

## ANÁLISE NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE FRONTEIRA MÓVEL

Daniel Henrique Ortega Buani<sup>1\*</sup>, Marcelo Kaminski Lenzi<sup>1</sup>

1 - Universidade Federal do Paraná - UFPR - PR, daniel.buani@ufpr.br

### Abstract

The numerical analysis is a branch of mathematics responsible for studying and developing capable methods of providing numerical solutions to problems on which analytical solutions are not possible or desirable. Therefore, a kind of problems that fits in this described situation is named as moving boundary problems and it consists of movement of a solid-liquid interface during a phase change phenomena, more specifically melting/solidification. Due to non-linearity of these problems, analytical solutions are hardly ever obtained and, hence, it becomes more favorable to apply numerical methods for generating results, even if approximated. Thus, the aim of this paper is to implement the finite difference method for solving a specific study case and compare its results to other ones presented by analytical approaches.

*Keywords: Moving boundary, finite difference method, numerical analysis, Stefan problems.*

### Introdução

Um fenômeno físico bastante presente em uma grande variedade de segmentos industriais é o da mudança de fase, principalmente envolvendo a transição entre sólido-líquido, isto é, solidificação e a fusão. Exemplos de tal importância podem ser encontrados na produção de ligas metálicas, conservação de alimentos a partir de seu congelamento, bem como na preservação de materiais médicos e biomédicos [1]. Devido à grande importância econômica destes e muitos outros processos fundamentados no mesmo princípio físico de mudança de fase, foi conduzida uma quantidade razoável de pesquisas acerca de seus efeitos, bem como sobre modelos físicos capazes de descrever tais sistemas [2].

Outra denominação associada a situações dessa natureza, nas quais ocorre fusão ou solidificação a partir de uma condição de transferência de calor transiente, corresponde aos problemas de fronteira móvel. Tal designação é oriunda da modelagem física destes, a qual considera o movimento de uma interface entre as fases sólida e líquida, conforme o calor latente é absorvido ou liberado nessa mesma região delimitadora. A modelagem matemática, por sua vez, parte da equação do calor em regime transiente e sem geração de energia, com três condições de contorno, das quais uma é não linear, caracterizando o problema como uma equação diferencial parcial não linear [3]. A grande consequência proveniente da não linearidade de tais problemas é, além da dificuldade de obtenção de soluções exatas, a impossibilidade de aplicação do princípio da superposição, implicando na singularidade de cada caso [4]. Com isso, torna-se interessante o emprego, ou mesmo o desenvolvimento, de métodos numéricos a partir dos quais seja possível obter soluções mais abrangentes e de maneira menos complexa para essa classe de problemas. Neste contexto, inúmeros métodos matemáticos clássicos podem ser empregados na resolução de tais problemas, sendo uma das técnicas mais comuns o método das diferenças finitas, fato que motivou a escolha desta para realização dos cálculos numéricos.

Assim sendo, este trabalho objetiva a realização de uma análise numérica dos problemas de fronteira móvel, sob condições de condução de calor unidimensional em uma região

semi-infinita, a partir do emprego do método das diferenças finitas. Com os resultados obtidos pela aplicação do método numérico, deseja-se compará-los com os alcançados pelos métodos aproximados e exato, com a finalidade de atestar sua precisão, bem como sua eficácia.

## Experimental

Nesta seção, serão apresentados três métodos resolução de problemas de fronteira móvel, dentre os quais dois caracterizam-se como analíticos e o outro restante como numérico. Assim sendo, os métodos analíticos a serem abordados consistem no clássico método integral introduzido por Goodman [5] e em uma adaptação deste proposta pelo autor, denominado método fracionário. Por outro lado, a técnica numérica a ser discutida fundamenta-se em uma modificação do método das diferenças com formulação implícita e passo no tempo variável (MVTTS), a qual foi proposta por Gupta e Kumar [6]. Para este caso, foram realizadas simulações computacionais com auxílio do *software* MATLAB, homônimo de sua linguagem de programação, através do qual foram criadas rotinas e sub-rotinas capazes de discretizar as equações governantes do problema, bem como executar os cálculos numericamente.

### Equações Governantes

A modelagem matemática do problema, conforme já abordado previamente, constitui-se na equação do calor unidimensional em regime transiente, podendo ser representada pelas equações (1-4).

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad \text{em} \quad 0 \leq x \leq S(t), t > 0 \quad (1)$$

$$T = T_0 \quad \text{em} \quad x = 0, t > 0 \quad (2)$$

$$T = T_m \quad \text{em} \quad x = S(t), t > 0 \quad (3)$$

$$-k \frac{\partial T}{\partial x} = \rho L \frac{dS(t)}{dt} \quad \text{em} \quad x = S(t), t > 0 \quad (4)$$

Onde  $T$  é a temperatura,  $S$  é a posição da fronteira,  $\alpha$  é a difusividade térmica da substância,  $\rho$  é a massa específica,  $k$  é a condutividade térmica e  $L$  é a entalpia de fusão.

É importante elucidar que a Eq. 1 consiste na equação do calor propriamente dita, ao passo que as equações (2-4) representam as condições inicial e de contorno do sistema.

### Método Integral

A implementação do método integral na resolução do presente problema segue uma sequência de três passos, os quais consistem em: primeiramente, integrar a Eq. 1 sobre a camada térmica (distância entre o ponto inicial e a posição da fronteira), a fim de eliminar os termos de derivada espacial; definir um perfil de distribuição de temperaturas (polinomial); e, por fim, a partir do perfil selecionado, calcular seus coeficientes, gerando-

se uma equação diferencial ordinária, cuja solução corresponde à posição da fronteira em função do tempo [4].

Deste modo, seguindo-se o primeiro passo e, com isso, integrando-se ambos os lados da Eq. 1 com respeito à variável espacial, tem-se como resultado a Eq. 5. Em seguida, esta é submetida à regra de Leibniz, visando eliminar o termo de derivada parcial com respeito ao tempo, o que possibilita a aplicação das condições de contorno representadas pelas equações (3-4), gerando-se a Eq. 6.

$$\left[ \frac{\partial T}{\partial x} \right]_{x=S(t)} - \left[ \frac{\partial T}{\partial x} \right]_{x=0} = \frac{1}{\alpha} \int_{x=0}^{x=S(t)} \frac{\partial T}{\partial t} dx \quad (5)$$

$$-\alpha \left[ \frac{\rho L}{k} \frac{dS(t)}{dt} + \left( \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0} \right] = \frac{d}{dt} \left[ \left( \int_0^{S(t)} T \cdot dx \right) - T_m \cdot S(t) \right] \quad (6)$$

Posteriormente, no segundo passo, foi definido um perfil quadrático de distribuição de temperaturas, conforme descrito na Eq. 7.

$$T = a + b(x - S) + c(x - S)^2 \quad (7)$$

Para realizar a substituição do polinômio  $T$  na integral da Eq. 6, necessita-se obter os valores dos três coeficientes  $a$ ,  $b$  e  $c$ . Estes são calculados com auxílio das três condições de contorno, porém não diretamente, de modo a evitar a geração de uma equação diferencial ordinária de ordem superior a 1 ao final da integração na Eq. 6. Assim, deve-se realizar uma modificação na Eq. 4, calculando sua diferencial total com relação ao tempo e, em seguida, eliminar o termo  $dS/dt$  através de uma série de substituições, gerando-se a Eq. 8.

$$\left( \frac{\partial T}{\partial x} \right)^2 = A\alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (8)$$

Onde  $A$  corresponde ao termo  $\rho L/k$ .

Finalmente, substituindo-se as condições de contorno definidas pelas equações (2-3) e (8), tem-se os valores dos coeficientes dispostos nas equações (9-11).

$$a = T_m \quad (9)$$

$$b = \frac{A\alpha}{S} \left[ 1 - (1 + \mu)^{1/2} \right] \quad (10)$$

$$c = \frac{bS + (T_0 - T_m)}{S^2} \quad (11)$$

Onde o termo  $\mu$  corresponde, segundo a Eq. 12.

$$\mu = \frac{2(T_o - T_m)}{A\alpha} \quad (12)$$

Por fim, tendo-se os valores do perfil de temperatura definidos, a resolução da Eq. 6 gera a equação diferencial ordinária de primeira ordem representada pela Eq. 13, cuja solução está disposta na Eq. 14.

$$\frac{dS(t)}{dt} \left\{ 6 - \left[ 1 - (1 + \mu)^{1/2} \right] + \mu \right\} = \frac{1}{S} \left\{ 6\alpha \left[ 1 - (1 + \mu)^{1/2} \right] + 6\mu\alpha \right\} \quad (13)$$

$$S(t) = \sqrt{12\alpha \frac{1 - (1 + \mu)^{1/2} + \mu}{5 + (1 + \mu)^{1/2} + \mu} t} \quad (14)$$

#### *Método Fracionário*

A solução analítica pelo método fracionário é determinada analogamente ao método integral, porém dispensa a condição de fronteira expressa pela Eq. 4 e, além disso, considera um perfil de temperatura de caráter fracionário em vez de quadrático, conforme a Eq. 15.

$$T = a + b(x - S)^\beta \quad (15)$$

Onde  $\beta$  representa o expoente fracionário, cujo valor será determinado através de um processo de minimização do erro quadrático com relação à solução exata.

De modo idêntico ao método integral, a partir das condições de contorno, calcula-se as expressões dos coeficientes  $a$  e  $b$ , dispostas nas equações (16-17).

$$a = T_m \quad (16)$$

$$b = \frac{T_o - T_m}{(-S)^\beta} \quad (17)$$

Assim, aplicando-se o perfil de temperatura, com seus devidos coeficientes substituídos, na Eq. 6, tem-se como resultado uma equação diferencial ordinária de primeira ordem, expressa pela Eq. 18, a qual ao ser resolvida fornece a posição da fronteira em função do tempo e do parâmetro ajustável  $\beta$ , conforme a E. 19.

$$\frac{dS}{dt} \left\{ \left[ T_m + \frac{(T_o - T_m)}{\beta + 1} \right] + T_m + \alpha A \right\} = \frac{\alpha(T_o - T_m)}{S} \beta \quad (18)$$

$$S(t) = \sqrt{\frac{2\mu\beta(\beta + 1)A\alpha^2}{4T_m(\beta + 1) + A\alpha[\mu + 2(\beta + 1)]} t} \quad (19)$$

### Método Numérico

O método implícito das diferenças finitas MVTS possui a importante característica de coincidir a posição da fronteira móvel aos valores previamente determinados pelo passo espacial, de modo que seu objeto de cálculo consista em estimar os passos temporais. Estes, por sua vez, consistem nos intervalos de tempo necessários ao deslocamento da fronteira em uma distância equivalente ao passo espacial. A partir dessas informações apresentadas, a discretização do domínio, bem como o algoritmo utilizado na resolução do problema, serão apresentados a seguir.

Primeiramente, reescrevendo-se a Eq. 1 como uma equação de diferenças finitas, conforme a Eq. 20.

$$\frac{T_{i-1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} = \frac{1}{\alpha} \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t_n} \quad (20)$$

Onde  $\Delta x$  e  $\Delta t$  representam os passos espacial e temporal, respectivamente. Além disso, o sobrescrito  $n$  representa o nível de tempo e o subscrito  $i$  expressa a posição espacial no domínio discreto.

Após manipulações algébricas, a Eq. 20 assumiu a configuração da Eq. 21, sendo expressa em termos do número adimensional de Fourier,  $Fo$ , o qual é descrito na Eq. 22.

$$T_i^n = (1 + 2Fo_n)T_i^{n+1} - Fo_n T_{i-1}^{n+1} - Fo_n T_{i+1}^{n+1} \quad (21)$$

$$Fo_n = \frac{\alpha \Delta t_n}{(\Delta x)^2}, \text{ onde } \Delta t_n = t_{n+1} - t_n \quad (22)$$

Uma análise cuidadosa sobre a condição de contorno expressa pela Eq. 2 torna possível perceber que, para situações nas quais a fase restante não haja gradientes de temperatura, a temperatura de fusão é equivalente à temperatura avaliada em um nível de tempo cujo valor numérico seja igual ao da posição, conforme ilustrado na Eq. 23.

$$T_{n+1}^{n+1} = T_m \quad (23)$$

Com isso, ao se discretizar a condição de interface expressa pela Eq. 4, tem-se conforme a Eq. 24.

$$\frac{T_{n+1}^{n+1} - T_n^{n+1}}{\Delta x} = A \frac{\Delta x}{\Delta t_n} \quad (24)$$

A partir de manipulações algébricas da expressão acima, estabelece-se a formulação padrão para o cálculo dos passos temporais, para  $n \geq 2$ , descrita na Eq. 25.

$$[\Delta t_n]^{(j+1)} = A \left[ \frac{\Delta x^2}{|T_m - T_n^{n+1}|} \right]^{(j)} \quad (25)$$

Para o primeiro passo temporal, em  $n = 0$ , não há necessidade de cálculo iterativo, podendo-se aplicar a Eq. 25 de modo adaptado, conforme ilustrado na Eq. 26.

$$\Delta t_o = A \left[ \frac{\Delta x^2}{(T_o - T_m)} \right] \quad (26)$$

Para  $n = 1$ , o valor do passo temporal foi determinado por meio da cuidadosa associação dos valores aos índices  $i$  e  $j$ , gerando-se a Eq. 27.

$$\left[ -Fo_1 T_o^2 + (1 + 2Fo_1) T_1^2 \right]^{(p)} = (1 + Fo_1^{(p)}) T_m \quad (27)$$

Isolando-se o termo  $T_1^2$  e aplicando-o na Eq. 25, foi gerado um novo valor para  $Fo$ , o qual foi novamente substituído na Eq. 27 até que o critério de convergência fosse atingido. Neste caso, o valor inicial adotado para  $Fo$  foi aquele obtido em  $n = 0$ .

Para a determinação dos outros valores de passo temporal, isto é, para  $n \geq 2$ , utilizou-se a Eq. 21, a partir da qual construiu-se um sistema tridiagonal de  $n$  equações, conforme descrito pelas equações 28-30.

$$A.T = B \quad (28)$$

$$A = \begin{bmatrix} 1+2Fo_n & -Fo_n & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -Fo_n & 1+2Fo_n & -Fo_n & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -Fo_n & 1+2Fo_n & -Fo_n & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -Fo_n & 1+2Fo_n & -Fo_n \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -Fo_n & 1+2Fo_n \end{bmatrix} \quad (29)$$

$$T = \begin{bmatrix} T_1^{n+1} \\ T_2^{n+1} \\ T_3^{n+1} \\ T_4^{n+1} \\ \vdots \\ T_n^{n+1} \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} T_1^n + Fo_n T_o \\ T_2^n \\ T_3^n \\ \vdots \\ T_{n-1}^n \\ T_m (1 + Fo_n) \end{bmatrix} \quad (30)$$

Após a resolução do sistema, o valor do último elemento do vetor  $T$  foi substituído na Eq. 25, gerando-se um novo passo no tempo. Este foi comparado com o valor do passo anterior, a fim de verificar o atendimento ao critério de convergência, sendo que tal processo repetiu-se até que o critério em questão fosse satisfeito. É importante elucidar que o critério de parada adotado foi a diferença absoluta entre duas iterações consecutivas, cujo valor fosse igual ou inferior a 0,0001.

## Resultados e Discussão

De modo a testar a eficácia e comparar os três métodos discutidos neste trabalho, foi necessário selecionar uma substância, sobre a qual seriam realizadas as simulações do

processo de fusão. A espécie química designada foi a água, cujas propriedades físicas encontram-se dispostas na tabela 1.

Tabela 1 - Propriedades físicas da água e condições utilizadas na simulação.

Propriedade	Valor
Massa específica	0,9999 g/cm <sup>3</sup>
Condutividade térmica	0,0056 W/cm.K
Calor específico	4,217 J/g.K
Temperatura de fusão	0 °C
Temperatura inicial	80°C
Entalpia de fusão (0 °C)	333,4 J/g

Fonte: Verma *et al.*, 2004.

Para o MVTS, após a discretização do domínio, a malha resultante foi dividida em 51 pontos nodais na direção espacial, de comprimentos iguais a 0,005 cm. Ademais, como esse método estimou os passos temporais, a comparação deste com os métodos analíticos ocorreu no sentido de verificar o instante de tempo no qual a fronteira, nestes métodos, atingiu a distância especificada pelo passo espacial do método numérico.

Assim, após a realização da simulação do método numérico, os resultados obtidos para a posição da fronteira móvel em função do tempo foram organizados no gráfico da Figura 1.

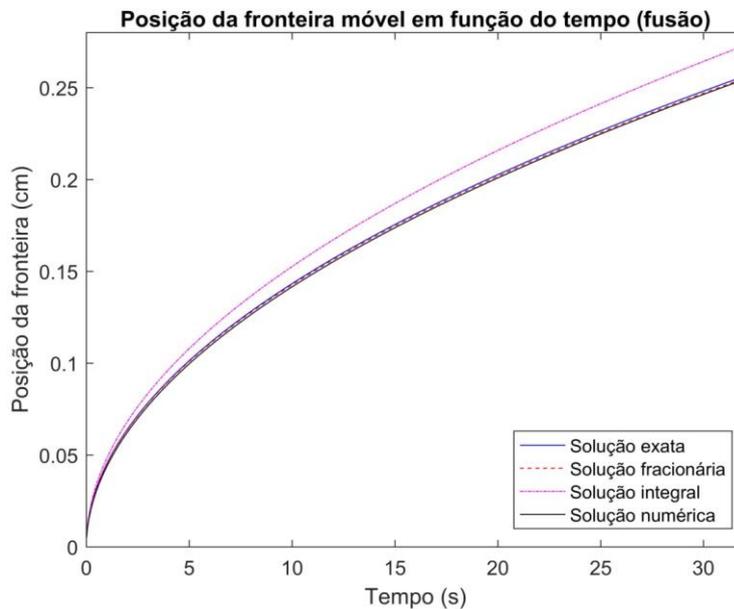


Figura 1. Posição da fronteira móvel em função do tempo para os três métodos e solução exata. FONTE: AUTOR. 2017.

Conforme a Figura 1, dentre os métodos analíticos, o método integral apresentou o maior desvio com relação à solução exata, ao passo que a solução fracionária apresentou o menor, resultando nos valores constantes de 6,5107% e 0,4384%, respectivamente. O pequeno erro deste último deve-se ao parâmetro ajustável  $\beta$ , cujo processo de minimização de erro mostrou a viabilidade da solução, obtendo-se um valor deste equivalente a 1,125. Em contrapartida, a solução numérica apresentou um erro

decrecente ao longo do processo iterativo, variando de 5,6081% no primeiro instante de tempo calculado até 0,6946% na última posição. Esse erro variável respalda-se na natureza iterativa do método numérico, a qual reduz o erro à medida em que aumenta-se o número de termos de iterações anteriores para corrigi-lo, fato que mostra-se praticamente ausente nas primeiras iterações.

## **Conclusão**

No presente trabalho, foram estudados três diferentes técnicas que concernem à resolução de problemas de fronteira móvel, sendo dois deles analíticos e um deles numérico. Dentre as técnicas analíticas, foi abordado o clássico método integral e o método fracionário, o qual é resultante, essencialmente, de modificações do perfil de distribuição de temperaturas empregado no método integral. Por outro lado, a técnica numérica tratada foi o método das diferenças finitas implícito e com passo no tempo variável, conhecida como MVTs. A fim de comparar a eficácia e a precisão das três técnicas apresentadas, solucionou-se o problema em questão para o caso da fusão de gelo, sendo as simulações e cálculos realizados a partir da programação de uma rotina computacional em linguagem MATLAB. A partir dos resultados foi averiguado que o método fracionário e o numérico tiveram uma melhor performance que o método integral, já consagrado pela literatura.

## **Agradecimentos**

Os autores agradecem ao apoio financeiro fornecido pelo CNPq e à disponibilidade dos equipamentos e *softwares* necessários à realização deste trabalho por parte da UFPR.

## **Referências**

- [1] JOHANN, G., & SILVA, E. A. da. Análise de problemas de fronteira móvel usando a técnica dos elementos de contorno. *Acta Scientiarum Technology*. 2005, v. 27, 111–117.
- [2] CLELAND, A. C.; EARLE, R. L. The third kind of boundary condition in numerical freezing calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 1977, v. 20, n. 10, p. 1029–1034.
- [3] AHMED, S. G.; MESHRAF, S. A. A new numerical algorithm for 2D moving boundary problems using a boundary element method. *Computers and Mathematics with Applications*. 2009, v. 58, n. 7, p. 1302–1308.
- [4] ÖZISIK, M. N. *Heat Conduction*. 2 ed. Raleigh: John Wiley & Sons, Inc., 1993. p. 393-416.
- [5] GOODMAN, T. R. *Trans. Am. Soc. Mech. Eng.* 1958, v. 80, 335-342.
- [6] GUPTA, R. S.; KUMAR, D. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 1981, v. 24, 251-259.
- [7] VERMA, A. K.; CHANDRA, S.; DHINDAW, B. K. An alternative fixed grid method for solution of the classical one-phase Stefan problem. *Applied Mathematics and Computation*, v. 158, n. 2, p. 573–584, 2004.