dello stampo (Fig. 3.6) è appoggiato su una robusta scaffalatura a torre che sorregge i vari componenti.

Nel ripiano in cima alla torre è posizionato un recipiente in plastica a base rettangolare che serve da serbatoio di alimentazione per il riempimento del cilindro (Fig. 3.1). Il contenitore viene costantemente riportato a livello, con acqua proveniente dall'acquedotto, in modo da mantenere il pelo libero sempre alla stessa altezza, così da non creare variazioni di pressione durante il fenomeno di riempimento.

Il fondo della vasca è forato e collegato direttamente ad un'elettrovalvola a diaframma dal diametro di  $\frac{1}{2}$ " che viene azionata a impulso attraverso un interruttore, consentendo l'apertura e la chiusura dell'intero sistema di alimentazione in tempi inferiori al secondo.

Un raccordo in ottone collega l'elettrovalvola con un'altra valvola a spillo, ad azione manuale, dal diametro di  $\frac{1}{4}$ ", che permette la regolazione della portata.

L'immagine in Figura 3.2 mostra entrambe le valvole, accoppiate ed utilizzate nell'impianto di alimentazione.

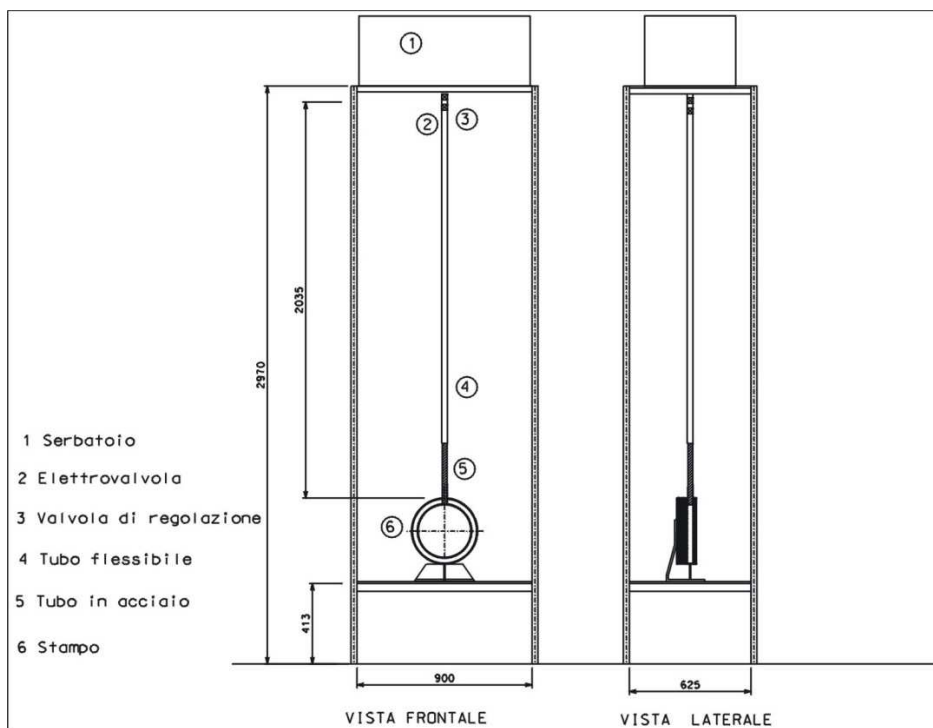


Fig. 3.1 Schema dell'apparato sperimentale

Un tubo in gomma, da  $\frac{1}{4}$ ", collega la parte superiore dell'impianto composta dalle due valvole con un tubo di acciaio di lunghezza pari a 50 diametri che si avvita al foro di ingresso del fluido nel cilindro. Il tubo flessibile in gomma permette così di interrompere la continuità tra la sezione di misura e quella di alimentazione, mentre il tratto finale è rigido in modo da garantire la perfetta verticalità del getto in entrata ed è di lunghezza sufficiente per ottenere un profilo di velocità completamente sviluppato in moto laminare.

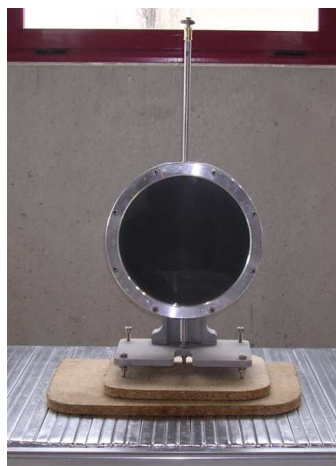
Tutto il sistema lavora a temperatura costante. Si garantisce l'isotermia del fenomeno mantenendo l'acqua nel serbatoio di alimentazione per un tempo sufficiente affinché si porti in equilibrio con la temperatura dell'ambiente.



**Fig. 3.2** Valvole



**Fig. 3.3** Basamento del cilindro



**Fig. 3.5** Stampo 1



**Fig. 3.6** Vista del sistema sperimentale

### 3.1.3 Metodologia di svolgimento delle prove

#### a) Taratura dell'impianto di alimentazione

Una volta verificata la perfetta funzionalità dell'impianto, assicurandosi che non sia presente aria lungo il tubo, in modo da evitare le variazioni di portata e del tipo di moto, è stata effettuata la taratura dell'impianto risalendo al rapporto che lega i valori di portata ai giri di manetta della valvola.

Per fare ciò sono state seguite due metodologie di misura:

- *misura a scarico libero, ovvero senza l'installazione del cilindro.*

Con l'impiego di un contenitore graduato e di un cronometro digitale si è misurato in questo modo il volume di liquido che attraversa la sezione in un prefissato intervallo di tempo, giungendo così al valore della portata in volume.

- *misura del tempo di riempimento del cilindro.*

E' stato installato nuovamente il cilindro, di cui è noto il volume, e sono stati rilevati con il cronometro i tempi di riempimento

La Tab. 1 mostra come i valori ottenuti ripetendo più volte le misurazioni con entrambi i metodi presentino scarti dell'ordine del millilitro, errori che, in prima ipotesi, possono essere attribuiti al tempo di reazione dell'operatore nell'avviare o fermare il cronometro.

**Tab. 1** Dati di taratura dell'impianto di alimentazione

Apertura valvola di regolazione	Tempo di riempimento  (in s)	Portata misurata (stampo cilindrico)  (in l/s)	Re	Portata misurata (contenitore graduato)  (in l/s)	Re
aperta	35.32	0.0447	8967	0.0467	9357
	36	0.0438	8782	0.045	9023
4 giri	47.91	0.033	6617	0.035	7018
4 giri e 1/4	53.3	0.0276	5534	0.0283	5674
	58.04	0.0272	5454		
4 giri e 1/2	75.53	0.0209	4191	0.0233	4672
	76.13	0.0207	4150		
	75.47	0.0209	4191		
4 giri e 3/4	126.73	0.0125	2507	0.0143	2867
	120.9	0.0131	2627		
	121.29	0.013	2607		
5 giri	222.7	0.0071	1424	0.0083	1664

**b) Riempimento**

Successivamente alla regolazione della valvola di controllo della portata, sono state eseguite diverse prove di riempimento con varie portate azionando l'interruttore di comando dell'elettrovalvola e avviando la registrazione con telecamera digitale CANON XL1 con sistema di registrazione DV e frequenza di acquisizione impostata su 35 fotogrammi al secondo.

L'obbiettivo della telecamera (zoom digitale 16X e meccanico  $f/1.6-2.6$ , 5.5-88 mm) è stato posizionato frontalmente alla superficie trasparente del cilindro attivando la funzionalità di messa a fuoco automatica. Due lampade puntate frontalmente allo stampo hanno consentito di aumentare il contrasto tra la tonalità del liquido e il colore dello sfondo permettendo di migliorare la visibilità del fenomeno ripreso.

**c) Acquisizione ed elaborazione video**

Dopo la registrazione della prova il filmato è stato acquisito con la stessa frequenza di campionamento di immagine di 35 fot/sec attraverso una scheda di acquisizione video ed elaborato utilizzando un software di elaborazione (Ulead VideoStudio 4.0) per ricavare i fotogrammi in determinati istanti di tempo.

Per rendere confrontabili i filmati ottenuti e le rappresentazioni grafiche di Viewcast, le riprese sono state tagliate ponendo come istante di inizio del fenomeno osservato quello corrispondente al primo fotogramma in cui il fluido compare nella parte superiore dell'inquadratura, ovvero nell'esatto istante in cui attraversa la sezione di ingresso del cilindro.

In questo modo si è reso coincidente il generico istante temporale del fenomeno ripreso con quello visualizzato attraverso l'ambiente di visualizzazione dei risultati numerici (VIEWcast) in corrispondenza di un determinato istante temporale di calcolo.

**3.1.4 Modello numerico**

Il modello geometrico è stato tracciato mediante l'utilizzo del generatore di griglia MESHcast dedicato alla generazione di griglie tetraedriche per PROCast.

Considerando la simmetria del fenomeno e della geometria rispetto all'asse verticale è stato realizzato un dominio tridimensionale che descrive un semi-volume di cavità, imponendo condizioni al contorno di simmetria su tutti i nodi della superficie mediana del cilindro giacente sul piano ZX in fig. 9.

La lunghezza massima degli elementi lungo le superfici laterali è stata posta pari a 2 mm, quella degli elementi della faccia frontale e posteriore pari a 5 mm.

Si è previsto un infittimento degli elementi di griglia imponendo una lunghezza caratteristica di 2 mm anche lungo la superficie di separazione giacente sul piano di simmetria XZ, dove si ha la presenza del getto in caduta.

Condizioni geometriche modello

Dimensioni cilindro:

Raggio = 142 mm  
Spessore = 25 mm  
Lunghezza condotto di alimentazione = 40 mm  
Diametro condotto di alimentazione = 6.35 mm (1/4")

Simmetria assiale della geometria lungo l'asse x  
Studio di mezza geometria  
Risolto in condizioni di simmetria  
**Numero elementi** = 286100  
**Numero nodi** = 53082

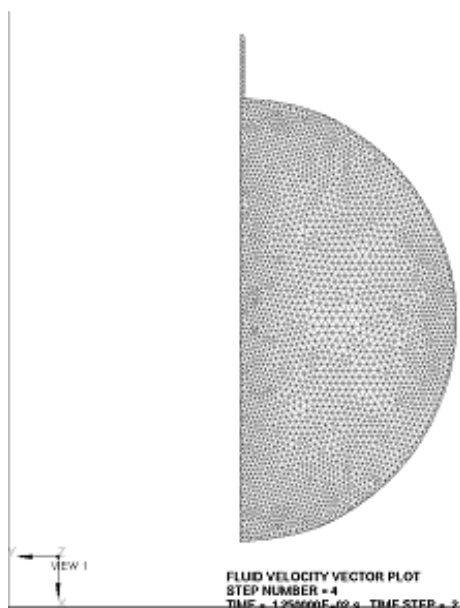


Fig. 3.7 Griglia di calcolo

### 3.1.5 Analisi dei risultati e considerazioni

Le considerazioni svolte sui risultati ottenuti si sono basate principalmente sul confronto visivo fra fenomeno simulato e quanto registrato in laboratorio attraverso l'uso della telecamera. Si sono differenziate le diverse prove di riempimento intervenendo sui valori di portata in ingresso e pertanto modificando il numero di Reynolds del moto del fluido all'interno del condotto di alimentazione che, come è possibile osservare in Tab.1, si trova in regime di moto turbolento se si considerano tempi di riempimento relativamente bassi.

Avendo posto al centro delle indagini il comportamento del fluido all'interno della cavità si è tentato di effettuare alcune considerazioni preliminari in merito al regime di moto durante la fase riempimento del volume cilindrico.

Nel caso in esame, la presenza di sezioni massive e in più variabili con l'altezza, impedisce di ricondurre le analisi a noti regimi di moto all'interno di canali, rendendo quindi poco significativa anche l'eventuale stima del numero di Reynolds mediante l'impiego di una grandezza caratteristica come il diametro equivalente.

In regimi di moto come quello osservato risulta pertanto difficile, se non impossibile, definire condizioni locali di flusso laminare o turbolento. Ciò che è



ragionevole aspettarsi è l'insorgenza di fenomeni di turbolenza lungo le pareti e condizioni di flusso più *stabili* nelle zone centrali della sezione.

Alla luce di queste considerazioni, si è scelto di affrontare la campagna di sperimentazione numerica facendo rientrare nell'analisi anche l'impiego del modello k- $\epsilon$ , unico modello per la turbolenza implementato dal codice.

Questa scelta operativa non ha comunque portato a scostamenti dagli obiettivi iniziali dell'indagine che non è stata rivolta a studiare fenomeni fluidodinamici locali, ma ha puntato prevalentemente a trovare riscontri su due aspetti del fenomeno di principale interesse per la ricerca:

- la valutazione delle dinamiche globali di riempimento in base all'altezza raggiunta dal pelo libero nel tempo
- la corretta previsione della morfologia del fronte di avanzamento del fluido

Le prove sperimentali sono state quindi condotte secondo la modalità seguente:

- A- riempimento a valvola completamente aperta (portata = 0.044 l/s ; Re = 9357; Funzione di calcolo delle equazioni di regime turbolento attiva)
- B- riempimento a valvola completamente aperta (portata = 0.044 l/s ; Re = 9357; Funzione di calcolo delle equazioni di regime turbolento disattivata)
- C- riempimento a valvola parzialmente chiusa (portata = 0.021 l/s; Re = 4191; Funzione di calcolo delle equazioni di regime turbolento attiva)

Il confronto operato per sovrapposizione di immagine fra quanto previsto in simulazione e quanto ripreso nello stesso istante di tempo dalla telecamera, ha permesso principalmente valutazioni sul grado di attendibilità dei tempi di riempimento e sul tipo di moto.

In tutte le tre prove analizzate (Prova A - B - C) si osserva principalmente una buona coincidenza del livello raggiunto dal liquido negli istanti di tempo presi in considerazione e pertanto anche una coincidenza quasi esatta del tempo totale di riempimento dello stampo.

Comportamenti differenti si registrano invece nei primi istanti delle prove in osservazione.

Confrontando la Prova A e la Prova B eseguite allo stesso regime di portata ma attivando o meno la funzione di calcolo delle equazioni di regime turbolento si sono potute effettuare considerazioni sull'influenza del modello di turbolenza nella simulazione. Concentrando l'attenzione sui primi istanti del riempimento e nella zona di attacco della vena fluida in caduta con il pelo libero in risalita non sono state riscontrate sostanziali differenze nei risultati numerici.

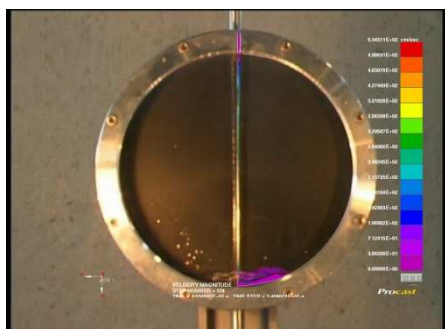


Fig. 3.8 Prova A - t=0.80 s

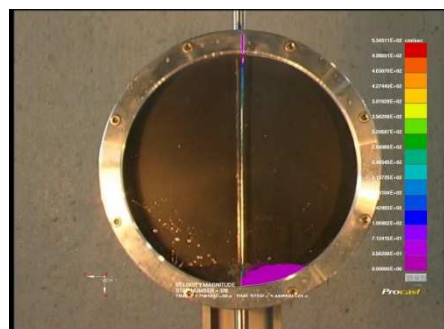


Fig. 3.9 Prova A - t=1.72 s

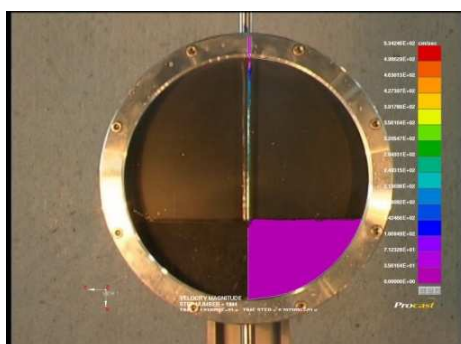


Fig. 3.10 Prova A - t=10.12

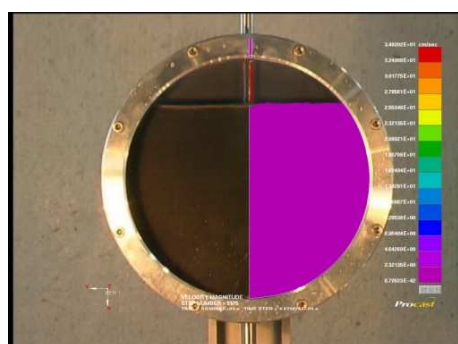


Fig. 3.11 Prova A - t=30.12

Come è possibile osservare dal confronto tra le Fig.3-8-3.9-3.10 e le Fig. 3.12-3.13-3.14., limitando le considerazioni a quelli che erano i principali interessi di indagine, ovvero le velocità di risalita del pelo libero e sua morfologia, le due prove a confronto, mostrano un pieno accordo tra di loro.

Procedendo invece a considerazioni in merito a quanto osservato sperimentalmente nella singola prova e la previsione numerica, le uniche differenze che è possibile osservare nelle Fig. 3.8 -3.9 nella Prova A riguardano le dimensioni del filetto fluido in caduta e nella quantità di liquido depositatosi sul fondo dello stampo nei primi 80 s osservati.

Nei primi istanti della Prova B (Fig. 3.12-3.13) si è osservata una differenza più marcata tra fenomeno simulato e fenomeno reale sia nelle dimensioni del filetto fluido, sia nel livello raggiunto dal liquido nello stesso istante.

Se vengono poste a confronto Fig. 3.8 e Fig. 3.12 riferite ai primi 0.80 s di entrambe le prove si riscontra come l'esclusione dal calcolo delle equazioni di

turbolenza porti a una simulazione differente dei primi istanti del fenomeno. Aumenta infatti il numero di passi temporali (STEP) risolti dal calcolatore per simulare lo stesso intervallo di tempo, e, contemporaneamente, si osserva una sezione inferiore della vena di fluido in entrata. Risultando invariato il valore di portata imposto tra le due prove, la quantità di fluido entrata nello stesso all'istante  $t=0.8$  s è la stessa, ma cambia la sua distribuzione all'interno dello stampo.

La maggiore attendibilità riscontrata dal confronto numerico-sperimentale nelle Fig. 3.8 e Fig. 3.9 riferite ai primi secondi di osservazione della prova A, porta comunque a ritenere migliorativo l'aggiunta del modello di turbolenza nella simulazione.

In conclusione, se si limita il campo di osservazione a valutazioni sui tempi di riempimento totale dello stampo e al livello raggiunto dal fluido nei diversi istanti di tempo è possibile affermare che le soluzioni fornite dalle simulazioni sono invarianti rispetto all'attivazione o meno del modello  $k-\epsilon$ .

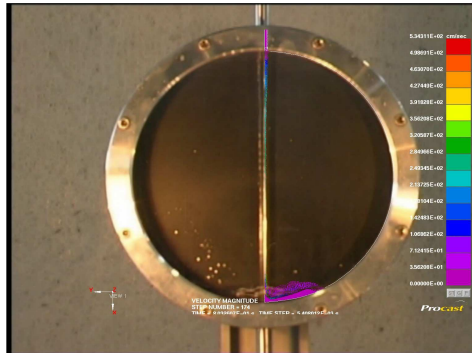


Fig. 3.12 Prova B -  $t=0.80$  s

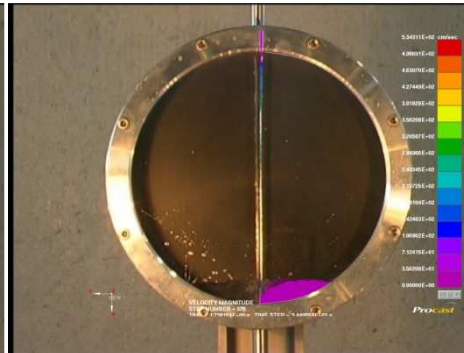


Fig. 3.13 Prova B -  $t=1.72$  s

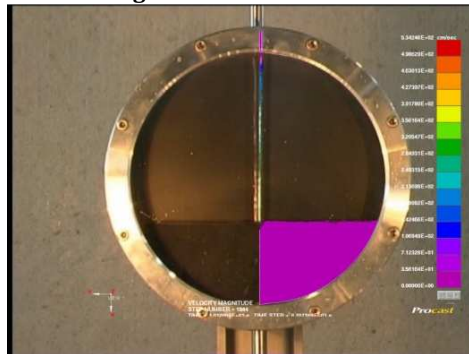


Fig. 3.14 Prova B -  $t=10.12$

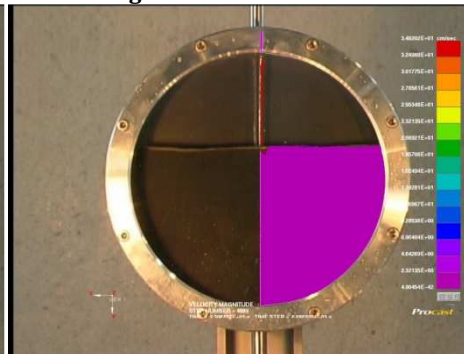


Fig. 3.15 Prova B -  $t=30.12$

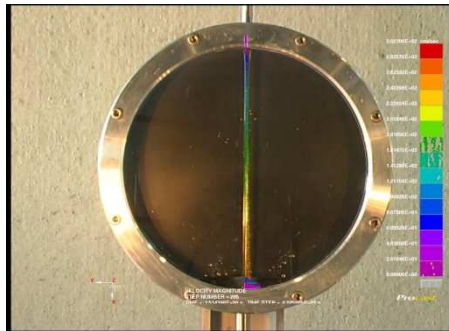


Fig. 3.16 Prova C - t=1.52

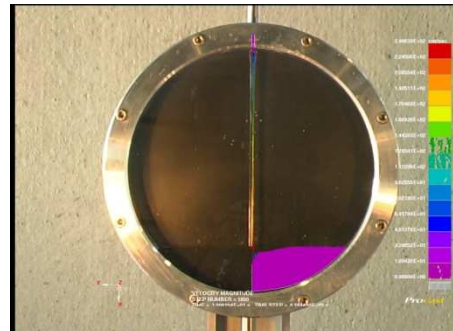


Fig. 3.17 Prova C - t=10.08

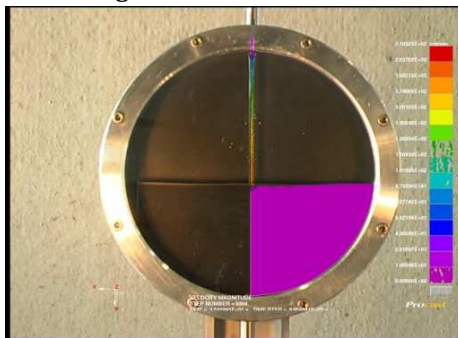


Fig. 3.18 Prova C - t=35.20 s

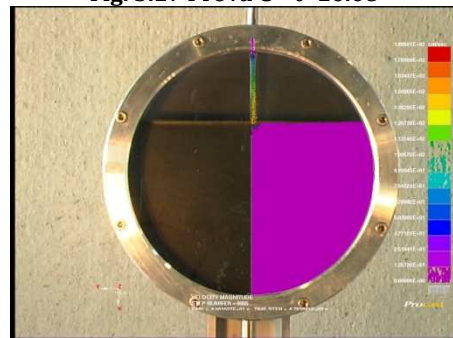


Fig. 3.19 Prova C - t=60 s

### 3.2 Fase 2- Confronto numerico-sperimentale di riempimenti di stampo in sorgente

#### 3.2.1 Obiettivi

In questa fase sono state condotte nuove osservazioni sperimentali impiegando l'apparato sperimentale prima descritto, dopo avere apportato alcune modifiche al sistema di alimentazione in modo da ottenere un riempimento in sorgente con ingresso del canale di adduzione nel punto inferiore della cavità.

In una prima fase di attività si è osservato il fenomeno di riempimento dello stampo descritto al paragrafo precedente riempito con il sistema di alimentazione modificato.

In una seconda fase, lasciando inalterato il sistema di alimentazione e continuando quindi a mantenere la zona inferiore come punto di ingresso del fluido all'interno della cavità, si è apportata una modifica alla geometria interna dello stampo e si è proceduto con una nuova campagna di misure.

### 3.2.2 Descrizione dell'apparato sperimentale

#### *a) Stampo 2*

All'interno della cavità cilindrica dello Stampo 1 è stata inserita un geometria piena, anch'essa cilindrica avente raggio e spessore inferiore di 10 mm rispetto alle dimensioni dello Stampo 1.

Una delle due superfici circolari del cilindro interno è stata posizionata sullo stesso piano della parete posteriore dello Stampo 1, ottenendo in questo modo, per differenza di solidi, una geometria cava avente forma di corona circolare frontalmente, con una intercapedine verticale piana di spessore pari a 10 mm in corrispondenza della parete posteriore (Fig. 3.20).

#### *b) Impianto di alimentazione*

Lasciando inalterata la parte superiore del sistema di alimentazione descritto al cap.3.2.1, composta da serbatoio, valvola a spillo ed elettrovalvola di comando, l'impianto è stato modificato nella zona inferiore per consentire un ingresso del fluido nella zona inferiore della cavità.

Un tubo in gomma, da  $\frac{1}{4}$ ", collega la parte superiore dell'impianto composta dalle due valvole con un tratto di condotto orizzontale di lunghezza pari a 50 diametri (Fig. 3.21) a sua volta raccordato tramite un gomito a 90 gradi con il tratto terminale di alimentazione, anche esso pari a 50 diametri.

Il tratto terminale di condotto in acciaio si avvita al foro di ingresso del fluido nel cilindro (Fig.3.22).

### 3.2.3 Metodologia di svolgimento delle prove

#### *a) Misurazione della portata*

Durante lo svolgimento di ogni singola prova di riempimento è stata eseguita la misurazione di portata del fluido in ingresso tramite misurazioni in massa della quantità di liquido entrata nel cilindro in un determinato intervallo di tempo.

Per effettuare questo tipo di misurazione di portata è stato pertanto messo a punto un sistema di pesatura che ha richiesto l'utilizzo delle seguenti apparecchiature:

- Bilancia digitale KERNEL TS35K provvista di interfaccia RS 232 per il collegamento a un PC
- Una scheda di interfaccia GPIB 488 installata su PC
- Una unità HP34970 provvista di modulo di switch a 20 canali 34903A collegabile al PC tramite interfaccia GPIB 488.
- Un PC utilizzato per la gestione delle periferiche sopra elencate tramite Labview 7

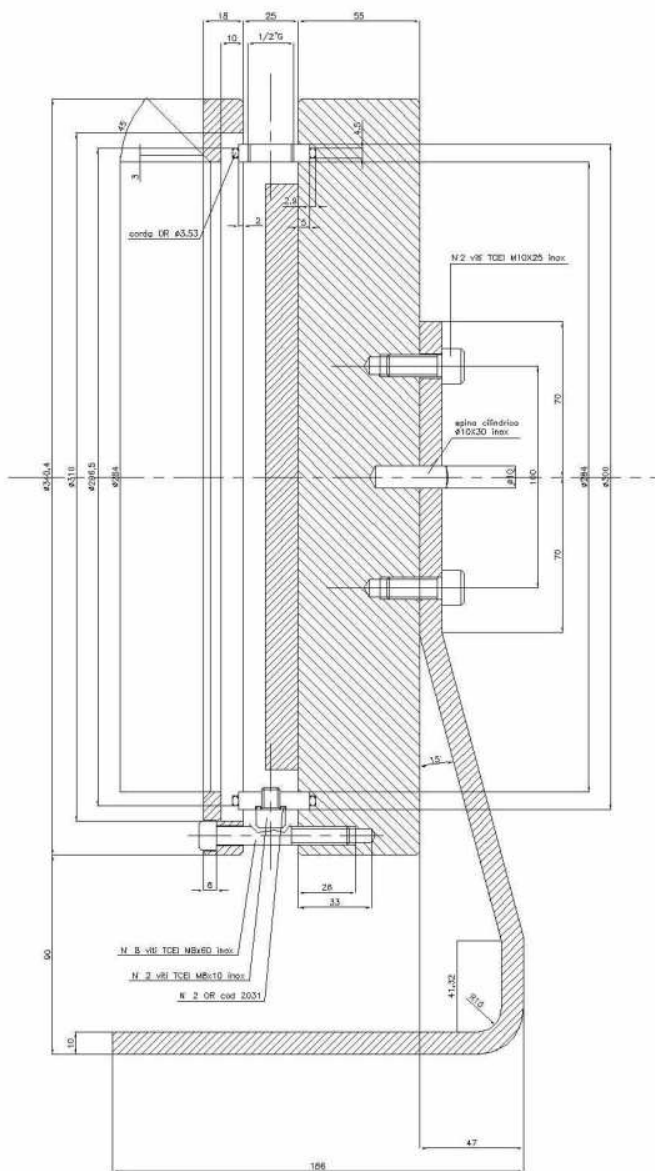
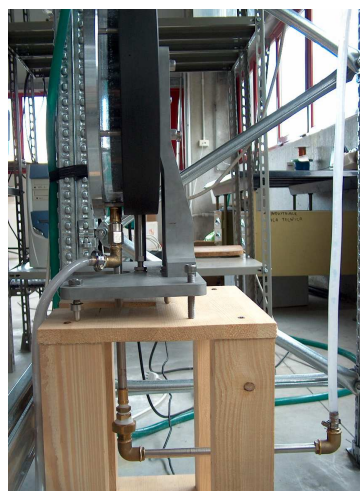


Figura 3.20 Sezione trasversale dello Stampo 2





**Fig. 3.21** Vista laterale del cilindro con alimentazione dal basso



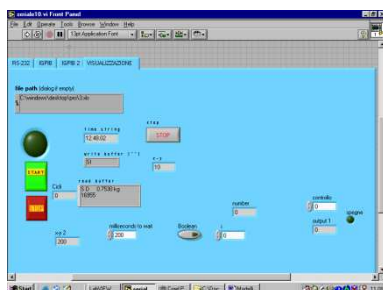
**Fig. 3.22** Vista frontale

Il modello è stato posizionato su un supporto in legno appositamente sagomato per consentire il passaggio del condotto di alimentazione.

Il supporto e lo stampo cilindrico sono stati posizionati sulla bilancia posta sul pavimento.

L'utilizzo di Labview 7 ha consentito il controllo contemporaneo della bilancia digitale e dell'unità HP34970 che, tramite il modulo di comando inserito al suo interno, è stata collegata all'elettrovalvola di apertura e chiusura dell'impianto di alimentazione.

In questo modo è stata controllato l'istante di apertura dell'elettrovalvola e la frequenza di acquisizione dei valori di pesata forniti dalla bilancia.



**Fig. 3.23 -** Pannello di comando



**Fig. 3.23** Pannello di controllo della bilancia digitale

**b) Riempimento**

Successivamente alla regolazione della valvola di controllo della portata sono state eseguite diverse prove di riempimento a diversi valori di portata in ingresso seguendo la seguente procedura:

1. Taratura della bilancia con imposizione di tara pari alla somma del peso dello stampo vuoto e del supporto in legno al fine di ottenere un valore in massa della quantità di liquido entrata nello stampo durante il riempimento
2. Avvio della registrazione tramite telecamera digitale CANON XL1 con sistema di registrazione DV posizionata frontalmente alla superficie trasparente del cilindro attivando la funzionalità di messa a fuoco automatica. Due lampade puntate frontalmente allo stampo hanno consentito di aumentare il contrasto tra la tonalità del liquido e il colore dello sfondo permettendo di migliorare la visibilità del fenomeno ripreso. La frequenza di acquisizione della ripresa è stata impostata pari a 35 fotogrammi al secondo.
3. Avvio del software di acquisizione (Labview) (Fig. 3.23) che, dopo avere eseguito un preimpostato numero di acquisizioni dalla bilancia tramite interfaccia Rs232, aziona il comando di apertura del relè dell'unità HP34970 che comanda l'elettrovalvola.

**c) Elaborazione dei valori acquisiti dalla bilancia e calcolo della portata di ingresso.**

I valori in massa forniti dalla bilancia durante il processo di riempimento sono stati elaborati al fine di ottenere un valore dell'istante iniziale in cui lo strumento di pesatura ha registrato uno scostamento significativo (circa pari a +0.003 kg) dal valore di zero impostato con la taratura iniziale.

Individuato in questo modo l'istante zero in cui ha inizio il riempimento del modello, si sono utilizzate differenze temporali tra questo istante e gli istanti successivi per ottenere dei valori di portata media in ingresso. I calcoli di portata sono stati effettuati per ogni prova utilizzando una frequenza di registrazione dei dati acquisiti pari a un valore ogni 2 s.

Una media dei valori ottenuti ha portato a una portata media del fluido in ingresso, assegnata successivamente come condizione al contorno nella soluzione numerica.

**d) Acquisizione ed elaborazione video**

Dopo la registrazione della prova, il filmato è stato acquisito con la stessa frequenza di campionamento di immagine di 35 fot/s attraverso una scheda di



acquisizione video e elaborato utilizzando un software di elaborazione (Ulead VideoStudio 4.0) per ricavare i fotogrammi in determinati istanti di tempo.

Per rendere confrontabili i filmati ottenuti e le rappresentazioni grafiche di Viewcast, le riprese sono state tagliate ponendo come istante di inizio del fenomeno osservato quello corrispondente al primo fotogramma in cui il fluido compare nella parte inferiore dell'inquadratura, ovvero nell'esatto istante in cui comincia il suo ingresso nello stampo.

In questo modo si è reso coincidente il generico istante temporale del fenomeno ripreso con quello visualizzato in Viewcast in corrispondenza di un determinato passo temporale.

### 3.2.4 Modello numerico

#### a) Stampo 1

Nell'affrontare lo studio numerico del riempimento dal basso della prima tipologia di stampo è stato impiegato lo stesso modello geometrico e la griglia di calcolo realizzata nella prima esperienza sperimentale (cap 3.1.4).

#### c) Stampo 2

La griglia di calcolo per descrivere la seconda tipologia di stampo è stata realizzata utilizzando una dimensione caratteristica dell'elemento pari a 3 mm, uniforme su tutta la superficie (vedi fig 3.24)

### 3.2.5 Piano sperimentale

Le prove in laboratorio sono state eseguite per differenti valori di portata ottenuti dalla taratura dell'impianto e sono state classificate in base al corrispondente numero di Reynolds calcolato nel condotto di alimentazione.

Le diverse prove di riempimento sono state effettuate regolando la portata del flusso in modo da avere numeri di Reynolds decrescenti:

#### Stampo 1

- A. Riempimento a valvola completamente aperta (portata = 0.0441 l/s ;  
Re = 9023; Funzione di calcolo delle equazioni di regime turbolento attiva
- B. Riempimento a valvola parzialmente chiusa (3 giri e 210°) (portata = 0.0396 l/s ; Re = 7932 ; Funzione di calcolo delle equazioni di regime turbolento attiva
- C. Riempimento a valvola parzialmente chiusa (4 giri e 180°) (portata = 0.0208 l/s; Re =4233 Funzione di calcolo delle equazioni di regime turbolento attiva

#### Stampo 2

- A. Riempimento a valvola completamente aperta (portata = 0.0444 l/s;  $Re = 8894$ ); Funzione di calcolo delle equazioni di regime turbolento attiva
- B. Riempimento a valvola parzialmente chiusa (portata = 0.0199 l/s;  $Re = 3990$ ); Funzione di calcolo delle equazioni di regime turbolento attiva
- C. Riempimento a valvola parzialmente chiusa (portata = 0.0137 l/s;  $Re = 2640$ ); Funzione di calcolo delle equazioni di regime turbolento attiva
- D. Riempimento a valvola parzialmente chiusa (portata = 0.0137 l/s;  $Re = 2640$ ); Funzione di calcolo delle equazioni di regime turbolento disattivata

Caratteristiche geometriche del modello numerico

Dimensioni esterne :

Raggio = 142 mm

Spessore = 25 mm

Dimensioni cilindro interno:

Raggio=132 mm

Spessore=15 mm

Lunghezza condotto di alimentazione = 50 mm

Diametro condotto di alimentazione = 6.35 mm (1/4")

Studio di mezza geometria

Risolto in condizioni di simmetria

**Numero elementi** = 179.735

**Numero nodi** = 35.297

Simmetria assiale della geometria lungo l'asse Z

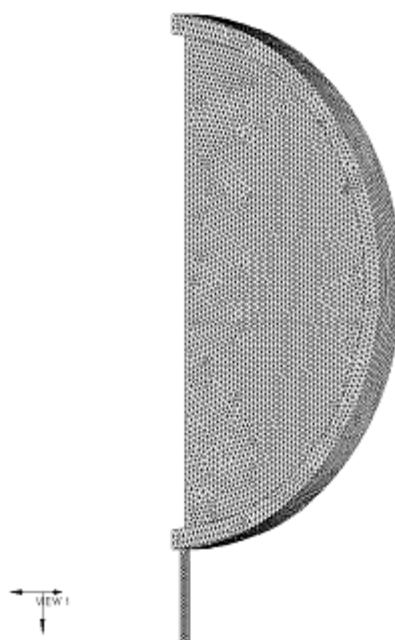


Fig. 3.24 Griglia di calcolo stampo 2

### 3.2.6 Analisi dei risultati e considerazioni

Le considerazioni svolte sui risultati ottenuti si sono basate sul confronto visivo fra fenomeno simulato e quanto registrato in laboratorio attraverso la telecamera.

In fase di osservazione del fenomeno riprodotto in laboratorio e definizione del tipo di moto che caratterizza il fluido durante il riempimento (moto laminare o

turbolento) si sono seguite due metodologie differenti per lo studio dei due modelli presi in esame.

Nello studio del riempimento dello Stampo 1 si è definito il moto del fluido all'interno dello stampo calcolando il valore del numero di Reynolds nel condotto di alimentazione, non tenendo conto quindi delle successive variazioni di sezioni dello stampo durante il riempimento.

Nell'analizzare il riempimento dello Stampo 2, che presenta una sezione geometrica più simile a quella di un condotto a sezione rettangolare sottile, è stata invece eseguita una stima approssimativa del numero di Reynolds all'interno dello stampo ricorrendo all'utilizzo del diametro idraulico.

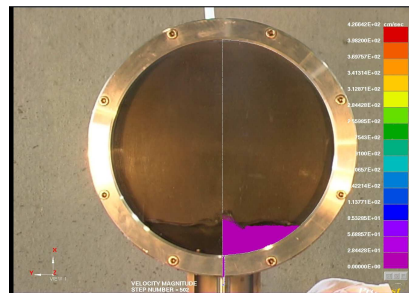


Fig. 3.25 Prova A - t=3.16

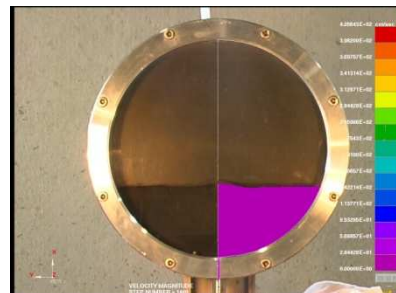


Fig. 3.26 Prova A - t=10.04



Fig. 3.27 Prova B - t=1.84

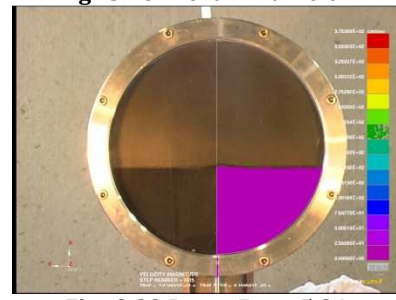


Fig. 3.28 Prova B - t=5.24

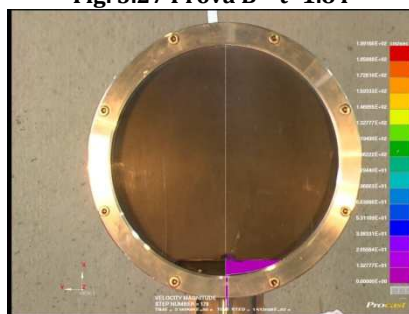


Fig. 3.29 Prova C - t=2.16

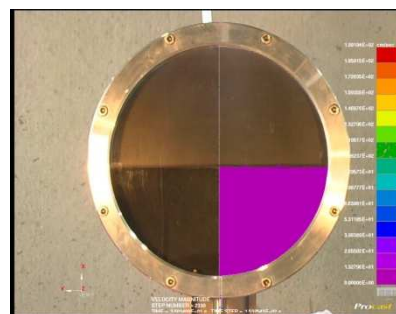


Fig. 3.30-Prova C-t=35.04

Nell'analisi comparativa di quanto osservato nel riempimento del primo modello di stampo si può sostanzialmente registrare una buona coincidenza di risultati tra il fenomeno osservato nelle prove di laboratorio e quanto ottenuto dalle simulazioni numeriche.

Dalle figure comparative realizzate sul primo modello di stampo (Fig.3.25-3.30) è possibile riscontrare una sostanziale coincidenza tra i livelli raggiunti dal liquido nei diversi istanti temporali e le raffigurazioni di Viewcast dei risultati di simulazione.

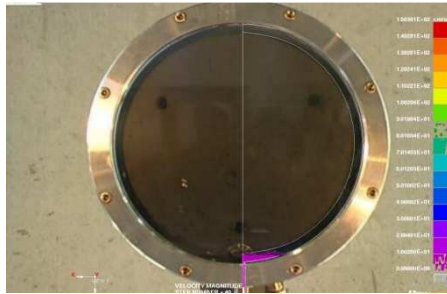


Fig. 3.31 Stampo 2 Prova A -  $t=0.40$  s

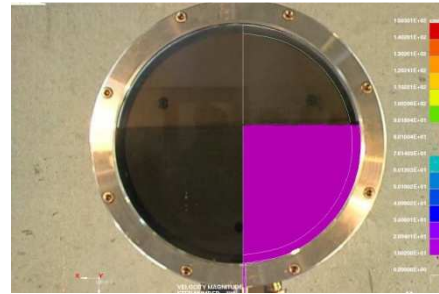


Fig. 3.32 Stampo 2 Prova A -  $t=10.04$  s

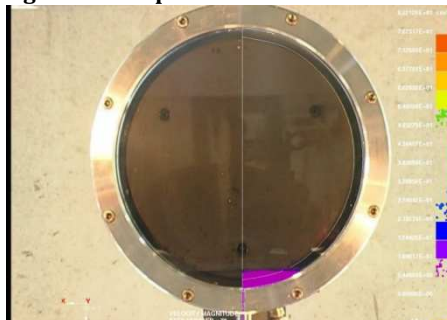


Fig. 3.33 Stampo 2 Prova B-  $t=0.04$  s

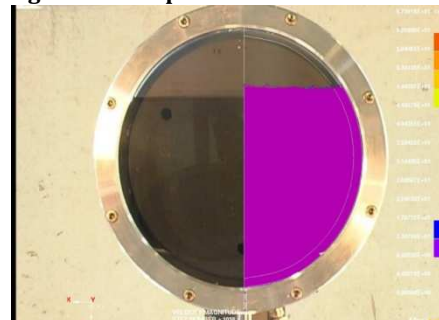


Fig. 14 Stampo 2 Prova B -  $t=10.04$  s

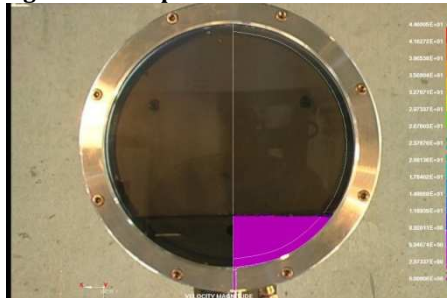


Fig. 3.35 Stampo 2 Prova C -  $t=10.16$  s

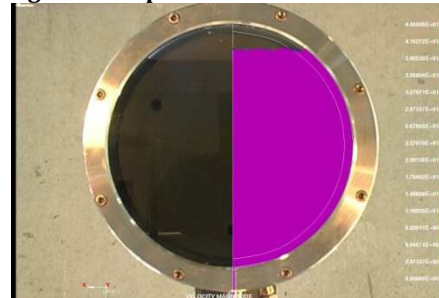


Figura 3.36 Stampo 2 Prova C -  $t=50.69$  s

Attendibile risulta inoltre la simulazione dei fenomeni del pelo libero del fronte di avanzamento del fluido all'interno dello stampo.

Quanto riscontrato risulta pertanto in linea con ciò che era stato osservato nelle precedenti prove sperimentali eseguite sulla stessa geometria con riempimenti sommitali, dove la presenza di un getto in caduta rendevano peraltro il fenomeno più complesso (Cap. 3.1.2).

Si può affermare che in sezioni di una significativa ampiezza e di forma geometrica regolare, il comportamento del codice nella simulazione di processi fluidodinamici di riempimento è sostanzialmente affidabile sia nei fenomeni di parete sia in quelli che avvengono sul pelo libero.

Nell'analisi dei risultati ottenuti dalle prove eseguite sul secondo modello di stampo, che presenta una sezione più simile ad una parete sottile, si è concentrata maggiormente l'attenzione sull'eventuale presenza di fenomeni di turbolenza al fine di verificare le potenzialità del modello di calcolo k- $\epsilon$  previsto dal codice di calcolo.

Per svolgere questo genere di analisi è risultato necessario esprimere ipotesi sulla natura del fenomeno osservato empiricamente risalendo al numero di Reynolds del moto del fluido all'interno dello stampo che risulta variabile a causa della variabilità della sezione geometrica attraversata dal fluido nei diversi istanti.

Si è potuta quindi definire la natura del moto all'interno dello stampo caratterizzata da un moto turbolento all'interno del condotto di alimentazione che diventa quindi laminare durante l'avanzamento del fluido all'interno dello stampo per poi riavvicinarsi a numeri di Reynolds più alti nella parte finale del riempimento, in corrispondenza cioè del restringimento di sezione.

Queste considerazioni hanno condotto all'utilizzo modello k- $\epsilon$  in tutti le prove simulate.

Dalle comparazioni eseguite sulle prove a portata più elevata (Prove A- B) che presentano quindi valori di Reynolds più alti, anche se non sempre corrispondenti ad un moto turbolento, si registra una sostanziale coincidenza tra risultati numerici e sperimentali. Questo porta a considerare affidabile l'utilizzo del modello k- $\epsilon$  di Procast nella simulazione di fenomeni variabili nel tempo e nello spazio che possono presentarsi di natura sia laminare che turbolenta.

Nelle prove eseguite a bassa portata del fluido in ingresso (Fig. 3.33-3.36) si riscontrano scostamenti più significativi tra simulazioni e osservazioni di laboratorio.

In particolare nella prova C caratterizzata da numeri di Reynolds molto bassi si osserva una buona coincidenza tra i risultati nei primi istanti del processo di riempimento (Fig. 3.33 e Fig. 3.35) e uno scostamento sempre maggiore negli istanti finali del processo, quando il valore del numero di Reynolds torna ad aumentare.

### **Confronto k- $\epsilon$ in corrispondenza di una sezione trasversale dello stampo**

Un'analisi più dettagliata dei valori energia turbolenta (k) e dissipazione di energia turbolenta ( $\epsilon$ ) è stata effettuata in base ai risultati numerici ottenuti sulla prova B, fissando una finestra temporale di osservazione e analizzando l'ordine di grandezza dei valori di k ed  $\epsilon$  calcolati registrando la comparsa di strutture turbolente in corrispondenza del passaggio del pelo libero del fronte di

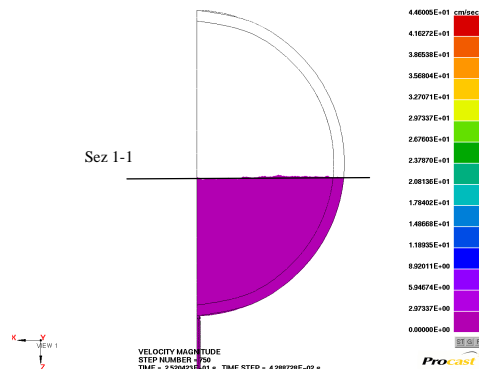
### Cap. 3 Esempi applicativi e attività sperimentali

avanzamento del fluido e la loro scomparsa negli istanti successivi al suo passaggio attraverso la sezione di osservazione.

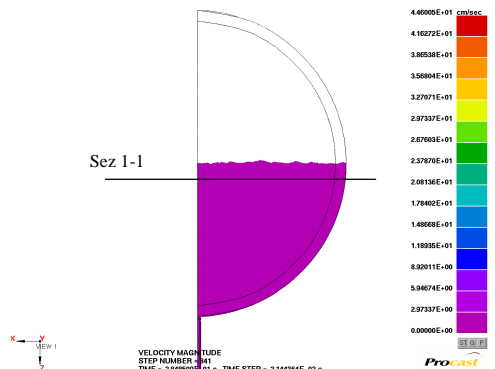
Un confronto effettuato sulla stessa prova di riempimento escludendo l'utilizzo del modello k-ε ha condotto a risultati numerici sostanzialmente analoghi a quelli ottenuti nella Prova C.

Istante iniziale di osservazione  
 $T_0 = 25.2$  s

(passaggio del pelo libero  
attraverso la sezione di  
osservazione)



Istante finale di osservazione  
 $T_f = 28.4$  s



Cap. 3 Esempi applicativi e attività sperimentali

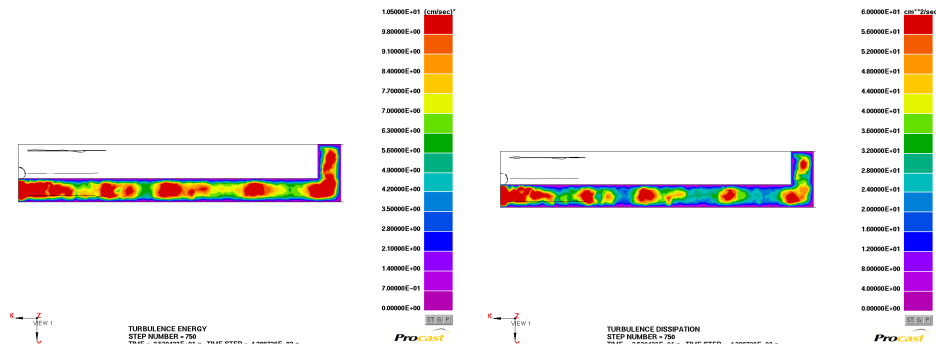


Fig. 3.37 Zone di creazione (sx) e dissipazione (dx) di energia turbolenta t=25.2 s

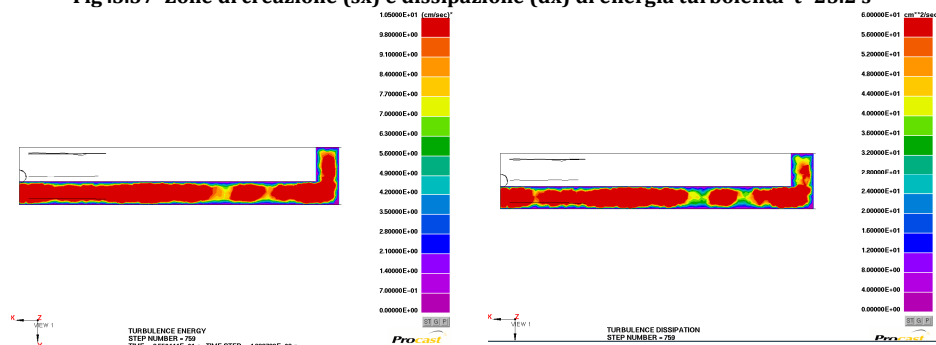


Fig. 3.38 Zone di creazione (sx) e dissipazione (dx) di energia turbolenta t=25.55 s.

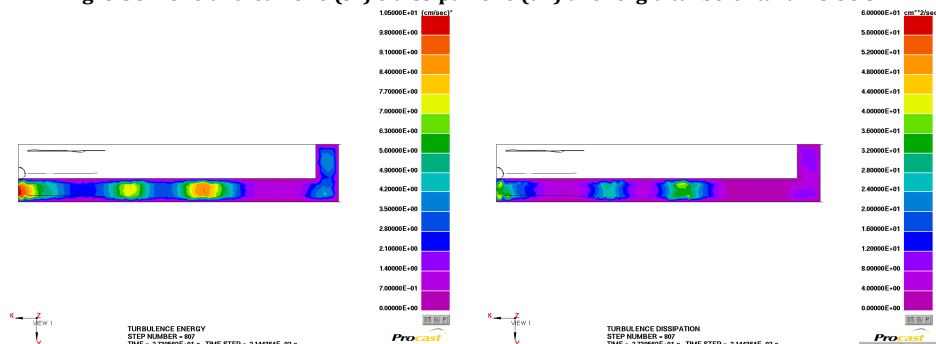


Fig. 3.39 Zone di creazione (sx) e dissipazione (dx) di energia turbolenta t=27.30 s.



### 3.3 - Analisi di sensitività del codice in applicazioni industriali

#### 3.3.1 Obiettivi

Partendo dai risultati e dalle considerazioni scaturite al termine della prima fase di confronto e validazione numerico-sperimentale (Cap3.1 e Cap. 3.2), in questa fase si è inteso effettuare una verifica di sensitività dello strumento di calcolo in applicazioni su casi industriali complessi.

In particolare l'attenzione si è concentrata su analisi numeriche di riempimenti di stampi in bassa pressione per la produzione di cerchi in lega leggera, impiegando modelli geometrici e parametri di processo impiegati nella linea di produzione dello stabilimento BBS.

In una prima fase di studio sono state ricercate le condizioni di indipendenza dalla dimensione caratteristica di discretizzazione del dominio sia nello spazio che nel tempo (passo temporale di calcolo), cercando di individuare dei parametri adeguati per permettere applicazioni del codice a casi industriali complessi. Alla base di queste analisi vi sono state considerazioni in merito al rapporto tra tempo computazionale e necessità della progettazione industriale.

In ultimo, un confronto diretto tra risultati ottenuti al variare di alcune caratteristiche termofisiche del materiale ha permesso di effettuare una verifica di sensitività dello strumento di calcolo alla corretta caratterizzazione del materiale impiegato nelle previsioni numeriche.

#### 3.3.2 Determinazione di una soluzione numerica di riferimento

La scelta del caso di studio è stata basata su due principi fondamentali:

- Individuazione di un case-study di reale produzione presso lo stabilimento BBS e su cui si disponesse di una conoscenza pregressa dei parametri di processo impiegati in produzione
- Condizioni geometriche del componente che rispettassero particolari condizioni di simmetria e che consentissero quindi una semplificazione dello studio numerico durante la fase di determinazione di una soluzione di riferimento

La scelta è quindi ricaduta su una geometria di cerchio a cinque razze che presenta diversi piani di simmetria.

Le due diverse tipologie dei piani di simmetria ha permesso di realizzare due differenti modelli geometrici discretizzati secondo diverse procedure.

Il primo modello geometrico realizzato (modello 1) descrive una parte pari a 1/10 della geometria intera del componente, corrispondente alla geometria di mezza razza (Fig. 3.3.1).

Il secondo modello geometrico (modello 2) si ottiene specularizzando il primo modello rispetto al piano di simmetria 1-1 (Fig. 3.3.2).

La scelta di realizzare due modelli geometrici legati da condizioni di simmetria è finalizzata alla valutazione di eventuali effetti sui risultati numerici dovuti a possibili condizioni di asimmetria della griglia di calcolo.

La discretizzazione del dominio di studio è stata effettuata tramite una griglia ad elementi tetraedrici realizzata tramite il generatore automatico implementato all'interno del codice.

Sul modello geometrico 1 è stato inoltre possibile effettuare un affinamento degli elementi di griglia compatibile con i limiti imposti dai tempi di calcolo per la risoluzione numerica del problema. Le diverse griglie di calcolo adottate nella discretizzazione dei modelli geometrici 1 e 2 sono state differenziate in base alle dimensioni caratteristiche degli elementi nella zona corrispondente alla parte centrale della razza, dove si è focalizzata l'analisi delle dinamiche di riempimento della geometria nei primi secondi dall'inizio del fenomeno di riempimento.

I risultati ottenuti sul modello geometrico 1, discretizzato secondo i parametri riportati a fianco alla Fig.3.3.3 sono stati assunti come soluzioni di riferimento per le analisi successive.

L'analisi numerica è stata condotta in condizioni di isothermicità, assumendo come valore di viscosità del fluido in ingresso un valore corrispondente alle caratteristiche fluidodinamiche di una lega di alluminio A356.

Lungo le pareti sono state imposte condizioni di aderenza.

Il problema è stato quindi risolto limitandosi alla risoluzione delle equazioni del moto.

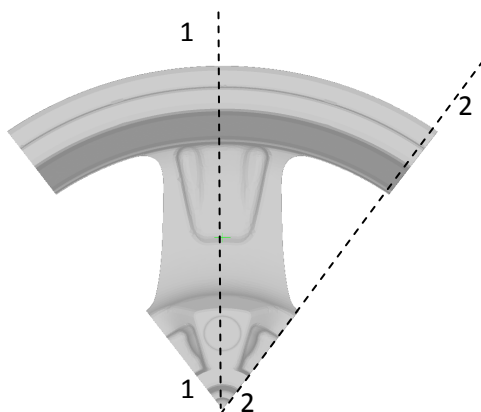


Fig. 3.3.1 Vista frontale del componente

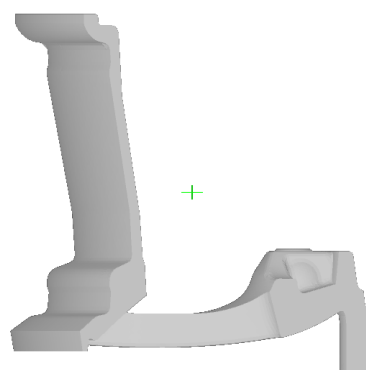
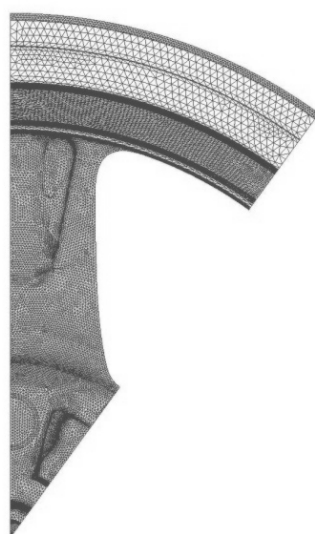


Fig. 3.3.2 Vista laterale del componente



Caratteristiche geometriche:

Modello 1: 1/10 cerchio

Dimensione massima elementi: 1 mm

Numero nodi: 114116

Numero elementi: 558607

Condizioni al contorno del problema:

Velocità di ingresso: 27.5 cm/s

Passo temporale di calcolo: 0.001 s

**Figura 3.3.3**

*Risultati soluzione numerica di riferimento*

I risultati ottenuti sul modello numerico descritto sono riportati nelle figure in Tabella 3.3.1 dove sono rappresentati i fronti di avanzamento del fluido in ingresso in tre istanti di controllo ( $t_1=0.30s$ ,  $t_2=0.80s$ ,  $t_3=1.7s$ ).

Nella rappresentazione dei risultati calcolati adottando il modello geometrico 1 è stato sfruttato il piano di simmetria 1-1 in sede di visualizzazione per facilitare il confronto con le soluzioni ottenute sul modello geometrico 2.

Come è possibile osservare nelle figure messa a confronto in Tab. 3.3.1 il fronte di avanzamento del fluido mostra una biforcazione fin dai primi istanti dall'inizio del riempimento dello stampo per via delle caratteristiche geometriche della cavità riempita. La velocità massima calcolata nell'istante  $t_1$  risulta compresa tra 0.67-0.70 m/s.

In corrispondenza dell'istante  $t_2$  si osserva un ricongiungimento dei fronti di avanzamento del fluido e la presenza di una zona di mancato riempimento che a valle del punto di ricongiungimento.

All'istante  $t_3$  questa zona di mancato riempimento viene ad essere interamente occupata dal flusso in ingresso e, in corrispondenza del raggio esterno del cerchio, si possono osservare due distinti fronti di alimentazione della zone periferiche inferiori.

### 3.3.3 Individuazione delle condizioni di *grid independence*

In questa fase si è effettuata una ricerca di condizioni di indipendenza delle soluzioni numeriche al variare delle dimensioni caratteristiche della griglia di calcolo.

L'onere computazionale del problema, accompagnato alla necessità di manetenerne tempi di calcolo entro ragionevoli limiti imposti dalle tempistiche della progettazione, ha portato a definire due tipologie di griglia, entrambe ottenute discretizzando il modello geometrico 2, attraverso elementi tetraedrici con dimensione caratteristica pari a 3 mm (griglia 1) e una griglia più lasca con dimensioni caratteristiche degli elementi pari a 5 mm (griglia 2).

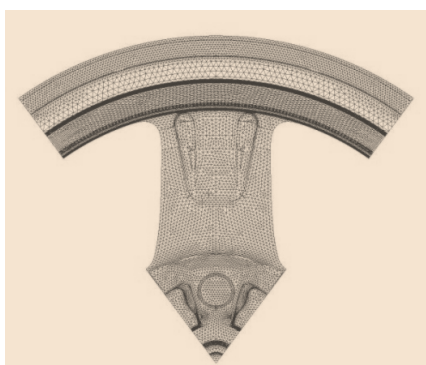


Fig. 3.3.4 Rappresentazione griglia 1

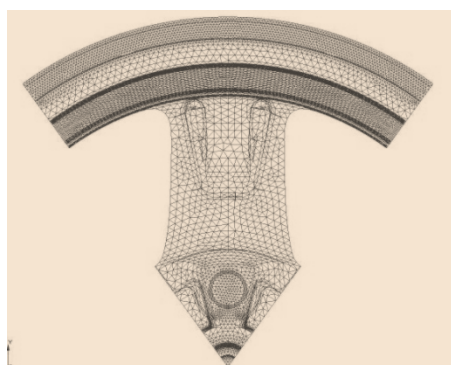


Fig. 3.3.5 Rappresentazione griglia 2

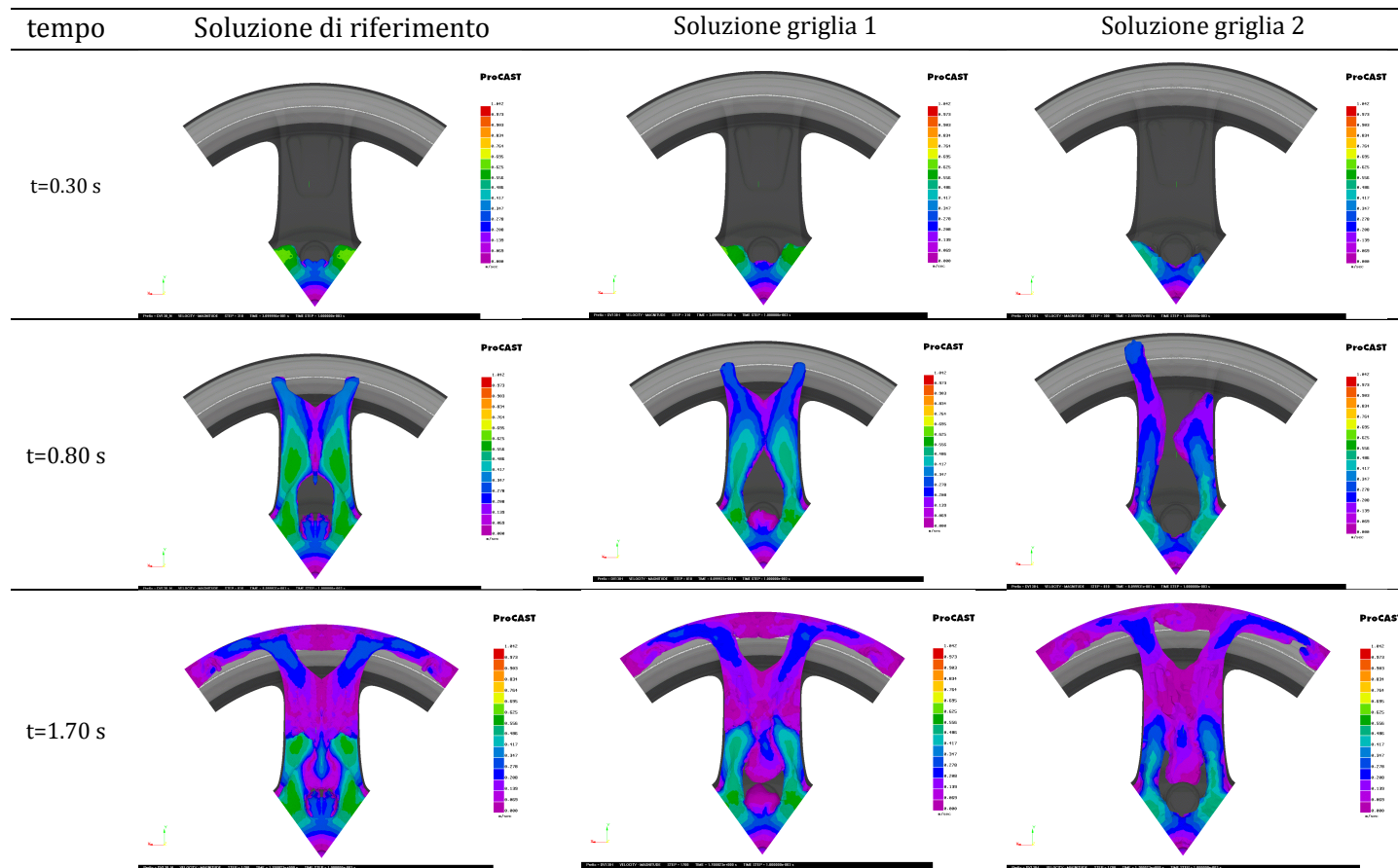
#### *Risultati e considerazioni*

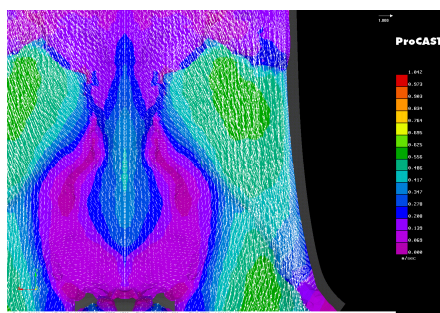
Il confronto tra i risultati mostrati in Tab. 3.3.1 evidenzia come la soluzione ottenuta sulla griglia 1 riproduca con buona approssimazione la soluzione di riferimento. Analizzando il particolare l'immagine che rappresenta il fronte di avanzamento all'istante  $t=0.30s$ , si osserva una lieve differenza del valore massimo di velocità raggiunto dal fronte di avanzamento del fluido che, nel caso della soluzione su griglia 1 presenta valori leggermente inferiori rispetto alla velocità riportata dalla soluzione di riferimento compresi tra 0.56 m/s e 0.65 m/s,

Differenze sulla distribuzione dei valori di velocità si osservano anche confrontando le soluzioni numeriche corrispondenti agli istanti successivi ( $t=0.80s$  e  $t=1.70s$ ).

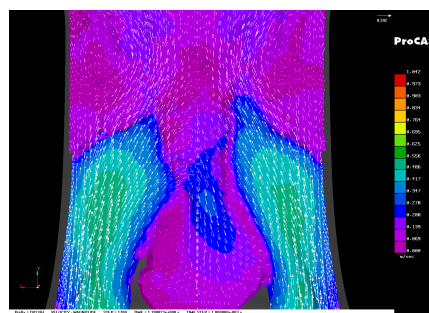
Dal confronto tra la soluzione di riferimento e la soluzione ottenuta su griglia 1 nei tre istanti di osservazione è possibile comunque riscontrare una sostanziale corrispondenza tra i risultati per quanto concerne le dinamiche di riempimento della cavità, con una buona coincidenza dell'avanzamento del fronte di liquido.

Tabella 3.3.1





**Fig. 3.3.6 Campo vettoriale delle velocità (soluzione di riferimento)**



**Fig. 3.3.7 Campo vettoriale delle velocità (soluzione griglia 1)**

Inoltre, osservando i risultati dell'analisi condotta sulla griglia 1, il comportamento simmetrico nelle dinamiche di avanzamento del fluido risulta correttamente previsto, nonostante la mancanza di una perfetta simmetria di griglia rispetto al piano 1-1.

Per un confronto più accurato tra le soluzioni si è infine osservato il campo vettoriale di velocità ottenuto dalla soluzione di riferimento (Fig. 3.3.6) e dalla soluzione su griglia 1 (Fig. 3.3.7) in corrispondenza della zona centrale della razza, attraversata dal piano di simmetria 1-1.

Dal confronto visivo è possibile notare come, nella soluzione ottenuta dalla soluzione 1, il comportamento del flusso di corrente nella zona esterna della razza sia descritto con accuratezza accettabile. Al contrario, l'inversione della direzione di avanzamento del fluido nella zona centrale della razza, per quanto previsto anche nella soluzione 1, non presenta le caratteristiche di perfetta simmetria attese.

Da un confronto tra la soluzione di riferimento e i risultati ottenuti sulla griglia 2 si osserva una differenza più marcata delle dinamiche di avanzamento del fluido previste in simulazione. Specialmente nei primi istanti messi a confronto ( $t=0.30s$ ,  $t=0.80s$ ) si accentuano sulla griglia 2 effetti di asimmetria di avanzamento del fluido da collegarsi alla scarsa raffinatezza della discretizzazione.

Nonostante queste differenze nei primi secondi di osservazione è comunque possibile osservare che il comportamento generale del fluido all'interno della cavità è comunque correttamente previsto, e, anche nell'ultimo caso analizzato, la separazione del fronte di avanzamento del fluido è prevista con discreta approssimazione, mentre più marcate sono le differenze in termini di distribuzione di velocità del fluido con un evidente sottostima dei valori calcolati sulla griglia 2, rispetto alla soluzione di riferimento.

Al termine di questa fase di ricerca di condizioni di indipendenza dalla dimensione di griglia delle soluzioni numeriche ottenute su applicazioni del codice a casi di interesse industriale è stato possibile determinare un criterio generale per

la discretizzazione del dominio di studio da impiegare nelle applicazioni successive.

Le valutazioni in merito al livello di affidabilità e accuratezza delle soluzioni numeriche messe a confronto con la soluzione di riferimento sono state condotte basandosi principalmente sul grado di precisione di risultati richiesto a questo genere di analisi.

Si sottolinea infatti come uno degli aspetti di maggiore interesse in fase di progettazione di parti stampanti, sia la possibile presenza di difetti del componente presso-fuso a causa di particolari criticità nelle dinamiche di riempimento dello stampo, come ad esempio punti di ristagno del fluido o fenomeni di ricircolo localizzato del metallo per via di particolari caratteristiche geometriche del profilo che viene riempito.

Alla luce di queste considerazioni, i parametri dimensionali caratteristici della griglia 1 sono stati considerati sufficientemente affidabili e compatibili con i tempi di calcolo richiesti dalla progettazione industriale.

Il caso studiato, discretizzato tramite la griglia 1 è stato quindi impiegato per le successive fasi di analisi.

#### **3.3.4 Individuazione delle condizioni di *time independence***

Seguendo la stessa metodologia impiegata nella fase precedente si è inteso studiare l'influenza sui risultati di simulazione al variare della dimensione di passo temporale di calcolo.

Partendo dal modello geometrico e dalla griglia 1 realizzata durante la fase di analisi vista al Cap 3.3.2, è stata condotta una nuova attività di analisi numerica impiegando le stesse condizioni al contorno della precedente esperienza, adottando la medesima soluzione di riferimento.

Il passo temporale è stato fatto variare secondo l'algoritmo autoadattivo previsto dal codice imponendo esclusivamente una dimensione massima di time step pari a 0.005 s nel primo caso (soluzione 1) e 0.01 s (soluzione 2) nel secondo caso.

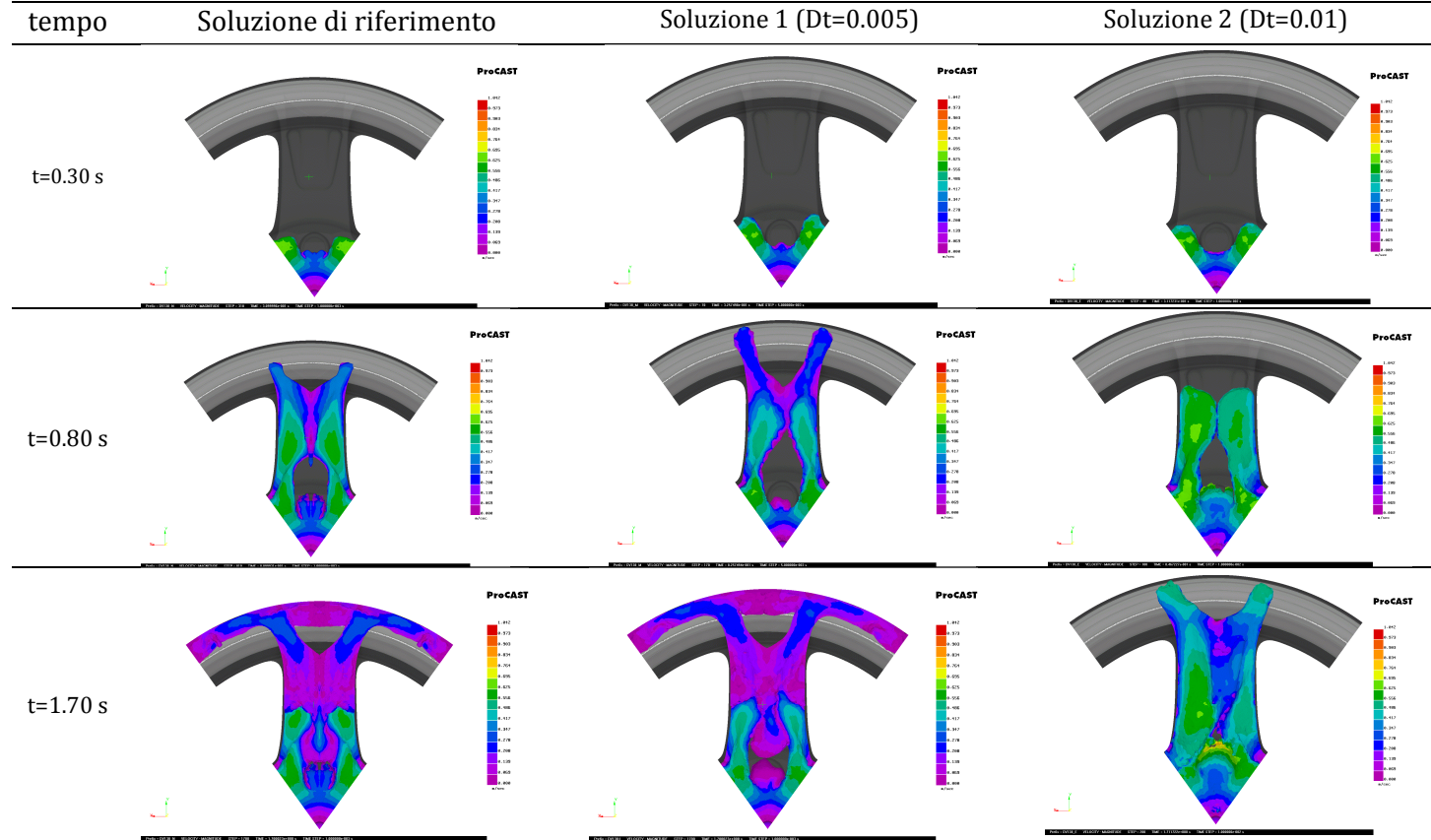
In entrambi i casi presi in esame l'intervento dell'algoritmo autoadattivo del passo temporale ha garantito la convergenza del calcolo che è stato portato a termine impiegando intervalli temporali di calcolo variabili nel tempo, portando quindi ad escludere l'ipotesi di poter impiegare time step di ampiezza superiore a 0.001s.

Il confronto tra le immagini di Tabella 3.3.2, corrispondenti all'avanzamento del fluido nei primi secondi di osservazione evidenzia chiaramente che le soluzioni sono influenzate in maniera determinante dall'ampiezza del passo temporale adottato.

I risultati ottenuti dalla simulazione 1 mostrano differenze significative del fronte di avanzamento raggiunto dal fluido all'istante  $t=0.80s$  rispetto alla



Tabella 3.3.2





soluzione di riferimento. Queste differenze tendono ad attenuarsi a partire dal secondo istante di osservazione, ovvero per  $t=1.70$  s.

Il confronto delle soluzioni ottenute con passo temporale  $\Delta t=0.01$  hanno mostrato uno scarso livello di accuratezza, mostrando differenze evidenti della distribuzione della massa all'interno della cavità, e un campo di velocità che si discosta da quello di riferimento.

Al termine di questa fase di analisi è stato possibile individuare un parametro dimensionale caratteristico per le analisi di previsione della fluidodinamica di riempimento di componenti ruota in cui gli ordini di grandezza delle variabili fisiche in gioco siano riconducibili ad un regime di moto riscontrabile nelle dinamiche di riempimento di stampi in bassa pressione.

Dopo avere riscontrato un'influenza significativa sui risultati da parte di algoritmi autoadattativi che garantiscono la robustezza della soluzione a scapito della sua accuratezza, è stato individuato un tempo caratteristico del fenomeno di riempimento studiato pari al millesimo di secondo, assunto quindi come passo temporale di riferimento per le successive analisi.

### **3.3.5 Analisi di sensitività del codice al variare delle caratteristiche di viscosità del fluido**

Una volta individuati i parametri di calcolo più adatti allo studio del problema secondo la metodologia vista nei capitoli precedenti, si è proceduto con un'analisi di sensitività della soluzione numerica ottenuta al variare della viscosità, ovvero dell'unica caratteristica del materiale che influenza il fenomeno di riempimento dello stampo se studiato in condizioni isoterme.

Alla base di questa analisi c'è la consapevolezza di una criticità intrinseca che in genere accompagna applicazioni industriali di codici di calcolo CFD a casi industriali in cui le caratteristiche termo-fluidodinamiche delle sostanze coinvolte nel problema sono di difficile determinazione, come nel caso delle leghe di alluminio di comune impiego in processi di fonderia.

In genere, la scarsa reperibilità di fonti bibliografiche e le difficoltà di effettuare complesse campagne di caratterizzazione termofisica dei materiali ad alta temperatura, comporta un elevato livello di indeterminatezza in fase di impostazione del problema dal punto di vista numerico, soprattutto nel momento in cui si assegnano caratteristiche di viscosità del materiale impiegato.

Inoltre, come noto dalla comune pratica di fonderia e come confermato nel corso degli anni da numerosi ricercatori (Campbell [-]) le caratteristiche di fluidità di una lega a base alluminio variano sensibilmente non solo al variare della temperatura, ma anche in funzione della composizione chimica.

Per queste motivazioni, in fase di messa a punto di strategie di impiego dello strumento di calcolo su casi industriali, si è ritenuto importante studiare

l'influenza sui risultati di una corretta conoscenza del valore di viscosità del materiale.

L'analisi è stata condotta assumendo come soluzione di riferimento la soluzione individuata al termine della fase di studio descritta nel Cap. 3.3.1 (griglia 1).

Il valore di viscosità assunto nella soluzione di riferimento risulta pari a  $\mu = 2.9 \cdot 10^{-3} \text{Pa} \cdot \text{s}$ , corrispondente secondo letteratura alla viscosità della lega di alluminio A356 alla temperatura di 700°C.

Lo studio numerico è stato condotto imponendo diverse caratteristiche di fluidità del materiale, variando di un ordine di grandezza per volta il valore di viscosità del fluido.

Sono state quindi portate a termini quattro analisi secondo lo schema riportato in tabella, adottando in tutte le simulazioni un passo temporale  $\Delta t = 10^{-3} \text{s}$ .

L'analisi dei risultati è stata condotta mettendo a confronto avanzamento del fluido e campo di velocità in un determinato istante di controllo ( $t = 0.80 \text{ s}$ ).

#### *Risultati e considerazioni*

Il confronto riportato nelle figure in Tab. 3.3.3 mostra come variazioni di viscosità fino a due ordini di grandezza inferiori rispetto al valore di riferimento non influiscono in maniera sensibile sui risultati di analisi di riempimento.

Questo risultato può essere facilmente giustificabile se si considera il fatto che la viscosità della lega A356 presa qui in considerazione in corrispondenza della temperatura di comune impiego nella pratica di fonderia (intorno ai 700°C), possiede un valore di viscosità relativamente basso (confrontabile con il valore dell'acqua a temperatura ambiente).

Come è possibile notare osservando le immagini di Tab. 3.3.3 riferite a Sim. 3 e Sim. 4, effetti più consistenti sui risultati si osservano riducendo di uno o due ordini di grandezza il valore di viscosità di riferimento.

Nel primo caso (Sim 3) si osserva una differenza abbastanza pronunciata tra il campo di velocità calcolato con viscosità del materiale  $\mu = 2.9 \cdot 10^{-2} \text{Pa} \cdot \text{s}$  e quello ottenuto dalla soluzione di riferimento.

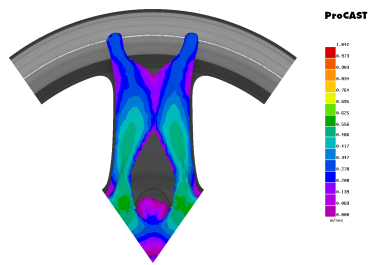
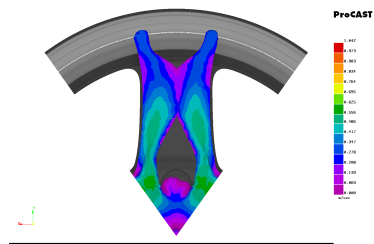
Riducendo ulteriormente di un ordine di grandezza la viscosità (Sim 4) la soluzione riporta differenze evidenti nelle dinamiche di riempimento della cavità e un fronte di avanzamento del fluido sensibilmente in ritardo rispetto a quanto mostrato nella soluzione di confronto.

Le considerazioni scaturite al termine di questa fase hanno permesso di individuare un intervallo di accettabilità di errore nella corretta caratterizzazione fluidodinamica di una lega di alluminio, definendo un intervallo di incertezza compreso tra  $10\mu_{\text{rif}}$  e  $10^{-2}\mu_{\text{rif}}$  entro cui è possibile fornire soluzioni numeriche sufficientemente accurate.

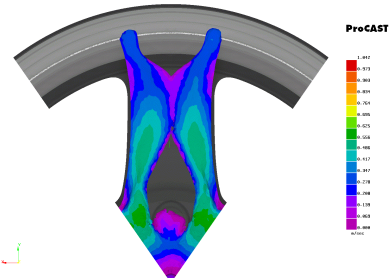
Tabella 3.3.3

Soluzione di riferimento

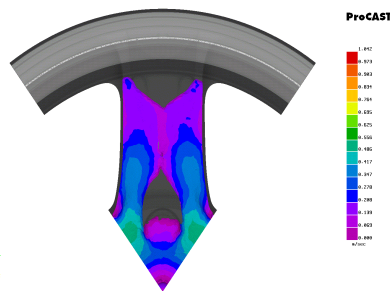
$\mu = 2.9 \cdot 10^{-3} \text{Pa} \cdot \text{s}$   
 $Dt=0.001$   
 Numero nodi: 65315  
 Numero elementi: 297232  
 Velocità di ingresso: 27.5 cm/s



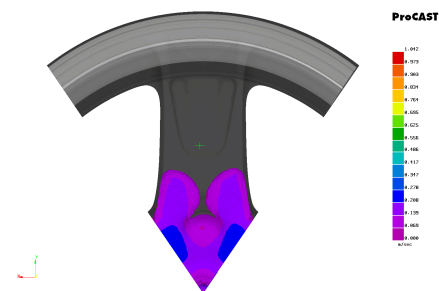
Sim1  $\mu = 2.9 \cdot 10^{-4} \text{Pa} \cdot \text{s}$



Sim 2 -  $\mu = 2.9 \cdot 10^{-5} \text{Pa} \cdot \text{s}$



Sim 3 -  $\mu = 2.9 \cdot 10^{-2} \text{Pa} \cdot \text{s}$



Sim 4 -  $\mu = 2.9 \cdot 10^{-1} \text{Pa} \cdot \text{s}$

### 3.3.6 Analisi di sensitività del codice al variare delle caratteristiche termofisiche del fluido

Seguendo la stessa procedura operativa adottata in precedenza in applicazioni del codice per analisi della fluidodinamica di riempimento di stampi, si è proceduto con attività di sperimentazione numerica volte a valutare la sensitività delle soluzioni numeriche ottenute da analisi di raffreddamento e solidificazione di componenti industriali al variare di alcuni parametri di calcolo.

Impiegando lo stesso modello geometrico realizzato per le analisi precedenti (modello 2) discretizzato secondo i parametri prevista dalla griglia 1 sono state condotte le seguenti analisi:

1. Individuazione di condizioni di grid independence nella previsione del raffreddamento e solidificazione della lega all'interno della cavità
2. Analisi di sensitività del codice al variare delle seguenti caratteristiche termofisiche della lega:
  - Conduttività termica
  - Calore specifico
  - Legge di dipendenza della frazione di solido dalla temperatura

Nella prima fase si è proceduto prendendo come griglia di riferimento la griglia 1 impiegata nelle precedenti analisi della fluidodinamica di riempimento. Si è quindi proceduto effettuando un confronto fra risultati ottenuti su griglie più lasche osservando la distribuzione di temperatura all'interno della cavità in tre istanti temporali di controllo.

Nella seconda fase sono state effettuate analisi numeriche mettendo a confronto risultati numerici ottenuti impiegando caratteristiche termofisiche della lega tratte da due diverse fonti, una fornita dal database del codice di calcolo l'altra da letteratura (Auburn).

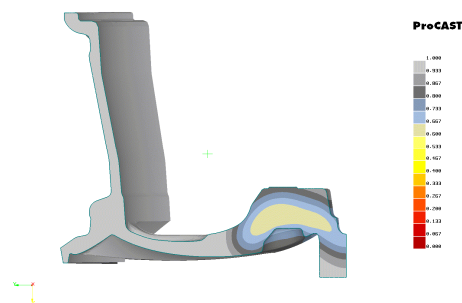
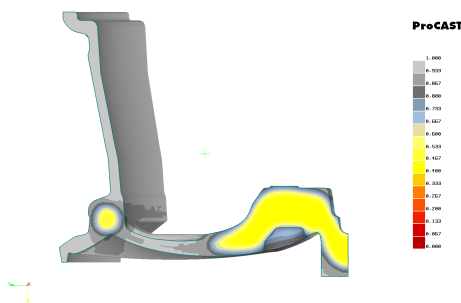
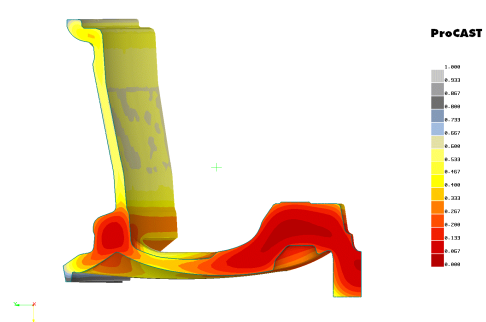
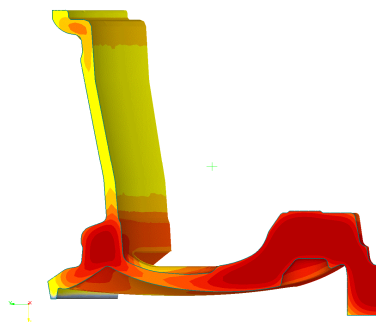
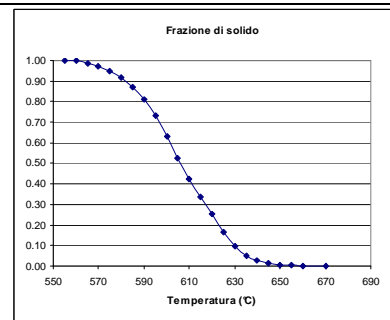
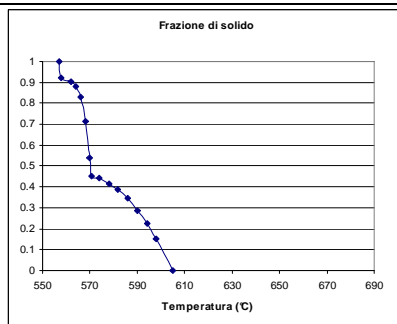
#### *Risultati e considerazioni*

Al termine della prima fase è stato possibile considerare come adeguata la griglia 1 scelta per lo studio della fluidodinamica di riempimento anche nelle analisi numeriche dei processi di raffreddamento e la solidificazione all'interno della cavità in quanto compatibile con le tempistiche di calcolo previste. Sebbene l'analisi di grid independence ha mostrato la possibilità di impiego di griglie più lasche con buon accordo con risultati ottenuti su griglia 1, si è preferito assumere la stessa discretizzazione impiegata per l'analisi delle fasi di riempimento lasciando quindi aperta la possibilità di svolgere analisi accoppiate.

Le analisi di sensitività al variare delle caratteristiche termofisiche hanno mostrato una sostanziale coincidenza tra i risultati al variare della conduttività termica e del calore specifico. Scostamenti più significativi si sono riscontrati impiegando due diverse curve di frazione solida in funzione di T (Tab. 3.3.4)

**Tabella 2.3.4 Confronto della distribuzione di frazione solida per  $t=10$  s e  $t=50$  s**

**Frazione solida in funzione della temperatura: Curva 1 - Riferimento**      **Frazione solida in funzione della temperatura: Curva 2 -Fonte Auburn**



### **3.4 Analisi sugli effetti di sistemi di raffreddamento a fluido in getti di fonderia**

#### **3.4.1 Introduzione**

Per efficienza energetica di uno stampo da pressofusione si intende la sua capacità di asportare calore dal prodotto di colata nel minor tempo possibile, con conseguente diminuzione del tempo ciclo.

Nella realtà di fonderia il corretto controllo della temperatura dello stampo, assume un'importanza vitale per il raggiungimento di un'elevata qualità della produzione e un'ottimizzazione del ciclo produttivo.

Il controllo della temperatura passa necessariamente attraverso il controllo dei parametri di processo durante il riempimento e la solidificazione della lega e si scontra inevitabilmente con le complessità di una corretta valutazione e previsione dei fenomeni di scambio termico che avvengono durante un processo di fusione.

I maggiori vantaggi conseguibili attraverso un perfetto controllo della temperatura all'interno dello stampo sono i seguenti:

- miglioramento delle caratteristiche meccaniche e di tenuta del getto pressofuso
- aumento della produttività delle attraverso la diminuzione del tempo ciclo
- aumento di vita degli stampi
- diminuzione del numero di scarti

Le caratteristiche meccaniche di un getto pressofuso sono strettamente correlate alla morfologia strutturale della lega e alla sua granulometria. In particolare con l'aumento del numero dei grani per unità di volume si ottengono strutture cristalline fini e si riscontra un miglioramento dei valori di allungamento percentuale, resistenza meccanica a trazione e durezza.

La dimensione dei cristalli nella pressofusione è legata al tempo locale di raffreddamento del getto: tempi brevi di raffreddamento permettono di ottenere strutture fini ed elevate caratteristiche meccaniche e di tenuta. Tempi di raffreddamento elevati comportano strutture grossolane e basse caratteristiche meccaniche.

Un'accurata termoregolazione dello stampo permette pertanto di intervenire sulla velocità di raffreddamento e quindi sulle caratteristiche meccaniche del getto.

Inoltre, su pezzi di produzione aventi differenti spessori, tramite un preciso controllo dei parametri di termoregolazione è possibile uniformare le proprietà meccaniche rendendo uniforme il tempo di solidificazione nelle varie zone del getto, riscaldando le zone troppo fredde (piccoli spessori) e raffreddando quelle più calde (grossi spessori).

In questo capitolo si intende illustrare sinteticamente alcuni aspetti tecnici di tecnologie di raffreddamento per stampi che sfruttino fluidi come mezzo termovettore, passando in rassegna lo stato delle attuali tecnologie.

Successivamente vengono esposti alcuni principi fisici che interessano questa tipologia di scambio termico suggerendo una metodologia di calcolo e di previsione dei coefficienti di scambio termico di un canale di raffreddamento a sezione circolare percorso da acqua.

Infine sono riportati i risultati di un'analisi numerica portata a termine studiando un profilo bidimensionale che rispetta i rapporti dimensionali di uno stampo di reale impiego per la produzione di un cerchio in lega di alluminio.

#### **3.4.1 Principi tecnico-teorici di funzionamento dei sistemi di termoregolazione di parti stampanti.**

La tecnologia di controllo della temperatura di raffreddamento, è una pratica ormai ampiamente consolidata nella produzione di fonderia, e prevede in larga misura l'impiego di impianti che, sfruttando aria compressa, permettono di controllare la velocità di solidificazione in alcuni punti del getto definiti "critici" per la buona riuscita del prodotto finito dove è maggiore la probabilità di riscontrare difettosità.

Questa tecnologia è stata affiancata da altri sistemi di controllo della velocità di raffreddamento dello stampo tramite impianti che impiegano fluidi termovettori. Questi sistemi di termoregolazione sono costituiti da canali che attraversano lo stampo e permettono di portare il fluido refrigerante-scaldante vicino alla superficie di interfaccia tra stampo e fuso aumentando la velocità di raffreddamento di una determinata zona dello stampo,

E' bene precisare che, in generale, per *termoregolazione* si intende la capacità di una particolare tecnologia di controllare la temperatura in un determinato punto dello stampo riscaldando o raffreddando un determinata zona regolando la temperatura o la portata del fluido termovettore.

La necessità di controllare la temperatura del fluido impone necessariamente il ricorso a centraline di termoregolazione, che consentano di raffreddare o riscaldare il fluido all'occorrenza.

Un sistema più semplificato di impiego di questa tecnologia può limitarsi all'impiego di un fluido termovettore per il solo raffreddamento dello stampo, in sostituzione o in complementarietà con l'impiego di canali ad aria compressa.

In prossimità di un canale di raffreddamento il flusso termico all'interno dello stampo è diretto dalla massa di alluminio all'interno della cavità alla temperatura di colata verso lo stampo.

Dallo stampo il flusso termico è diretto verso il canale di raffreddamento e quindi verso il fluido refrigerante.

Lo scambio termico che interessa la zona vicina al raffreddamento avviene principalmente per conduzione termica nella parete dello stampo, e per convezione nel mezzo refrigerante.

Se da una parte lo scambio termico all'interno dello stampo è funzione della conduttività termica del materiale in cui è realizzata la parte stampante e dalle masse in gioco lo scambio termico convettivo all'interno del canale dipende principalmente dalle caratteristiche del fluido refrigerante e dal regime di moto che si sviluppa al suo interno.

Le caratteristiche ottimali per un fluido termovettore possono sinteticamente essere così elencate:

- elevato punto di ebollizione
- elevata conducibilità termica
- alto punto di infiammabilità (per fluidi oleosi)
- inossidabilità
- non corrosività
- non tossicità

L'attuale stato dell'arte della tecnologia fornisce una scelta di sistemi di regolazione-raffreddamento che sfruttano principalmente due tipi di fluidi termovettori: olio diatermico oppure acqua.

L'acqua rispetto all'olio ha un coefficiente di trasmissione del calore per convezione e per conduzione circa doppio. Di contro presenta però un basso punto di ebollizione, e la tendenza a formare depositi calcarei e di innescare fenomeni corrosivi.

Inoltre, in caso di formazione di vapore all'interno del raffreddamento, lo scambio termico è frenato dall'effetto dovuto all'espansione del vapore che può creare una contropressione e impedire la regolare circolazione di fluido.

In questi casi si assiste ad un passaggio del fluido dalla sezione di uscita del circuito di raffreddamento con alternanza di correnti liquide e getti di vapore.

Un altro espediente utilizzato per evitare la vaporizzazione del fluido è quello di pressurizzare il circuito in modo da avere acqua sempre allo stato liquido anche ad alte temperature. Per evitare fenomeni corrosivi e depositi calcarei è possibile utilizzare materiali anticorrosivi nella costruzione degli stampi, eventualmente trattando l'acqua di processo per limitare la formazione di calcare.

Gli olii diatermici si distinguono in olii minerali e fluidi sintetici e sono composti in maggioranza da idrocarburi.

A differenza dell'acqua questi fluidi presentano una conduttività termica che diminuisce all'aumentare della temperatura e possono cambiare le loro caratteristiche termofisiche e meccaniche con l'invecchiamento.

Uno dei maggiori vantaggi derivante dall'impiego di olii diatermici è riconducibile al loro elevato punto di ebollizione che può arrivare a valori prossimi ai 300 °C.



### 3.4.2 Calcolo del coefficiente di scambio termico in un canale di raffreddamento rettilineo a sezione circolare

Come già affermato, le caratteristiche e la tipologia di fluido termovettore impiegato non sono l'unico fattore che influisce sull'efficienza di un sistema di raffreddamento; molta importanza riveste anche il regime di moto del fluido all'interno del canale e il layout dell'impianto di raffreddamento.

Poiché la dimensione fisica del circuito (diametro dei canali di raffreddamento) è fissa, in quanto determinata in fase di costruzione, la variazione del regime di flusso è possibile solo variando la velocità del flusso all'interno del canale e quindi la portata.

Un moto turbolento ( $Re > 4000$ ) all'interno del canale permette un miglioramento significativo dell'efficienza di scambio termico del fluido a parità di condizioni geometriche.

La definizione del regime di moto in funzione del numero di Reynolds viene illustrata in Tab. 1 dove viene riportata una classificazione di massima del regime di moto nel canale in base al valore di Re.

**Tabella 3.4.1 Numero di Reynolds e regime di moto**

Numero di Re	Regime di moto
< 2000	laminare
2000-4000	transitorio
> 4000	turbolento

Il regime di moto di un fluido all'interno del canale è dato dal numero di Reynolds ( $Re$ ) calcolato secondo la formula:

$$Re_D = \frac{\rho u_m D}{\mu} \quad (3.1)$$

dove

$u_m$  è la velocità media del fluido attraverso la sezione del canale

$D$  diametro del canale

$\rho$  densità del fluido

$\mu$  viscosità dinamica del fluido

Se  $Re > 10000$ , il moto all'interno del canale può considerarsi pienamente turbolento.

La transizione verso un regime di moto pienamente turbolento solitamente comincia in uno strato limite di parete nella regione di ingresso del canale.

Se si assume che il tratto di canale di raffreddamento che attraversa lo stampo, interessato dallo scambio termico si trova a distanza sufficiente dalla zona di ingresso del liquido, in tutto il tratto di canale che scambia con lo stampo è possibile ipotizzare un regime di moto completamente sviluppato.

Il calcolo della velocità media  $u_m$  che compare nella (1) può essere effettuato ipotizzando il moto all'interno del canale con sezione costante  $A_c = \pi D^2/4$  con portata in massa  $Q$  secondo la relazione:

$$u_m = \frac{Q}{\rho A_c}$$

sostituendo nella (1) si ottiene

$$Re_D = \frac{4Q}{\pi D \mu}$$

Per calcolare il coefficiente di scambio termico convettivo è necessario calcolare il valore di altri due parametri dimensionali: il numero di Prandtl ( $Pr$ ) e il numero di Nusselt ( $Nu$ ).

Il numero di Prandtl è dato da

$$Pr = \frac{c_p \mu}{\lambda}$$

dove

$c_p$  è il calore specifico a  $p$  costante del fluido

$\lambda$  è la conduttività termica del fluido

Il numero di Nusselt può essere calcolato secondo la correlazione proposta da Chu e [-]:

$$Nu_D = \frac{(f/8) Re_D Pr}{1.07 + 12.7(f/8)^{1/2} (Pr^{2/3} - 1)}$$

dove  $f$  è il fattore di attrito che per pareti del canale sufficientemente lisce può essere ottenuta da

$$f = (0.790 \ln Re_D - 1.64)^{-2}$$

La correlazione è valida per  $0.5 < Pr < 2000$  e  $3000 < Re_D < 5 \times 10^6$ .

Una volta noto il numero di Nusselt  $Nu_D$  è possibile ricavare il coefficiente di scambio termico convettivo  $h$ :

$$h_e = \frac{Nu \lambda}{D} \quad (3.2)$$

Si riporta quindi a titolo di esempio una applicazione della procedura di calcolo del coefficiente di scambio termico sopra riportata.

Si ipotizza di studiare un canale rettilineo a sezione circolare avente diametro di 10 mm. Il fluido in circolo è acqua le cui caratteristiche termofisiche alla temperatura  $t=80^{\circ}\text{C}$  sono quelle riportate in Tab.3.4.2.

I dati dimensionali del canale di raffreddamento e i dati di processo sono riportati in tabella 3.4.3.

**Tabella 3.4.2 Caratteristiche termofisiche del fluido**

conduttività termica	$\lambda$	W/Km	0.674
viscosità	$\mu$	kg/ms	0.000350
densità	$\rho$	kg/m <sup>3</sup>	970
calore specifico	$c_p$	kJ/kgK	0.00418

**Tabella 3.4.3 Dati di processo**

Sezione passaggio	Ac	m <sup>2</sup>	0.0000785
Diametro	D	m	0.01
Portata	Q	kg/s	0.18
velocità media del fluido	W	m/s	2.364

Dai dati riportati è possibile quindi ricavare i parametri adimensionali:

$$\text{Re}_D=65514$$

$$\text{Pr}=2.2$$

I parametri trovati risultano compresi entro gli intervalli di validità delle correlazioni precedentemente esposte.

Per ottenere il valore del coefficiente di scambio termico si può quindi procedere, calcolando prima il valore del coefficiente di attrito  $f$ :

$$f=0.0197$$

e quindi il numero di Nusselt:

$$\text{Nu}_D=234$$

il coefficiente di scambio termico convettivo può pertanto essere ottenuto dalla (3.2):

$$h_e=15801 \text{ W/m}^2\text{K}$$

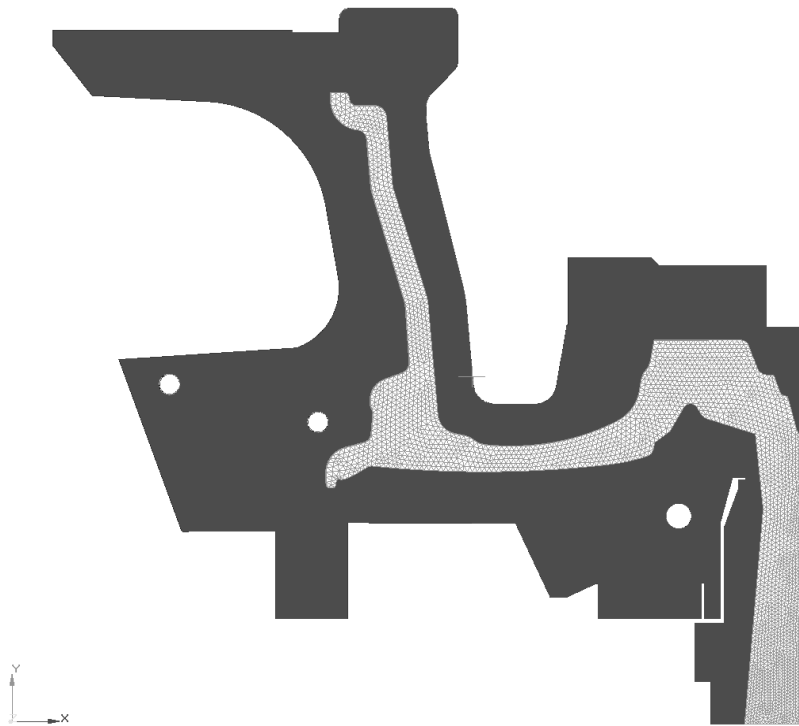
### 3.4.3 Applicazione numerica ad un caso bidimensionale

Data la complessità geometrica delle realtà applicative di fonderia in cui vengono impiegati i canali di raffreddamento uno studio analitico dello scambio termico che avviene all'interno dello stampo risulta impraticabile. Per lo studio del problema e per prevedere la distribuzione di temperatura sia all'interno dello stampo sia nella lega in solidificazione risulta quindi indispensabile ricorrere a

metodi numerici. In quest capitolo vengono riportati i risultati ottenuti da un'analisi analitico-numerica effettuata per stimare gli effetti indotti sulle dinamiche di raffreddamento di parti stampanti, dalla presenza di canali di raffreddamento ad acqua.

Al fine di semplificare il problema si è studiata la geometria bidimensionale rappresentata in Fig. 3.4.1. I rapporti dimensionali dello stampo e della cavità da solidificare rispecchiano quelli di uno stampo attualmente impiegato in produzione presso lo stabilimento BBS.

Lo studio numerico è stato condotto assumendo che la cavità sia completamente riempita da una lega di alluminio in condizioni iniziali di temperatura uniforme  $T=700^{\circ}\text{C}$ .



**Figura 3.4.1** Sezione del sistema studiato

Il valore di temperatura dei componenti dello stampo all'istante iniziale è uniforme e pari a  $T_s=300^\circ$

Nello studio si trascura il calcolo delle resistenze termiche di contatto in corrispondenza dell'interfaccia di contatto acciaio-alluminio dove si assume un una conduttanza termica costante e uniforme  $K=1000 \text{ W/mK}$ .

In corrispondenza della superficie superiore dello stampo a contatto con aria a temperatura ambiente di  $30^\circ\text{C}$  viene assunto un coefficiente di scambio liminare  $h=5 \text{ W/mK}$ .

Lungo la superficie laterale il coefficiente è assunto un coefficiente  $h=10 \text{ W/mK}$ , l'ambiente circostante viene assunto a temperatura di  $80^\circ\text{C}$ .

*Influenza della portata di fluido sulla distribuzione della temperatura nello stampo*

Un primo studio è stato effettuato tramite confronto tra le soluzioni numeriche ottenute al variare della portata di acqua circolante e quindi del coefficiente di scambio termico lungo il raffreddamento lasciando invariate le altre condizioni al contorno e condizioni iniziali che caratterizzano il processo.

I casi messi a confronto sono riportati in Tab. 3.4.4 dove, al variare della portata, viene riportato il coefficiente di scambio termico per i diversi casi in esame.

Un confronto qualitativo può essere effettuato osservando le mappe di distribuzione di temperatura e di percentuale di frazione solida all'interno della cavità in corrispondenza di un preciso istante temporale.

Come si può osservare dal confronto delle Fig. 3.4.2-3.4.5 un effetto dovuto al canale di raffreddamento sulle dinamiche di solidificazione del componente è già osservabile con portate del circuito di raffreddamento relativamente basse (caso 2).

Ciò che si può riscontrare è che la presenza del canale di raffreddamento induce uno spostamento verso la superficie esterna della zona "calda" che nella particolare sezione in esame del componente dovrebbe ricadere al centro della zona massiva individuata dal punto P1.

**Tabella 3.4.4 Parametri dei casi posti a confronto**

	Portata canale	Temp. fluido	Reynolds	Nusselt	Coeff. di scambio h
	Q (l/s)	T (°C)	Re	Nu	(W/m <sup>2</sup> K)
Caso1	0	-	-	-	-
Caso2	0.10	15	36400	146	9850
Caso 3	0.18	15	65514	234	15800
Caso 4	0.30	15	11000	943	23953

Questo fenomeno è risultato pienamente confermato da analisi metallografiche condotte su componenti prodotti mediante parti stampanti raffreddate con canali di raffreddamento localizzati in posizioni corrispondenti a quelle ipotizzate in questo studio. Infatti, in corrispondenza della zona opposta a quella di influenza del canale (punto P2) è stata riscontrata una maggiore porosità superficiale. A tal riguardo bisogna sottolineare come la porosità da ritiro sia solitamente associata a zone di ultima solidificazione (i cosiddetti “punti caldi”) e, senza l'intervento di sistemi localizzati di termoregolazione, la presenza di porosità in componenti come quello studiato è solitamente riscontrabile nella zona più massiva, ovvero, nel caso in esame, in corrispondenza del punto P1.

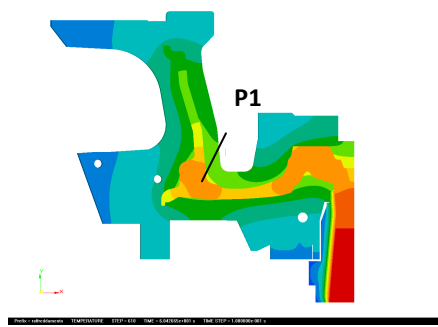


Fig. 3.4.2 Caso 1 - Temperatura t=60s

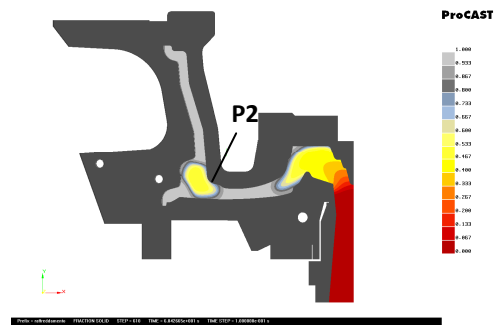


Fig. 3.4.3 Caso 1 - Frazione di solido t=60 s

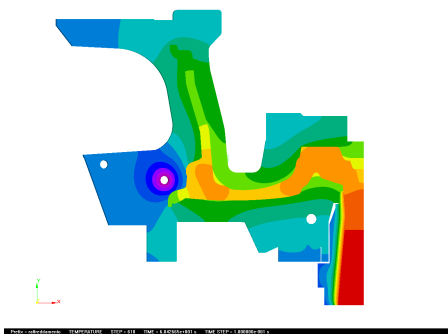


Fig. 3.4.4 Caso 2 - Temperatura t=60 s

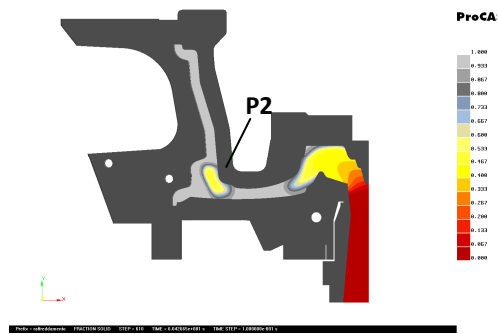


Fig. 3.4.5 Caso 2 - Frazione di solido t=60 s

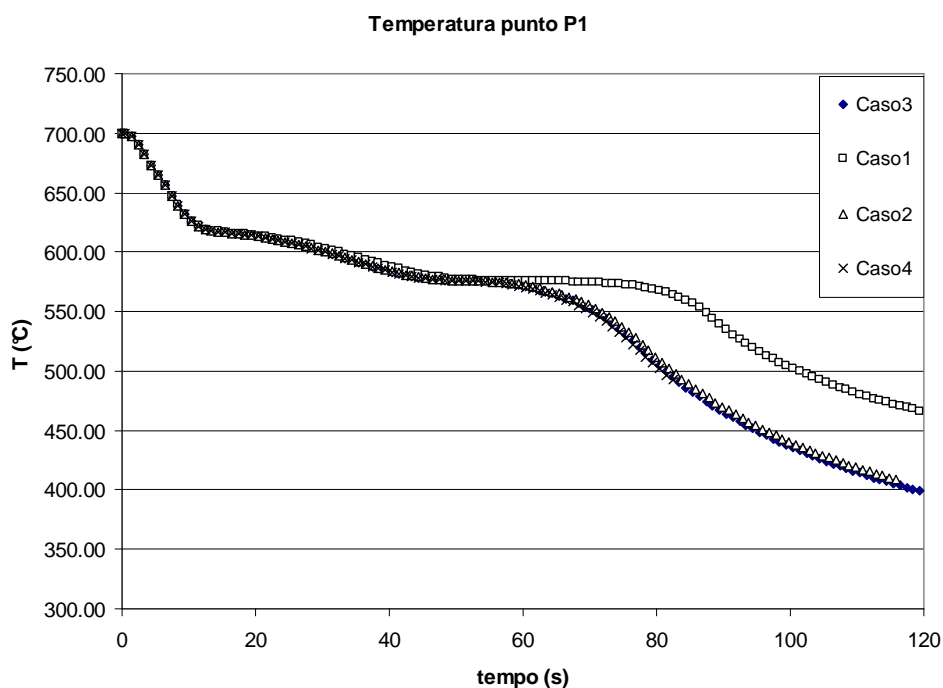
Un'analisi più significativa può effettuarsi confrontando il Caso 1 (raffreddamento assente o inattivo) con il Caso 3 osservando in particolare l'andamento del valore di temperatura nel tempo nel punto P1 (Fig.3.4.6).

Confrontando le curve di andamento della temperatura nel punto P1 ottenute nel caso 1 (raffreddamento inattivo) e nel caso 2 si evidenzia uno scarto tra le curve all'istante  $t=100$  s di circa  $70$  °C (20% ca.).

Le curve di raffreddamento del punto P1 nei casi 2-3-4 si mostrano sostanzialmente coincidenti.

E' possibile pertanto concludere che la distribuzione della temperatura risulta scarsamente correlata al valore di portata del canale di raffreddamento l'intervallo di valori riportati in Tab. 1.

La portata minima viene quindi ad essere definita dalla necessità di evitare l'eccessivo surriscaldamento del fluido all'interno del canale evitando di raggiungere le condizioni di vaporizzazione.



**Fig. 3.4.6 Confronto del valore di temperatura nel punto di controllo P1**

*Influenza della distanza del canale di raffreddamento dalla interfaccia stampo-alluminio*

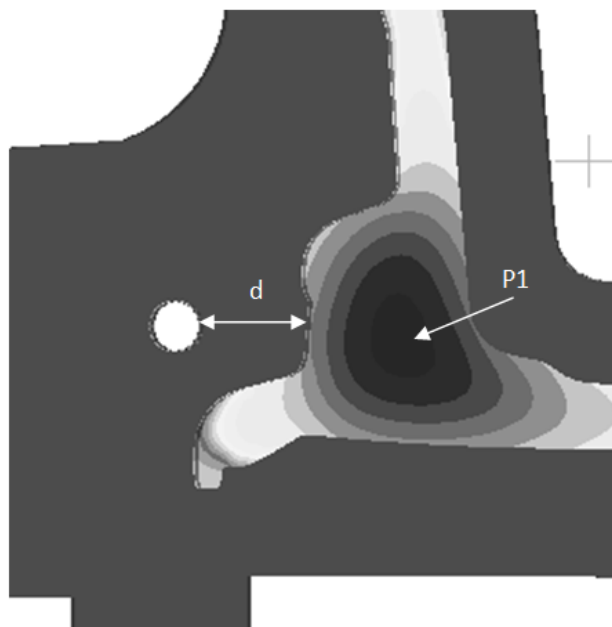
Un secondo confronto è stato eseguito confrontando l'effetto del canale di raffreddamento al variare della sua distanza dall'interfaccia di contatto alluminio-stampo.

I casi presi in esame sono elencati in Tabella 3.4.5 e sono caratterizzati dalla distanza  $d$  illustrata in Fig. 3.4.7.

Come nello studio precedente un confronto tra le soluzioni può essere effettuato qualitativamente confrontando le mappe di temperatura dello stampo in un preciso istante temporale (Fig. 3.4.8-3.4.11) nel caso A e B.

In fig. 3.4.12 vengono invece mostrate le curve di andamento della temperatura nel tempo in un punto significativo P1, illustrato in fig. 11, al variare della distanza  $d$  del canale dall'interfaccia.

Come è possibile osservare in Figura 20 dopo i primi 100 s di raffreddamento l'andamento della temperatura del caso C mostra uno scostamento di circa 37 °C (-7%) rispetto al valore di temperatura calcolato considerando inattivo il raffreddamento (caso Off).



**Figura 3.4.7** Distanza del canale di raffreddamento dall'interfaccia



**Tabella 3.4.5 Casi in esame al variare della distanza d**

	Portata canale Q (kg/s)	Temp. fluido T (°C)	distanza d (mm)	Coeff. di scambio h (W/m <sup>2</sup> K)
Caso Off	-	-	-	0
Caso A	0.10	15	8.5	9850
Caso B	0.10	15	20.5	9850
Caso C	0.10	15	32.5	9850

La curva di andamento della temperatura del punto P1 per il caso B si assesta su un valore inferiore rispetto al caso A di circa 27 °C (5%).

Nello stesso istante di osservazione (100s) il valore della temperatura calcolato nel punto P1 nel caso A è inferiore di circa 25 °C rispetto a quella prevista nel caso di raffreddamento spento (Caso Off).

Durante questo transitorio lo scambio termico non segue le leggi descritte nei paragrafi precedenti, valide solamente se il fluido si presenta allo stato liquido e quindi non è possibile rifarsi ai principi teorici esposti per ottenere un coefficiente di scambio termico teorico.

Il grafico di Fig. 3.4.12 viene quindi a perdere di validità negli istanti iniziali in cui è presumibile vi sia un contributo fornito dal calore latente di vaporizzazione del fluido. Lo studio di questa tipologia di scambio esula dagli scopi di questa analisi.

Un' ultima verifica può essere effettuata osservando i valori di temperatura raggiunti dalla superficie del canale che deve mantenersi su valori inferiori al punto di vaporizzazione dell'acqua.

I grafici di andamento della temperatura sulla superficie del canale riportati in fig. 21 mostrano come la parete del canale tenda a raffreddarsi rapidamente e, trascurato il primo periodo di transitorio (10 s ca.), il suo valore risulta compreso tra 55°C e 75 °C.

In conclusione di questa fase di ricerca è possibile affermare che l'analisi numerica ha permesso di effettuare, in primo luogo, uno studio sugli effetti della portata del canale di raffreddamento sulla distribuzione di temperatura e quindi sull'efficienza di raffreddamento.

Ciò che è stato possibile riscontrare è che, per valori di portata compresi entro il range di possibile esercizio dell' impianto di alimentazione (6-30 l/min), la curva di raffreddamento dell'alluminio in un determinato punto assunto come riferimento all'interno della cavità raffreddata non ha mostrato variazioni apprezzabili. In seconda analisi sono stati confrontati i risultati ottenuti al variare della distanza del canale dalla superficie di interfaccia cavità/stampo cercando di risalire ad una correlazione che legghi la distanza del canale dall'interfaccia con la curva di raffreddamento in un punto significativo.

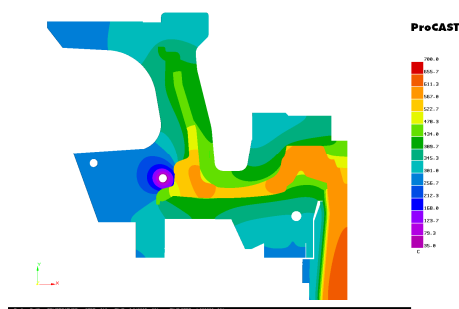


Fig. 3.4.8 Caso A - Temperatura t=60s



Fig. 3.4.9 Caso A - Frazione di solido t=60 s

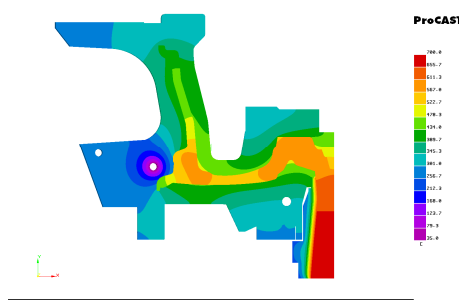


Fig. 3.4.10 Caso B - Temperatura t=60 s

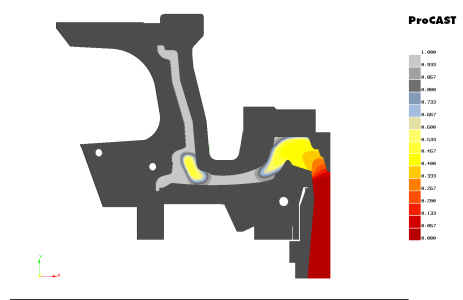


Fig. 3.4.11 Caso B - Frazione di solido t=60 s

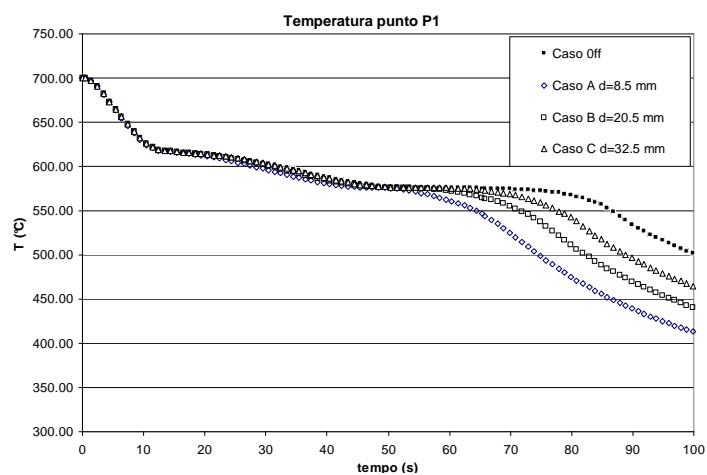


Fig. 3.4.12 Andamento della temperatura nel punto P

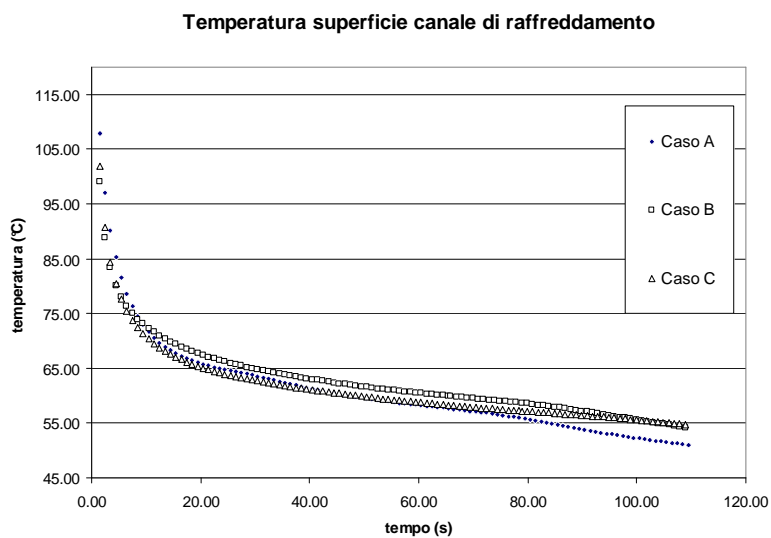


Fig. 3.4.13 Andamento della temperatura sulla superficie del canale

Infine è stata verificato l'andamento di temperatura sulla superficie del canale di raffreddamento a partire dagli istanti iniziali di funzionamento del raffreddamento.

Occorre a questo punto rimarcare l'attenzione sulle ipotesi poste alla base dello studio numerico svolto; il sistema di raffreddamento analizzato sfrutta un canale rettilineo circolare percorso da un fluido (in particolare acqua) assumendo come ipotesi che durante tutto il processo di raffreddamento il fluido si mantenga allo stato liquido.

Questa ipotesi di base non è facilmente conseguibile durante il processo reale, specialmente durante la fase transitoria di apertura della valvola di alimentazione del canale le cui pareti si trovano presumibilmente a valori di temperatura di regime dello stampo, notevolmente superiori al punto di vaporizzazione del fluido.

#### Riferimenti Bibliografici

- [1] J. F. Hetu, Numerical Modeling of Casting Processes, *Advanced Performance Materials* 5, pp. 65-82, (1998)
- [2] Z. Shi, Z.X. Guo Numerical heat transfer modelling for wire casting, *Mat. Sci. Eng.*, pp. 311-317
- [3] S. V. Shepel, S. Paolucci, *Numerical of filling and solidification of permanent mold castings*, *App. Therm. Eng.*, vol. 22, pp. 229-248, (2002)
- [4] J Campbell, *Casting*, Oxford, UK, Elsevier Science Ltd, 2003
- [5] K. Ravindran, R. W. Lewis *Finite element modelling of solidification effects in mould filling*, *Finite Elements in Analysis and Design*, 31, (1998) 99-116
- [6] J.H. Kuo et al. *Development of an interactive simulation system for the determination of the pressure-time relationship during the filling in a low pressure casting process*, *Science and Technology of Advanced Materials*, 2, pp. 131-145, (2001)



#### Cap 4. Considerazioni Conclusive

In questa trattazione sono stati esposti i risultati di un'attività di indagine finalizzata allo studio e all'approfondimento dei modelli matematico-numeriche sviluppati nel corso degli anni per lo studio dei fenomeni di cambiamento di fase solido-liquido in applicazioni di fonderia.

L'indagine è stata condotta su due fronti. Il primo, di carattere teorico, mediante una ampia rassegna della letteratura approfondisce le diverse formulazioni e le successive applicazioni di modelli destinati a codici di calcolo commerciale. Il secondo, di tipo prettamente industriale, ha puntato a mettere a punto strategie di impiego dei modelli implementati in codici commerciali per analisi numeriche di processi fonderia.

Attraverso il primo ambito di indagine si è cercato di ricostruire le tappe di sviluppo e affinamento dei modelli numerici nel corso degli anni, partendo dalle prime formulazioni di Stefan (1889) scritte per descrivere numericamente fenomeni di cambiamento di fase di sostanze pure in regime di conduzione monodimensionale, fino ai più recenti sviluppi che vedono la ricerca nel campo indirizzata a proporre formulazioni matematiche predittive di complessi fenomeni che avvengono su scala microstrutturale, come ad esempio la microsegregazione e l'accrescimento dendritico nelle leghe metalliche.

Il punto di vista adottato in questa fase di indagine ha visto l'approccio allo studio numerico del fenomeno limitato alla scala macroscopica del problema, lasciando ad eventuali approfondimenti e studi successivi l'estensione delle attività di indagine sui modelli matematico-numeriche sviluppati nell'ultima decade, più espressamente dedicati alla previsione di fenomeni che avvengono su microscala.

Questa scelta è stata motivata dalla volontà di comprendere a fondo il livello di accuratezza raggiunto da formulazioni matematiche che, a fronte di una più ampia possibilità di pratico impiego, trascurano alcuni importanti aspetti fisici che interessano la solidificazione/fusione di sostanze multicomponente. Un esempio è offerto nei risultati riportati al Cap.2 dove si propone una strategia di studio del cambiamento di fase di leghe binarie, trascurando lo studio della segregazione del soluto, tenendo comunque in conto i contributi alla convezione dovuti gli effetti di microsegregazione attraverso l'interfaccia di cambiamento di fase.

La scelta di scala adottata per l'indagine trova una sua ulteriore giustificazione se si considerano gli odierni limiti computazionali nell'approccio a problematiche complesse di tipo industriale, come nel caso di analisi di comuni processi di fonderia, affrontabili numericamente solo mediante modelli su scala macroscopica.

Analisi numeriche più raffinate risultano oggi perseguibili in casi di studio particolari, in cui il fenomeno di cambiamento di fase avviene in condizioni estremamente controllate, dove quindi è possibile ottenere un'accurata determinazione delle condizioni al contorno e dei parametri di processo.

Ciò che si è voluto porre in evidenza attraverso questo lavoro riguarda in particolare le potenzialità applicative di modelli matematici ottenuti a partire da formulazioni generali delle termo-fluidodinamica, opportunamente semplificate per tenere in conto dei fenomeni energetici e meccanici dovuti al passaggio di fase.

Un approccio numerico di questo tipo deve poggiare su alcuni assunti di base e su formulazioni di origine empirico-analitica in grado di fornire le informazioni mancanti legate ai fenomeni di micro-scala.

Volendo trovare analogie nel campo fluidodinamico è possibile assimilare la scala delle strutture turbolente alla scala dei fenomeni di nucleazione e accrescimento della microstruttura con i relativi aspetti di microsegregazione ad essi collegati. Seguendo la stessa analogia è possibile associare i modelli di turbolenza alle equazioni costitutive che sono state qui discusse ed esaminate. Come nel caso della modellazione della turbolenza, anche la simulazione *diretta* dei fenomeni di cambiamento di fase sembra un traguardo raggiungibile nei prossimi anni, sebbene occorra ancora focalizzare le ricerche su modalità e metodi con cui fare dialogare formulazioni nate da approcci al problema che originano da punti di vista profondamente diversi.

Come ultima considerazione si intende rimarcare un concetto già espresso in diversi punti di questa trattazione e che è emerso in tutti gli esempi applicativi riportati, dove si evidenzia come non sia possibile individuare un modello universalmente valido per lo studio numerico del cambiamento di fase.

La scelta oculata di un modello numerico e delle sue strategie di impiego deve quindi fondarsi su due punti fondamentali: una corretta analisi di scala preliminare, in grado di suggerire all'analista quali aspetti del fenomeno siano dominanti (come ad esempio nel caso di fenomeni di micro e macrosegregazione) e, in seconda istanza, una capacità di prevedere fin dalle prime fasi della simulazione le caratteristiche morfologiche attese nel sistema in cambiamento di fase.





### *Ringraziamenti*

*Si ringraziano sentitamente tutti coloro che hanno contribuito allo svolgimento delle attività trattate in questo lavoro: il personale di BBS per la disponibilità sempre dimostrata, Daniele e Martina per l'aiuto concreto nelle prove in laboratorio.*

*Un ringraziamento particolare va al mio Tutore, per avermi trasmesso in questi anni di collaborazione un prezioso rigore metodologico, strumento indispensabile, senza il quale, attività come queste sarebbero prive di senso*

R.S.

---