

ESTUDO COMPARATIVO DA INFLUÊNCIA DA CONDIÇÃO INICIAL NO PROBLEMA DE STEFAN COM SOLUÇÃO VIA TÉCNICA DE TRANSFORMADA INTEGRAL GENERALIZADA

Rogério Ramos

Departamento de Engenharia Mecânica – UFES – Av. Fernando Ferrari, 514 – Goiabeiras – 29.075-910 – Vitória/ES
ramosrogerio@hotmail.com

Edgar Schneider

Petróleo Brasileiro S.A.- Petrobras – Av. Nossa Senhora da Penha, 714 – sala 1101 – Praia do Canto – 29.055-918 – Vitória/ES
edgarschneider@petrobras.com.br

Resumo. Os processos relativos à solidificação (ou fusão) são importantes em muitas áreas da engenharia e têm sido objeto de numerosos estudos, cujas aplicações se estendem a problemas tais como: congelamento de alimentos, produção de gelo, soldagem, fundição de ligas metálicas, preservação de sangue humano, armazenamento de energia e muitos outros. Nesses problemas, a fronteira que separa as fases envolvidas movimenta-se de acordo com a absorção ou liberação do calor latente. Os problemas de mudança de fase são não-lineares devido à presença de uma interface em movimento, cuja posição tem de ser determinada como parte da solução. Por outro lado, o caso unidimensional de problema de mudança de fase é particularmente adequado para a covalidação de métodos, já que nesta situação há soluções de referência disponíveis. A chamada solução de Neumann para o problema de Stefan é uma expressão analítica de fácil implementação computacional, que pode ser usada para testar a exatidão de procedimentos alternativos, que posteriormente poderão ser usados na solução de problemas mais complexos. O objetivo do presente trabalho é avaliar a influência da escolha do tipo de condição inicial, para a obtenção do perfil de temperaturas do processo de solidificação. São analisados os resultados a partir da proposição de três condições iniciais diferentes com solução via Técnica de Transformada Integral Generalizada (General Integral Transform Technique - GITT) e comparadas com a solução de Neumann.

Palavras chave: Mudança de Fase, Solidificação, Problema de Stefan, Transformação Integral

1. Introdução

Na literatura, problemas associados à transferência de calor e massa com mudança de fase (solidificação ou fusão), são conhecidos como problemas de fronteira em movimento ou problema de Stefan (Özsisik, 1980, Özsisik e Murray, 1980). Devido a indisponibilidade de uma solução analítica para estes problemas não-lineares, têm-se desenvolvido metodologias numéricas específicas para prever a posição da fronteira com o tempo. Várias propostas têm sido feitas na pesquisa de métodos numéricos que resolvam problemas de mudança de fase. De fato, técnicas efetivas têm sido desenvolvidas para tratamento das dificuldades como contornos em movimento e não-linearidades (Crank, 1984 e Tamma et al., 1990).

Através de Stefan (1891), as primeiras soluções foram obtidas abordando o problema da formação do gelo. Nas últimas décadas, diferentes métodos numéricos têm sido usados para resolver o problema, tratando a localização da interface como desconhecida (Budhia et al., 1973; Rao et al., 1984 e Rathjen et al., 1971). Tiem et al. (1967) usou o método do balanço integral para obter uma solução semi-analítica para a solidificação de uma liga eutética binária. Já Cho et al. (1969) apresentou uma solução exata para a distribuição de temperatura e taxa de mudança de fase em um corpo semi-infinito com temperatura constante na superfície.

Fukusako et al. (1987) apresentaram uma revisão para soluções de problemas de transferência de calor com mudança de fase definida em uma fronteira apenas. Nesse trabalho, os métodos são testados em quatro situações diferentes e comparados com a solução analítica de Neumann, sendo proposta uma metodologia para a validação sistemática do procedimento numérico.

Sobre a aplicação da Técnica de Transformada Integral Generalizada (G.I.T.T.) associada ao problema, cita-se o trabalho de Rupert et al. (1991) que aplicaram a técnica na análise de condução unidimensional de calor e mudança de fase em região finita, baseando-se num exemplo típico de proteção térmica em veículos espaciais. Pouco depois, Rupert et al. (1998) fez a validação e comparação de duas técnicas numéricas aplicadas na solução de um problema de transferência de calor não linear (o problema de Stefan), incluindo condução de calor com mudança de fase

Diniz et al. (1996) propuseram uma solução analítica para problema de transferência de calor com mudança de fase em geometria axi-simétrica e Marco (1999) utilizou a G.I.T.T para transformar um sistema não-linear de equações diferenciais parciais em um sistema infinito de equações diferenciais ordinárias, obtendo parâmetros de interesse como espessura e velocidade ablativa, que foram comparados com os da literatura, com bons resultados.

Cotta et al. (1997) mostraram a técnica de transformada integral na solução de problemas de transferência de calor, incluindo mudança de fase. Os autores apresentaram uma nova aplicação da G.I.T.T. para a solução de

problemas de contorno em movimento. Mostrou-se que a exatidão da solução obtida é excelente quando comparada com a técnica clássica discreta e pode ser usada para obter soluções de referência, quando soluções analíticas exatas não estão disponíveis.

Grande parte do conhecimento a respeito da mudança de fase está associada com a concepção de modelos matemáticos fidedignos, que reproduzam o fenômeno com o máximo de realismo possível. Modelos esses que, por sua natureza diferencial parcial não-linear, têm sua solução obtida através de métodos numéricos que necessitam ser validados. Assim, o objetivo do presente trabalho é apresentar um estudo comparativo pela adoção de três diferentes condições iniciais para o problema de mudança de fase de Stefan, realizando uma comparação com a solução clássica de Neumann, utilizando a Técnica da Transformada Integral Generalizada (General Integral Transform Technique - GITT), em uma solução de natureza híbrida numérico-analítica para o modelo matemático proposto.

A chamada solução de Neumann para o problema de Stefan é uma expressão analítica de fácil implementação computacional, que pode ser usada na comparação de procedimentos alternativos, que posteriormente poderão ser usados na solução de problemas mais complexos.

2. Definição do Problema

Considerando o problema de Stefan clássico, envolvendo mudança de fase na condução de calor de sólidos, supõe-se a existência de uma região semi-infinita inicialmente líquida à temperatura uniforme T_i , com $T_i > T_m$, onde T_m é a temperatura de mudança de fase (solidificação neste caso). No tempo $t=0^+$, a temperatura no lado esquerdo é reduzida para $T_0 < T_m$ e mantida constante, enquanto o lado direito mantém a temperatura T_i . Então, o líquido próximo ao lado esquerdo torna-se sólido aparecendo uma interface de mudança de fase separando as regiões sólida e líquida.

A geometria do problema a ser estudado, caracterizado por uma região semi-infinita, com uma distribuição de temperatura nas regiões sólida e líquida (Rupert et al., 1991), é apresentada na Fig. 1, onde é mostrada a temperatura T em função da coordenada x , sendo $s(t)$ a posição da interface.

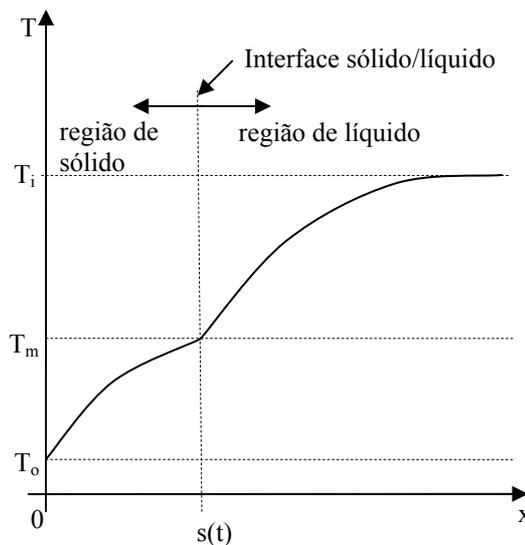


Figura 1. Geometria da região semi-infinita em mudança de fase

As seguintes hipóteses foram adotadas para a formulação do problema: a) A variação das propriedades termofísicas de cada fase é considerada desprezível; b) Não existem fontes de calor no domínio; c) O domínio troca calor apenas pelo lado da temperatura T_0 ; d) A condução de calor é unidimensional transiente; e) Substância Pura.

O campo de temperaturas em cada uma das regiões em questão é governado pelo balanço de energia, escrito na forma (Özisik, 1980):

Região Sólida:

$$\rho_s c p_s \frac{\partial T_s(x,t)}{\partial t} = k_s \frac{\partial^2 T_s(x,t)}{\partial x^2}, 0 < x < s(t), t > 0 \quad (1a)$$

Região Líquida:

$$\rho_l c p_l \frac{\partial T_l(x,t)}{\partial t} = k_l \frac{\partial^2 T_l(x,t)}{\partial x^2}, s(t) < x < \infty, t > 0 \quad (1b)$$

Interface:

$$\rho H \frac{\partial s(t)}{\partial t} = k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} - k_l \frac{\partial T_l}{\partial x}, \quad x = s(t), \quad t > 0 \quad (1c)$$

sendo :

ρ - massa específica [kg/m ³]	x - posição [m]
c_p - calor específico [J/kg.K]	T - temperatura [°C]
k - condutividade térmica [W/m.K]	subscrito s - região de sólido
H - calor latente de fusão [J/kg.K]	subscrito l - região de líquido
$s(t)$ - posição da interface no tempo [m]	

2.1. Adimensionalização do Problema

A fim de proceder a adimensionalização das equações governantes, são definidos os seguintes grupos adimensionais:

$$\eta = \frac{x}{L}; \quad \tau = \frac{\alpha_s t}{L^2}; \quad S(\tau) = \frac{s(t)}{L}; \quad \theta_s^*(\eta, \tau) = \frac{T_s(x, t) - T_m}{T_0 - T_m} \quad (2a, b, c, d)$$

$$\theta_l^*(\eta, \tau) = \frac{T_m - T_l(x, t)}{T_m - T_i}; \quad \alpha_s = \frac{k_s}{\rho_s \cdot c p_s}; \quad \alpha_l = \frac{k_l}{\rho_l \cdot c p_l} \quad (2e, f, g)$$

$$W^* = \frac{\alpha_l}{\alpha_s}; \quad Ste = \frac{c p_s (T_m - T_0)}{H} \text{ (Número de Stefan)}; \quad k^* = \frac{k_l}{k_s}; \quad \Delta T^* = \frac{T_i - T_m}{T_m - T_0} \quad (2h, i, j, k)$$

As equações da difusão de calor adimensionalizadas das fases sólida, líquida e interface tornam-se, respectivamente:

$$\frac{\partial \theta_s^*(\eta, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta_s^*(\eta, \tau)}{\partial \eta^2}, \quad 0 < \eta < S(\tau), \quad \tau > 0 \quad (3a)$$

$$\frac{\partial \theta_l^*(\eta, \tau)}{\partial \tau} = W^* \frac{\partial^2 \theta_l^*(\eta, \tau)}{\partial \eta^2}, \quad S(\tau) < \eta < 1, \quad \tau > 0 \quad (3b)$$

$$\frac{1}{Ste} \cdot \frac{\partial S(\tau)}{\partial \tau} = - \frac{\partial \theta_s^*(\eta, \tau)}{\partial \eta} - k^* \cdot \Delta T^* \cdot \frac{\partial \theta_l^*(\eta, \tau)}{\partial \eta}, \quad \eta = S(\tau), \quad \tau > 0 \quad (3c)$$

Da mesma forma, as condições de contorno adimensionalizadas para as fases sólida e líquida são, respectivamente:

$$\theta_s^*(0, \tau) = 1, \quad \eta = 0; \quad \theta_s^*(S(\tau), \tau) = 0, \quad \eta = S(\tau) \quad (4a, b)$$

$$\theta_l^*(S(\tau), \tau) = 0, \quad \eta = S(\tau); \quad \theta_l^*(1, \tau) = 1, \quad \eta = 1 \quad (4c, d)$$

2.2. Condições Iniciais

Foram definidas três condições iniciais diferentes para o desenvolvimento deste trabalho, descritas a seguir, embora os desenvolvimentos sejam realizados apenas para a condição inicial 1, por uma questão de síntese. Os detalhes sobre as demais condições iniciais poderão ser obtidos em Schneider (2005).

2.2.1. Condição Inicial 1

Na Condição Inicial 1, há uma transição abrupta (função degrau) entre a temperatura da fase sólida, T_0 , e a temperatura da fase líquida, T_i , simulando, então, uma fina “casca” sólida já no início do processo de solidificação em $t=t_0$. A necessidade desse procedimento decorre do fato de, no instante inicial, $s(t_0)$ não poder ser igual a zero nas equações governantes, conforme Fig. 3a. Nas Figs. 3a,b e 4, os croquis estão desenhados com as variáveis dimensionais apenas de forma a facilitar o entendimento.

Nessa condição inicial as fases sólida e líquida adimensionalizadas, estão definidas como:

$$\theta_s^*(\eta, \tau_0) = 1, \quad 0 < \eta < S(\tau_0) \quad (5a)$$

$$\theta_l^*(\eta, \tau_0) = 1, \quad S(\tau_0) < \eta < 1 \quad (5b)$$

2.2.2. Condição Inicial 2

Na Condição Inicial 2, foi definido um perfil de temperatura linear, de inclinação m_s , na região de interface entre as duas fases, consistindo de uma fina casca sólida, porém com um perfil de temperatura linear mais realístico, embora ainda artificial, conforme Fig. 3b. Assim, as temperaturas das fases sólida e líquida adimensionalizadas são definidas como nas Eqs. (6a-c) e (7).

$$\theta_s^*(\eta, \tau) = 1 - \frac{\eta}{S(\tau_0)}, \quad 0 < \eta < S(\tau_0) \quad (6a)$$

$$\theta_l^*(\eta, \tau) = 1 + \frac{l}{\Delta T^*} \cdot \frac{\eta - \eta_0}{S(\tau_0)}, \quad S(\tau_0) < \eta < \eta_0 \quad (6b)$$

$$\theta_l^*(\eta, \tau) = 1, \quad \text{para } \eta_0 < \eta < l, \quad (6c)$$

$$\text{sendo, } \eta_0 = S(\tau_0)(1 + \Delta T^*) \quad (7)$$

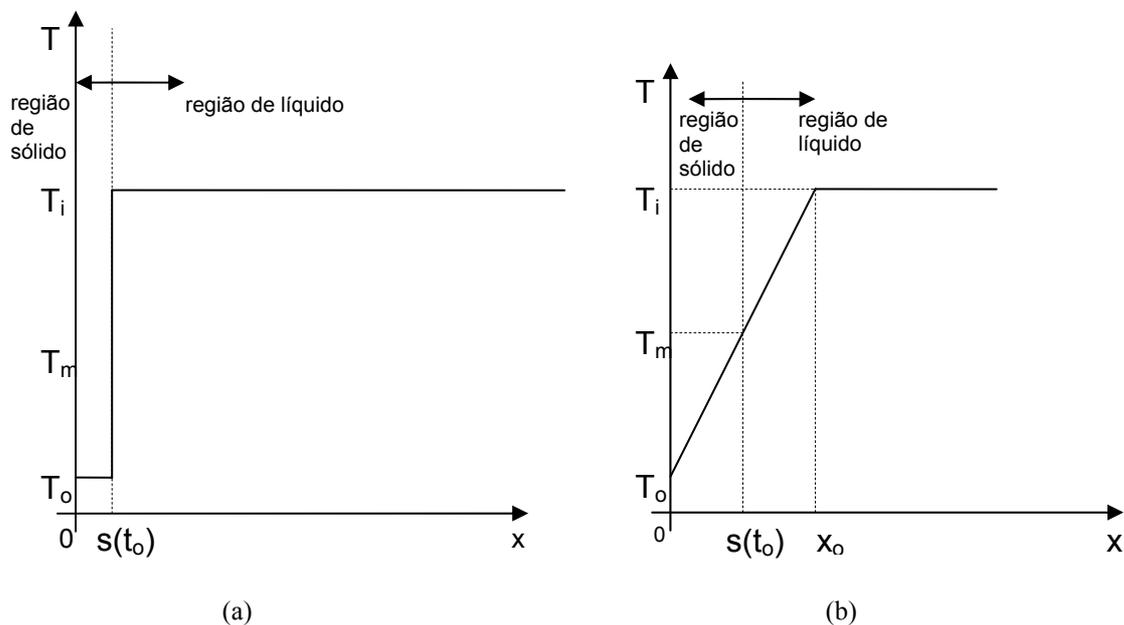


Figura 3. Croquis das condições iniciais para uma região semi-infinita em processo de solidificação: a) Condição Inicial 1 (função degrau); b) Condição Inicial 2 (perfil linear)

2.2.3. Condição Inicial 3

Na Condição Inicial 3, a região de interface está caracterizada por uma curva definida segundo a própria solução de Neumann para o problema, conforme Fig. 4.

Nessa condição inicial as temperaturas das fases sólida e líquida (Özsisik, 1980) adimensionalizadas são definidas, respectivamente, como:

$$\theta_s^*(\eta, \tau) = 1 + A \cdot \text{erf} \left[\frac{\eta}{2\sqrt{\tau}} \right] \quad (8a)$$

$$\theta_l^*(\eta, \tau) = 1 + B \cdot \text{erfc} \left[\frac{\eta}{2} \sqrt{\frac{W^*}{\tau}} \right] \quad (8b)$$

e a posição da interface é definida pela equação transcendental definida pela Eq. (8c)

$$1 + A \cdot \text{erf} \left[\frac{S(\tau)}{2\sqrt{\tau}} \right] = 1 + B \cdot \text{erfc} \left[\frac{S(\tau)}{2} \sqrt{\frac{W^*}{\tau}} \right] \quad (8c)$$

onde:

$$A = \frac{-1}{\operatorname{erf}[\lambda]}; \quad B = \frac{-1}{\operatorname{erfc}[\lambda\sqrt{W^*}]}; \quad \lambda = \frac{S(\tau)}{2\sqrt{\tau}} \quad (9a,b,c)$$

sendo λ um parâmetro na equação da posição da interface.

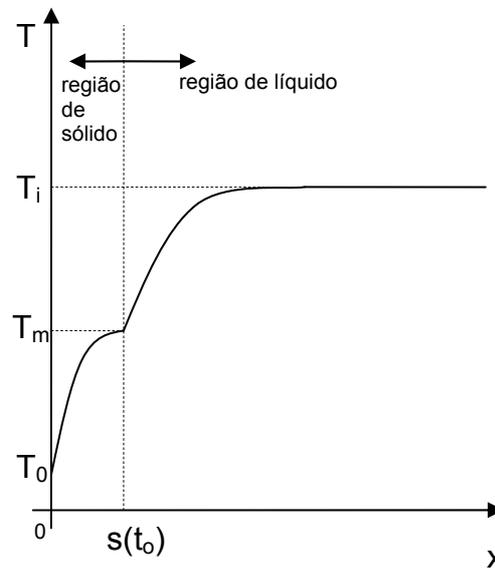


Figura 4. Croquis da Condição Inicial 3 (solução de Neumann, para uma região semi-infinita em processo de solidificação)

3. Aplicação de Filtros

Visando a aplicação da Técnica da Transformada Integral Generalizada ao sistema diferencial composto pelas Eqs. (1-9), é fundamental a seleção de um conjunto de autofunções e autovalores que seja representativo para esse sistema, porém retendo a maior quantidade possível de informações das equações e condições de contorno além de manter a natureza analítica da solução.

Para se aproveitar a facilidade de solução analítica de um problema de autovalor representativo, faz-se necessário aplicar o processo conhecido como filtragem ao sistema diferencial, obtendo-se um sistema com condições de contorno homogêneas, cujo problema de autovalor associado tenha solução analítica conhecida.

A fim de obter temperaturas homogêneas nos contornos são aplicados filtros homogenizadores para o sistema de equações adimensionalizadas tal como definido nas Eqs. (10a,b)

$$\theta_s^*(\eta, \tau) = F_s(\eta; \tau) + \theta_s(\eta, \tau) \quad (10a)$$

$$\theta_l^*(\eta, \tau) = F_l(\eta; \tau) + \theta_l(\eta, \tau), \quad (10b)$$

onde:

$F_s(\eta; \tau)$ = Filtro Homogenizador da fase sólida

$F_l(\eta; \tau)$ = Filtro Homogenizador da fase líquida

$\theta_s(\eta, \tau)$ = Temperatura Homogênea

$\theta_l(\eta, \tau)$ = Temperatura Homogênea

Para as funções homogenizadoras, são propostas as Eqs (11a,b) como filtro para fase sólida e líquida, respectivamente.

$$F_s(\eta; \tau) = \frac{S(\tau) - \eta}{S(\tau)} \quad (11a)$$

$$F_l(\eta; \tau) = \frac{\eta - S(\tau)}{1 - S(\tau)} \quad (11b)$$

Obtendo-se, então, a partir das Eqs. (3a-c), as equações homogenizadas adimensionais para as fases sólida e líquida e interface tal como as Eqs. (12a-c), respectivamente.

$$\frac{\partial}{\partial \tau} [\theta_s(\eta, \tau)] = \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} [\theta_s(\eta, \tau)] - \frac{\partial}{\partial \tau} [F_s(\eta; \tau)] \quad (12a)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} [\theta_l(\eta, \tau)] = \frac{\alpha_l}{\alpha_s} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} [\theta_l(\eta, \tau)] - \frac{\partial}{\partial \tau} [F_l(\eta; \tau)] \quad (12b)$$

$$\frac{1}{Ste} \cdot \frac{\partial S(\tau)}{\partial \tau} = - \frac{\partial}{\partial \eta} [\theta_s(\eta, \tau)] - k^* \cdot \Delta T^* \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} [\theta_l(\eta, \tau)] - \left[\frac{\partial}{\partial \eta} [F_s(\eta; \tau)] + k^* \cdot \Delta T^* \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} [F_l(\eta; \tau)] \right] \quad (12c)$$

A filtragem (homogeneização) as condições de contorno adimensionais, Eqs. (4a-d), resulta nos seguintes limites para as fases sólida e líquida, Eqs. (13a-d), respectivamente.

$$\theta_s(0, \tau) = 0; \quad \theta_s(S(\tau), \tau) = 0 \quad (13a,b)$$

$$\theta_l(S(\tau), \tau) = 0; \quad \theta_l(1, \tau) = 0 \quad (13c,d)$$

A filtragem (homogeneização) das condições iniciais adimensionais é mostrada para o caso da Condição Inicial 1 por uma questão de síntese, conforme Eq. (14a,b) e cujo processo se repete para as condições iniciais 2 e 3.

$$\theta_s(\eta, 0) = 0, \text{ com } \eta \rightarrow 0 \quad (14a)$$

$$\theta_l(\eta, 0) = 1 - \eta, \text{ com } \eta \neq 0 \quad (14b)$$

4. Solução via Transformação Integral

A Técnica de Transformada Integral Generalizada - GITT é um método híbrido numérico-analítico que tem sido desenvolvido como uma alternativa aos métodos puramente numéricos na solução de problemas convectivo-difusivos não-lineares, tal como apresentado em Özisik (1980), Mikhailov et al. (1984), Özisik et al. (1974), Cotta (1993), Cotta, (1992), Cotta (1994), Mikhailov et al (1993) e Cotta et al. (1990).

A idéia básica da técnica generalizada é relaxar a necessidade de encontrar-se uma transformação integral exata, como na técnica clássica, que resulte em um sistema diferencial transformado em forma desacoplada. Assim, pode-se escolher um problema auxiliar de autovalor que seja característico do problema original, desenvolver o par Transformada-Inversa associado e efetuar a transformação integral, chegando-se a um sistema diferencial ordinário infinito e acoplado. Basicamente, a aplicação do método de Transformação Integral do problema diferencial parcial não linear consiste em integrar-se as equações diferenciais parciais originais em uma das direções coordenadas para obter-se um sistema diferencial ordinário na outra direção, podendo ser resolvido numericamente através de sub-rotinas disponíveis em bibliotecas matemáticas bem estabelecidas (IMSL Library, 1989). Tal transformação é possível ao se expressar a temperatura adimensional como uma expansão em autofunções, as quais são obtidas a partir da separação de variáveis de um problema homogêneo associado, com a finalidade de explorar suas propriedades de ortogonalidade (Cotta, 1998).

Assim, aplicando os passos da GITT ao sistema diferencial parcial definido pelas Eqs. (12), encontra-se o sistema diferencial ordinário acoplado definido nas Eqs (15), onde a convergência das expansões das séries baseia-se na ordem de truncamento para N_s autovalores do campo de temperatura transformado $\bar{\theta}_{S_i}(\tau)$ da fase sólida e N_L autovalores para o campo transformado $\bar{\theta}_{L_i}(\tau)$ da fase líquida.

$$\frac{d}{d\tau} [\bar{\theta}_{S_i}(\tau)] = - \sum_{j=1}^{N_s} \{ \bar{\theta}_{S_j}(\tau) \cdot A_{Sij} \} - \bar{\theta}_{S_i}(\tau) \cdot \mu_i^2(\tau) + \bar{G}_{S_i}(\tau) \quad (15a)$$

$$\frac{d}{d\tau} [\bar{\theta}_{L_i}(\tau)] = - \sum_{j=1}^{N_L} \{ \bar{\theta}_{L_j}(\tau) \cdot A_{Lij} \} - W^{*2} \bar{\theta}_{L_i}(\tau) \cdot \beta_i^2(\tau) + \bar{G}_{L_i}(\tau) \quad (15b)$$

$$\frac{dS(\tau)}{d\tau} = -Ste \left\{ \sum_{i=1}^{N_s} \left[\bar{\theta}_{S_i}(\tau) \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} |\psi_{S_i}(\eta, \tau)|_{S(\tau)} + k^* \cdot \Delta T^* \cdot \bar{\theta}_{L_i}(\tau) \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} |\psi_{L_i}(\eta, \tau)|_{S(\tau)} \right] + G_I \right\} \quad (15c)$$

Da mesma forma, faz-se as transformações integrais para as três condições iniciais, exemplificado pela Condição Inicial 1, Eq. (14a,b), que se transforma integralmente conforme Eqs. (16a,b).

$$\bar{\theta}_{S_i}(0) = 0 \quad (16a)$$

$$\bar{\theta}_{Li}(\tau) = \frac{1}{N_{Si}(\tau)} \int_{S(\tau)}^1 \psi_{Li}(\eta, \tau) \cdot (1-\eta) d\eta, \quad (16b)$$

A partir dos campos transformados $\bar{\theta}_{Si}(\tau)$ e $\bar{\theta}_{Li}(\tau)$, obtidos pela solução do sistema definido pelas Eqs. (15-16), obtém-se o campo original de temperaturas adimensionalizadas e filtradas, valendo-se da fórmula de inversa, tal como definido na Eqs (17a,b) para a fase sólida e líquida, respectivamente.

$$\theta_S(\eta, \tau) = \sum_{i=1}^{N_s} \psi_{Si}(\eta, \tau) \cdot \bar{\theta}_{Si}(\tau), \text{ fórmula de inversa para fase sólida} \quad (17a)$$

$$\theta_L(\eta, \tau) = \sum_{i=1}^{N_l} \psi_{Li}(\eta, \tau) \cdot \bar{\theta}_{Li}(\tau), \text{ fórmula de inversa para fase líquida} \quad (17b)$$

Esse processo de transformação integral do sistema diferencial parcial original para um sistema diferencial ordinário e sua posterior solução é repetido da mesma forma para as condições iniciais 2 e 3 e os resultados e comparações são discutidas na seqüência.

5. Resultados e Discussão

São mostrados os campos de temperaturas obtidos pela solução do sistema de equações diferenciais governantes do processo de solidificação, dada pelas Eqs. (15-16) após o processo de inversão dado pelas Eqs. (17a,b), comparando-se os resultados de diversas simulações variando-se o tipo de condição inicial e o número de Stefan, que assumiu os seguintes valores: $Ste = 0.01, 0.02, 0.1$ e 0.2 .

Também se compara o resultado obtido com a solução clássica de Neumann. Os valores obtidos pela solução de Neumann e as diferenças em relação às simulações convergidas estão mostrados nas linhas em negrito, na Tab. 1. Todas as simulações foram executadas utilizando-se os valores dados pelas Eqs. (18a-d) para os parâmetros das equações governantes.

a) Temperatura em $\eta=0$ (fase sólida) : $T_0 = 293 \text{ K } (20^\circ\text{C})$ (18a)

b) Temperatura de mudança de fase: $T_m = 303 \text{ K } (30^\circ\text{C})$ (18b)

c) Temperatura em $\eta=1$ (fase líquida): $T_i = 313 \text{ K } (40^\circ\text{C})$ (18c)

d) $W^* = 1$; $K^* = 1$ e $\Delta T^* = (T_i - T_m) / (T_m - T_0) = 1$ (18d)

Em cada caso, o domínio do espaço adimensional, η , varia de 0 (zero) a 1 (um). Este domínio foi dividido em 401 posições, sendo adotado como valor inicial da interface, $S(\tau)$, a terceira posição dessa divisão. Para efeito de comparação, escolheu-se 3 (três) pontos distintos do espaço: $\eta = 0.01$ (no início do domínio); $\eta = 0.50$ (no meio do domínio) e $\eta = 0.99$ (no final do domínio).

Da mesma forma o domínio do tempo adimensional, τ , varia de 0 (zero) a 0,1 (um décimo) em todas as simulações. Este domínio foi dividido em 401 posições, sendo adotado como valor inicial do tempo, τ_0 , a segunda posição dessa divisão. Para efeito de comparação, escolheu-se 4 (quatro) pontos distintos do tempo: $\tau = 0.0005$; $\tau = 0.0125$; $\tau = 0.0500$ e $\tau = 0.0995$.

Por outro lado, a convergência nos somatórios das Eqs (17a-c) dos sistemas diferenciais foi alcançada aumentando-se o número (N) de equações adotadas. Começou-se com $N=3$ até atingir-se a convergência com $N=21$ de modo geral. O número de equações, N , é o resultado da soma entre o número de autovalores da fase sólida (N_s), com o número de autovalores da fase líquida (N_l), acrescentando-se mais uma equação, devido à interface, ou seja: $[N=N_s+N_l+1]$, com N_s e N_l que variam, portanto, de 1 a 10.

Para cada valor de posição no espaço η , tempo τ e ordem dos autovalores N_s e N_l , calculam-se as respectivas temperaturas dimensionais, levando-se em consideração as Eqs. (10a,b) e 2(d,e).

5.1. Análise de Convergência para Condição Inicial 1

O processo de convergência é exemplificado para o caso da Condição Inicial 1 por uma questão de síntese e se repete de forma análoga para as condições iniciais 2 e 3.

Na Tab. 1 para $Ste=0.01$, observa-se que, de um modo geral, a convergência é mais rápida para tempos mais afastados da condição inicial, segundo o critério de convergência adotado, isto é, 4 (quatro) algarismos significativos convergidos com +/- 1 no quarto dígito (números em negrito na tabela). Esse critério é atingido com $N_s = N_l = 4$ na posição $\eta = 0.01$ e $\tau = 0.0995$, atingindo um valor de temperatura de $22,33^\circ\text{C}$. Observa-se que em $\eta = 0.01$ e $\tau = 0.0500$, a convergência é atingida com $N_s=N_l=6$ ($T=23,28^\circ\text{C}$). Já em tempos mais próximos da condição inicial, a

convergência só é atingida em $N_s=N_L=8$ ($T=26,36^\circ\text{C}$), com $\tau=0.0125$. A convergência é mais lenta ainda em $N_s=N_L=10$, com $\tau=0.0005$, onde $T=31,05^\circ\text{C}$, aproximadamente.

Na posição $\eta=0.50$ o comportamento é similar, isto é, o critério de convergência, em geral, é atingido mais rápido em tempos mais afastados da condição inicial. Assim, o critério de convergência já é alcançado em $\tau=0.0995$ com $N_s=N_L=6$ ($T=37,16^\circ\text{C}$). Porém, em tempos próximos da condição inicial, como em $\tau=0.0125$ tal condição só foi obtida em $N_s=N_L=8$. No tempo $\tau=0.0005$, ainda em $\eta=0.50$, o processo de convergência se mostrou oscilante e embora seja observada uma tendência de convergência, o critério não foi alcançado de fato, sendo que a temperatura calculada atingiu o valor de aproximadamente, $39,6^\circ\text{C}$. Em $\eta=0.99$, a rápida convergência do campo de temperaturas é obtida já a partir do segundo autovalor, com $N_s=N_L=2$. Nesse ponto mais afastado do domínio, via de regra, o critério de convergência é obtido mais rapidamente.

Tabela 1. Convergência da temperatura dimensional ($^\circ\text{C}$) e diferenças na convergência para Condição Inicial 1 ($Ste=0.01$)

Autovalor ($N_s=N_L$)	Temp. ($^\circ\text{C}$)	Dif. (%)						
	$\tau=0.0005$		$\tau=0.0125$		$\tau=0.0500$		$\tau=0.0995$	
$\eta=0.01$								
1	40	-	25,0150	-	22,4890	-	21,7600	-
2	30,2507	32,23%	26,2494	-4,70%	23,2540	-3,29%	22,3238	-2,53%
4	30,4511	-0,66%	26,3138	-0,24%	23,2663	-0,05%	22,3290	-0,02%
6	30,6514	-0,65%	26,3416	-0,11%	23,2752	-0,04%	22,3307	-0,01%
8	30,8514	-0,65%	26,3590	-0,07%	23,2780	-0,01%	22,3317	0,00%
10	31,0511	-0,64%	26,3664	-0,03%	23,2798	-0,01%	22,3330	-0,01%
Neumann	40,0000	-22,37%	26,6850	-1,19%	23,3190	-0,17%	22,3470	-0,06%
$\eta=0.50$								
1	40	-	39,9830	-	38,7570	-	37,1340	-
2	41,3749	-3,32%	40,6926	-1,74%	38,8204	-0,16%	37,1732	-0,11%
4	39,2087	5,52%	39,8890	2,01%	38,7564	0,17%	37,1541	0,05%
6	40,5278	-3,25%	39,9803	-0,23%	38,7599	-0,01%	37,1556	0,00%
8	39,5719	2,42%	39,9687	0,03%	38,7576	0,01%	37,1545	0,00%
10	40,3258	-1,87%	39,9725	-0,01%	38,7584	0,00%	37,1549	0,00%
Neumann	40,0000	0,81%	39,9840	-0,03%	38,7770	-0,05%	37,1600	-0,01%
$\eta=0.99$								
1	40	-	40	-	39,9810	-	39,7090	-
2	39,8996	0,25%	39,9492	0,13%	39,9919	-0,03%	39,9677	-0,65%
4	39,8998	0,00%	39,9894	-0,10%	39,9957	-0,01%	39,9681	0,00%
6	39,9002	0,00%	39,9982	-0,02%	39,9959	0,00%	39,9682	0,00%
8	39,9007	0,00%	39,9992	0,00%	39,9960	0,00%	39,9682	0,00%
10	39,9013	0,00%	39,9994	0,00%	39,9960	0,00%	39,9682	0,00%
Neumann	40,0000	-0,25%	40,0000	0,00%	39,9810	0,04%	39,7130	0,64%

Obs.: A convergência para $N_s=N_L=10$ foi atingida com tempo de processamento de 11min.

Os resultados apresentados e descritos na Tab. 1 encontram-se plotados na Fig. 5 em $\tau=0.0125$, onde o processo de convergência descrito pode ser melhor visualizado.

De maneira similar à adotada para análise de $Ste=0.01$, procede-se agora a análise das simulações realizadas com $Ste=0.02$, $Ste=0.1$ e $Ste=0.2$, de forma a se discutir o efeito do aumento desse parâmetro no campo de temperaturas e nas taxas de convergência. A influência no avanço da interface será discutida posteriormente, comparando-se todos os valores de Stefan utilizados.

Com o aumento do número de Stefan, o processo de mudança de fase torna-se mais rápido, levando então a gradientes de temperaturas mais acentuados, o que pode ser verificado comparando-se os valores convergidos de temperatura nas mesmas posições e tempos, porém variando o número de Stefan apenas, tal como apresentado na Tab. 2, onde os valores de temperatura são mostrados arredondados, segundo o critério adotado de 4 (quatro) algarismos significativos de convergência.

5.1. Comparações entre as Condições Iniciais 1, 2 e 3

Outra forma de se apresentar os resultados é plotando-se os perfis de temperaturas convergidas para cada tipo de condição inicial, mantendo-se o número de Stefan, tal como visualizado nas Figs. 6-9. Nessas figuras nota-se perfeitamente o distanciamento, já comentado, entre as soluções obtidas com as condições iniciais tipos 1 e 2 e aquela obtida com a Condição Inicial 3, em todos os números de Stefan analisados.

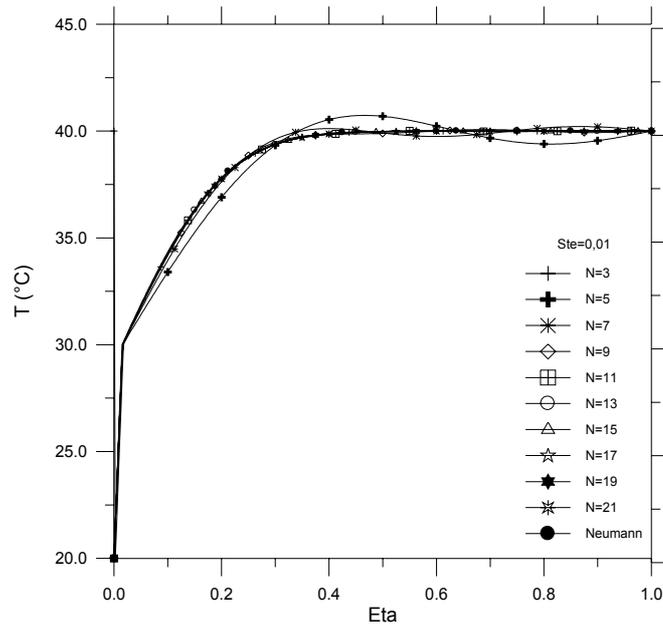


Figura 5. Gráfico de convergência da temperatura dimensional, T (°C), para Condição Inicial 1 com $Ste=0.01$ e $\tau=0.0125$

Tabela 2. Temperaturas convergidas (°C) para Condição Inicial 1 em função do Número de Stefan

Posição η	Tempo τ			
	$\tau=0.0005$	$\tau=0.0125$	$\tau=0.05$	$\tau=0.0995$
Ste = 0.01				
$\eta=0.01$	31,05	26,37	23,28	22,33
$\eta=0.5$	40,33	39,97	38,76	37,15
$\eta=0.99$	39,90	40,00	40,00	39,97
Ste = 0.02				
$\eta=0.01$	31,05	24,70	22,38	21,69
$\eta=0.5$	40,33	39,97	38,72	37,06
$\eta=0.99$	39,90	40,00	40,00	39,97
Ste = 0.1				
$\eta=0.01$	31,05	22,37	21,19	20,84
$\eta=0.5$	40,33	39,97	38,55	36,67
$\eta=0.99$	39,90	40,00	38,55	36,67
Ste = 0.2				
$\eta=0.01$	31,05	21,40	20,92	20,65
$\eta=0.5$	40,33	39,97	38,43	36,39
$\eta=0.99$	39,90	40,00	39,99	39,96

Ao se plotar o avanço da posição da interface em relação ao tempo, tal como mostrado na Fig. 9a, não é observada diferença significativa entre os avanços, pelo menos em nível gráfico, qualquer que seja a condição inicial, quando $Ste=0.01$. Porém, uma diferença maior começa ser visualizada no avanço em $Ste=0.2$ (Fig. 9b), quando é considerada a Condição Inicial 3.

A análise do avanço da interface com a variação do número de Stefan pode ser entendida, também, através dos perfis de temperatura das Figs. 9a-c, para cada tipo de condição inicial estudada. Nessas figuras, para o tempo mantido em $\tau=0,05$, foram plotadas as temperaturas obtidas nas simulações com os números de Stefan já utilizados e pode-se observar o comportamento do avanço da interface conforme já descrito anteriormente.

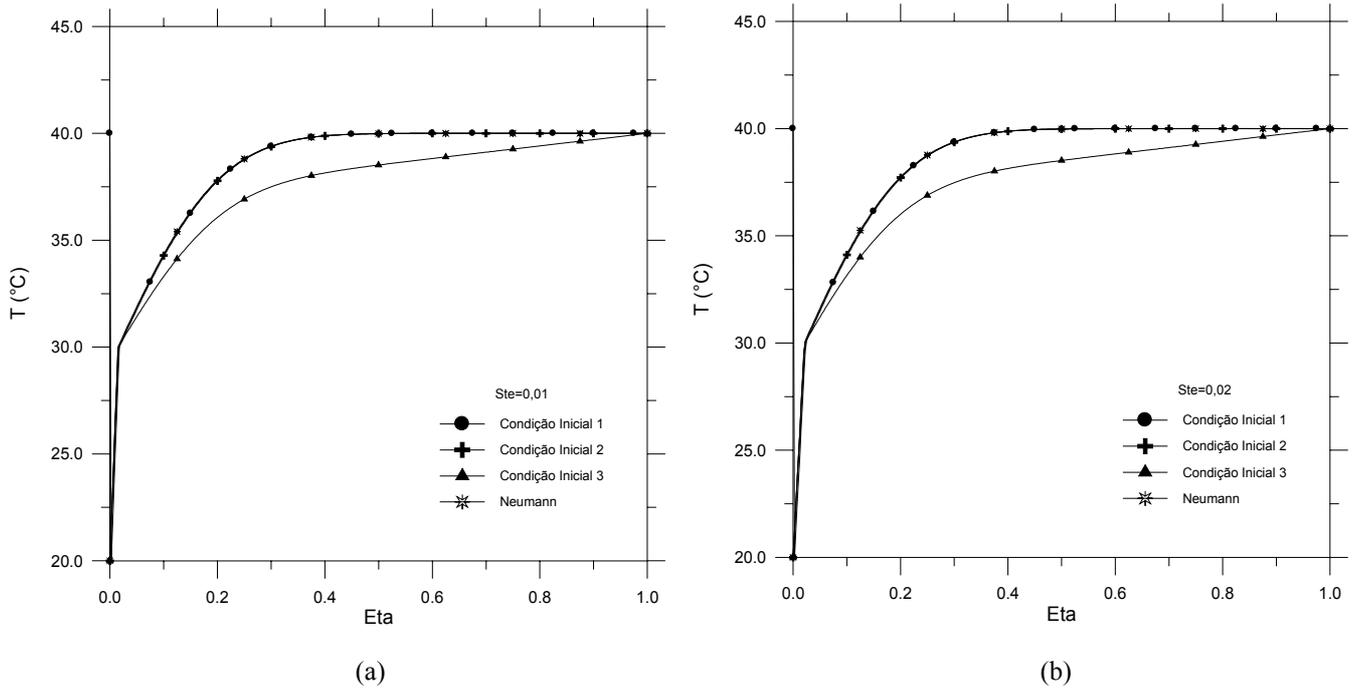


Figura 6. a) Perfil de temperatura dimensional convergida, T ($^{\circ}\text{C}$), em cada condição inicial para $Ste=0.01$ e $\tau=0.0125$; b) Perfil de temperatura dimensional convergida, T ($^{\circ}\text{C}$), em cada condição inicial para $Ste=0.02$ e $\tau=0.0125$

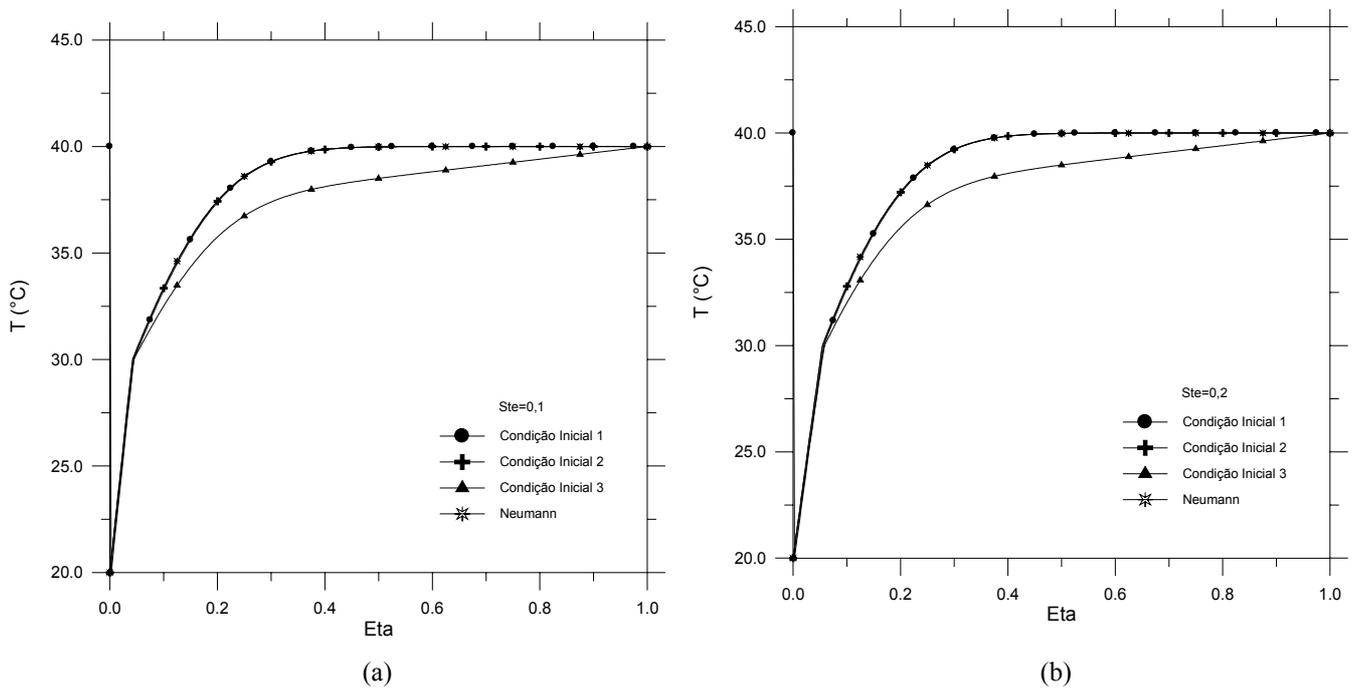
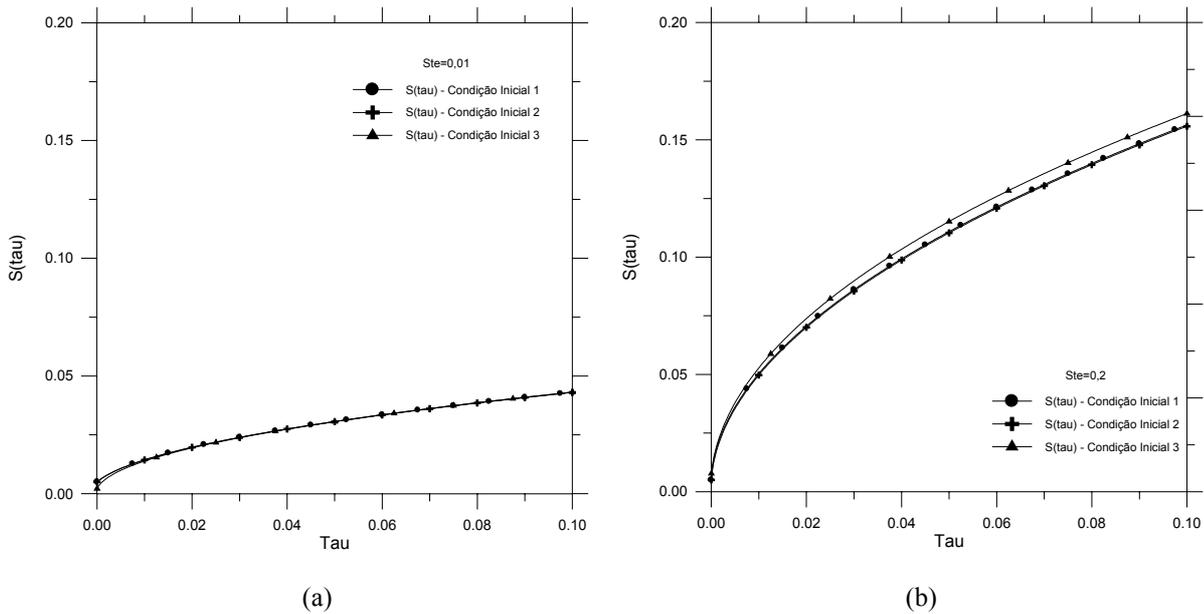


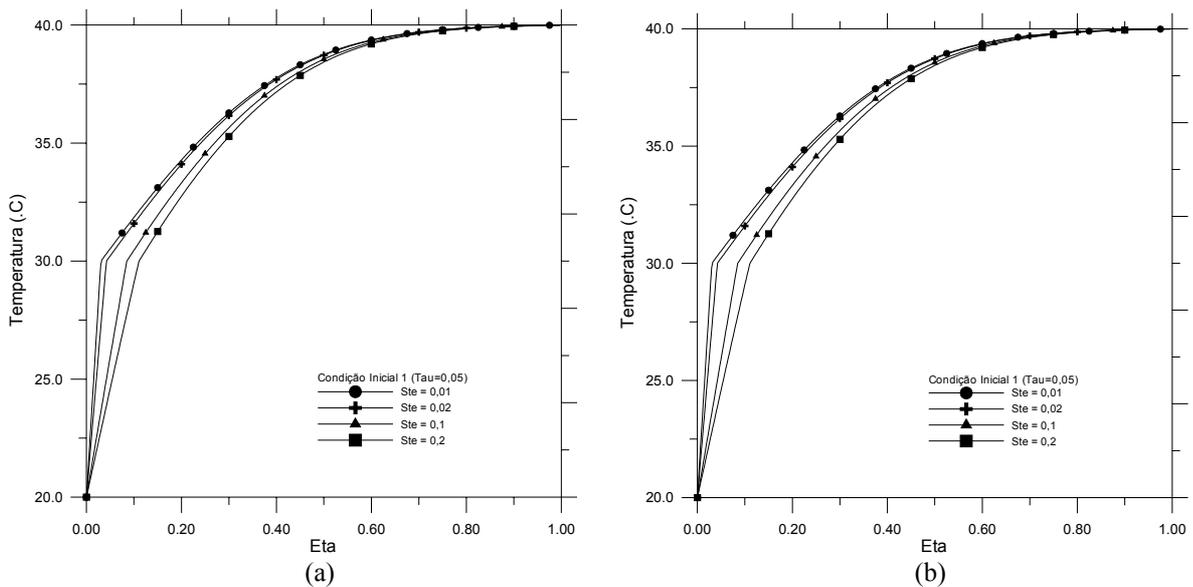
Figura 7 a) Perfil de temperatura dimensional convergida, T ($^{\circ}\text{C}$), em cada condição inicial para $Ste=0.1$ e $\tau=0.012$; b) Perfil de temperatura dimensional convergida, T ($^{\circ}\text{C}$), em cada condição inicial para $Ste=0.2$ e $\tau=0.0125$

6. Conclusões

No presente trabalho, foi obtida uma solução para um problema de solidificação de Stefan, utilizando a Técnica de Transformada Integral Generalizada. Também foi apresentada uma análise detalhada do processo de convergência, com o critério de convergência sendo efetivamente atingido na maioria dos casos.



(a) Posição da interface, $S(\tau)$, em cada condição inicial para $Ste=0.01$;
 (b) Posição da interface, $S(\tau)$, em cada condição inicial para $Ste=0.2$



(a) Temperatura Dimensional ($^{\circ}C$), na Condição Inicial 1 e tempo $\tau=0,05$;
 (b) Temperatura Dimensional ($^{\circ}C$), na Condição Inicial 2 e tempo $\tau=0,05$

Foi realizada uma comparação crítica com a aplicação da solução clássica de Neumann para o mesmo problema.

Foram estudados e comparados os efeitos na solução final, pela adoção de três condições iniciais distintas. Ao que tudo indica, a escolha da Condição Inicial 3 para a solução do problema de Stefan pode acarretar diferenças significativas na solução numérica em relação à solução analítica, diferença essa que pode ser reduzida pela utilização de outras condições iniciais (como as condições do tipo 1 ou 2). Essa análise não foi levada em consideração por Rupert et al. (1998) no texto de seu artigo, embora os resultados tenham se mostrados satisfatórios para a aplicação apresentada.

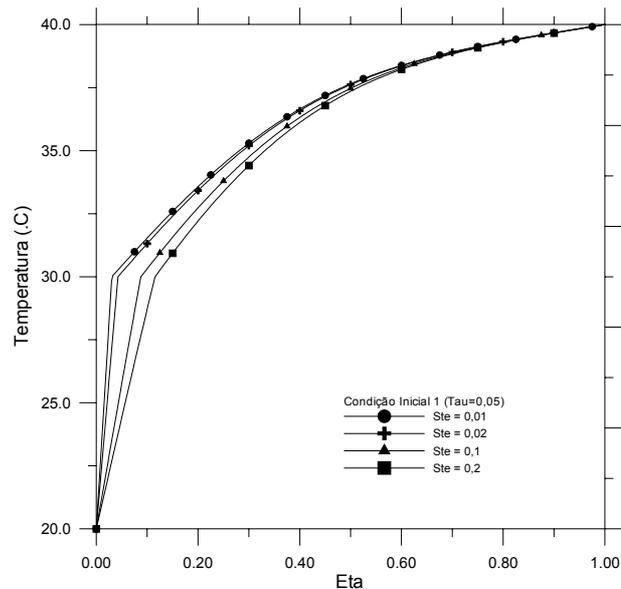


Figura 9– c) Temperatura Dimensional ($^{\circ}\text{C}$), na Condição Inicial 3 e tempo $\tau=0,05$

7. Referências

- Budhia, H. e Kreith, F., 1973, "Heat Transfer with melting or freezing in a wedge". J. Heat Mass Transfer, Grã Bretanha, vol. 16, pp. 195-211.
- Cho, S.H. e Sunderland, J.E., 1969, "Heat-Conduction problems with melting or freezing". J. Heat Trans, ASME, vol. 91, pp. 421-426.
- Cotta, R. M., 1992, "Computational Integral Transform Approach in Nonlinear Diffusion and Convection-Diffusion Problems", Laboratório di Ingegneria Nucleare di Montecuccolino, Serie Scientifica LIN-1202 (Invited Lecture), Università degli Studi di Bologna, Italy.
- _____, 1993, "Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow", CRC Press, Boca Raton.
- _____, 1994, "Benchmark Results in Computational Heat and Fluid Flow: The Integral Transform Method", Int. J. Heat Mass Transfer (Invited Paper), 37, Suppl. 1, pp. 381-393.
- _____, 1994, "Simulation and Benchmarks in Thermal-Fluids Sciences: - The Integral Transform Approach", Proc. of the 3rd North-Northeastern Congress of Mechanical Engineering, Belém, Brasil, 1, pp. 9-27.
- _____, 1994, "A Review of the Integral Transform Method in Nonlinear Heat and Fluid Problems", Proc. of the 1st Iberoamerican Congress of Mechanical Engineering (Invited Lecture), Madrid, Spain, 1, pp. 35-64.
- _____, 1998, "The Integral Transform Method in Thermal & Fluids Sciences & Engineering". Begell House Inc., New York.
- Cotta, R. M. e Mikhailov, M.D., 1990, "The Integral Transform Method". J. Braz. Assoc. Mech. Sciences, RBCM (Invited Paper), 12, pp. 301-310.
- _____, 1997, Heat Conduction: Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation, Wiley, New York.
- Crank, J., 1984, "Free and moving boundary problems". Oxford: Clarendon Press.
- Diniz, A. J.; Maia, C.R. e Zapparoli, E.L., 1996, "Solução analítica para problemas de transferência de calor com mudança de fase em geometria axi-simétrica". In: ENCIT – Encontro Nacional de Ciências Térmicas, Florianópolis-SC.
- Fukusako, S. e Seki, N., 1987, "Fundamental aspects of analytical and numerical methods on freezing and melting heat-transfer problems". In: Chawla TC editor. Annual Review of Numerical Fluid Mechanics and Heat Transfer, Washington DC: Hemisphere. pp.351-402.
- Gear, C.W., 1971, "Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations", New Jersey: Prentice-Hall.
- ISML Library, 1989, Mathematical/Library, Houston, TX.
- Luikov, A. V., 1973, "Heat and Mass Transfer", Mir Publishers, Moscow.
- Marco, F.C.G.; Silva, J.B.C. e Diniz, A.J., 1999, "Transferência de calor com mudança de fase em geometria axi-simétrica de sólidos finitos". In: COBEM – Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, 15, Águas de Lindóia-SP.
- Mikhailov, M.D. e Özisik, M. N., 1984, "Unified analysis and solutions of heat and mass diffusion". New York: John Wiley & Sons.
- Mikhailov, M.D. e Cotta, R. M. "Unified Integral Transform Method". Appl. Math. Modelling, 17, pp. 156-161, 1993.

- Özisik, M. N.; Murray, R. L., 1980, "On the solution of linear diffusion problems with variable boundary condition parameters", *J. Heat Transfer*. v. 96, p. 48-51, 1974, M. N. Heat conduction. New York: Wiley-Interscience.
- Özisik, M. N., 1980, "Heat conduction". New York: Wiley-Interscience.
- _____, 1980, "Boundary value problems of heat conduction", Scranton, Penn: International Tex book.
- Rao, P. e Sastri, V.M.K., 1984, "Efficient numerical method for two-dimensional phase change problems", *J. Heat Mass Transfer*, vol. 27, pp. 2077-2084.
- Rathjen, K.A. e Jiji, L.M., 1971, "Heat conduction with melting or freezing in a corner". *J. Heat Trans, ASME*, vol. 93, pp. 101-109.
- Rupert Jr., N. J.; Cotta, R. M., 1991, "Heat conduction with ablation in multilayered media". In: COBEM – Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, 11., São Paulo.
- Rupert Jr., N. J.; Gobin, D. e Cotta, R. M., 1998, "Co validation of integral transform and finite volume solutions in phase-change problems". In: ENCIT – Encontro Nacional de Ciências Térmicas, Rio de Janeiro: ABCM, pp. 659-664.
- Schneider, E., 2005, "Estudo da Influência da Condição Inicial no Problema de Stefan com Solução Via Técnica de Transformada Integral Generalizada", Vitória, 91p. Tese de Mestrado - Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Espírito Santo.
- Stefan, J., 1891, "On the theory of ice formation, especially on ice formation in polar seas", *Ann. Phys. Chem.*, vol. 42, pp. 269-286, 1891.
- Tamma, K.K. e Namburu, R.R., 1990, "Recent advances, trends and new perspectives via enthalpy-based finite element formulations for applications to solidification problems", *J. Numer. Methods Engrg.*, vol. 30, pp. 903-920.
- Tewkesbury, H.; Stapley, A.G.F e Fryer, P.J. , 2000, "Modeling temperature distributions in cooling chocolate moulds", *J. Chemical Engineering Science*, vol. 50, pp. 3123-3132.
- Tien, R.H. e Geiger, G.E., 1967, "A heat-transfer analysis of solidification of a binary eutectic system". *J. Heat Trans, ASME*, vol. 89, pp. 230-234.

COMPARATIVE STUDY OF THE INFLUENCE OF INITIAL CONDITIONS IN THE PROBLEM OF STEFAN WITH SOLUTION VIA GENERALIZED INTEGRAL TRANSFORM TECHNIQUE

Rogério Ramos

Departamento de Engenharia Mecânica – UFES – Av. Fernando Ferrari, 514 – Goiabeiras – 29.075-910 – Vitória/ES, Brazil
ramosrogerio@hotmail.com

Edgar Schneider

Petróleo Brasileiro S.A. – Av. Nossa Senhora da Penha, 714 – sala 1101 – Praia do Canto – 29.055-918 – VitóriaES, Brazil
edgarschneider@petrobras.com.br

Abstract

The processes related to the solidification (or fusion) are important in many areas of engineering and have been object of numerous studies whose applications are extended to the problems such as the food freezing, ice production, welding, casting of metallic leagues, preservation of human blood, storage of energy and many others. In these problems, the interface that separates the involved phases moves in accordance with the absorption or release of latent heat.

The problems of phase change are nonlinear due to presence of an interface in movement, whose position has to be determined as part of the solution. On the other hand, the one-dimensional case of problem of phase change is particularly well adjusted for the co variation of methods, since in this situation it has available solutions of reference. The called solution of Neumann for the problem of Stefan is an analytical expression of easy computational implementation, that can be used to test the exactness of alternative procedures, that later could be used in the solution of more complex problems.

The objective of the present work is to evaluate the influence of the choice among distinct types of initial conditions for the attainment of the temperature profiles of the solidification process. Three different initial conditions are analyzed and compared to the Neumann solution using the Technique of the General Integral Transform Technique - GITT.

Keywords: phase change, solidification, Stefan problem, integral transforms