



SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE MUDANÇA DE FASE USANDO FORMULAÇÃO EM UM DOMÍNIO COM ACOMPANHAMENTO DA FRENTE



Renata S. Crespo

Depto. de Eng. Mecânica - Univ. Federal do Espírito Santo
29060-970 - Vitória - ES - Brasil

Clovis R. Maliska

Depto. de Eng. Mecânica - Univ. Federal de Santa Catarina
88040-900 - Florianópolis - SC - Brasil

RESUMO

Este trabalho propõe um método para simulação numérica de problemas de mudança de fase, baseado principalmente na idéia de dar um melhor tratamento numérico à frente de mudança de fase. O novo método leva a excelentes soluções unidimensionais, sendo capaz de prever a posição da interface com erros médios da ordem de 0,5% com relação à solução exata. O método é estendido ao caso bidimensional, introduzindo a utilização de coordenadas generalizadas e malha móvel. São propostos dois tipos de malhas móveis, gerando duas metodologias diferentes, porém, com a mesma concepção.

INTRODUÇÃO

O grande número de aplicações práticas é a principal motivação para o estudo da mudança de fase (mdf) sólido/líquido, como, por exemplo, em processos metalúrgicos, ou em instalações de armazenamento de energia por meio de material de mudança de fase. Trata-se de um problema numérico importante, classificado na categoria dos problemas de "fronteira móvel", devido à existência da interface sólido/líquido se movendo no domínio durante a solução. Existem dois tipos principais de solução, o método da temperatura, no qual a posição da frente é determinada e o problema resolvido separadamente em dois domínios, com a aplicação de condições na interface; e o método da entalpia, no qual não se conhece a posição da frente e o problema é resolvido com formulação única para todo o domínio. No método da entalpia a existência da mdf só é "noticiada" por meio do termo-fonte da equação da energia, surgindo, então, uma infinidade de métodos baseados na maneira de tratar este termo-fonte. O método proposto não se enquadra nestes dois tipos clássicos. Possui uma nova concepção, tratando-se de um método em um domínio, como o método da entalpia, mas com o acompanhamento da interface, como o método da temperatura, porém, sem os inconvenientes da aplicação de condições de interface. Por isto foi denominado *one-domain front-tracking method (ODFT)*. A concepção do novo método é apresentada para solução unidimensional, com comparação de resultados com relação à solução exata. Uma extensão do método para geometrias bidimensionais é apresentada, sendo propostos dois tipos de malhas móveis, gerando metodologias diferentes. Soluções bidimensionais são obtidas para o caso sem convecção na fase líquida.

FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

A formulação utilizada é a mesma do método de entalpia, porém com a temperatura como variável dependente da equação de conservação de energia, ficando

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c T) - \nabla \cdot (k \nabla T) = -\lambda \frac{\partial}{\partial t}(\rho f) \quad (1)$$

onde c é o calor específico, λ é o calor latente de fusão e f é a fração de líquido, ou seja, f é a relação entre a entalpia latente e o calor latente do material, $f = H/\lambda$.

A IDÉIA BÁSICA DA NOVA PROPOSTA

O novo método propõe um tratamento numérico para a frente de mdf que forneça um nível maior de detalhamento junto à interface, permitindo uma solução mais precisa do problema. As modificações se encontram basicamente na maneira de discretizar a equação junto à interface, no cálculo da temperatura no volume em mdf, e no posicionamento da interface. A seguir estes aspectos são discutidos para a geometria unidimensional.

Δ Discretização da Equação. A Eq. (1) discretizada no tempo para um volume elementar, mostrado na Fig. 1, fica

$$\rho c (T_P - T_P^0) \frac{\Delta x_P}{\Delta t} - (q_e - q_w) = \rho \lambda (f_P^0 - f_P) \frac{\Delta x_P}{\Delta t} \quad (2)$$

onde

$$q_e = \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_e, \quad q_w = \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_w \quad (3)$$

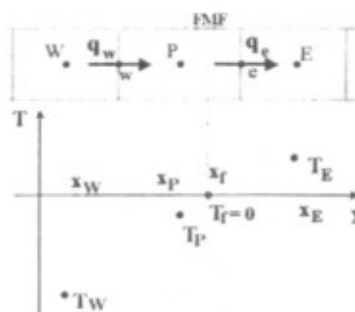


Figura 1 - Volume em mudança de fase

Os fluxos nas faces do volume em mdf comumente são calculados da mesma forma que nos demais volumes do domínio, utilizando um esquema de diferenças centrais simples (d.c.s.), como mostrado na Eq. (4). No novo método, utiliza-se a posição da interface para o cálculo dos fluxos de calor nas faces do volume em mdf, como apresentado na Eq. (5), uma vez que a temperatura da frente, T_f é conhecida e usualmente tomada como referência, resultando $T_f = 0$.

$$\begin{cases} q_e = k_p \frac{T_E - T_P}{\Delta x_e} \\ q_w = k_p \frac{T_P - T_W}{\Delta x_w} \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{cases} q_e = k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f} \\ q_w = k_- \frac{T_f - T_W}{x_f - x_w} \end{cases} \quad (5)$$

Esta aproximação dos fluxos levando em consideração a interface, Eq. (5), foi utilizada inicialmente por Tacke (1985). Em Crespo (1996) mostra-se que a equação da energia é melhor aproximada com a utilização das Eqs. (4-5), como feito por Tacke. É importante observar que, com esta aproximação, os coeficientes da equação discretizada passam a depender da posição da interface, x_f , nos volumes vizinhos ao em mdf.

A Temperatura no Volume em Mudança de Fase. Para a temperatura no volume em mdf utiliza-se o valor obtido por interpolação linear com relação aos vizinhos, ao invés do valor proveniente da solução da equação da energia neste volume, ou do valor da temperatura de mudança de fase, como feito por Voller (1990). A equação da energia é usada para o cálculo da fração de líquido no volume e, conseqüentemente, a posição da interface. Com relação à Fig. 1, o cálculo de T_p é feito como a seguir,

$$T_p = \begin{cases} \frac{x_p - x_f}{x_E - x_f} T_E & \text{se } x_f / x_p < 1 \\ \frac{x_p - x_f}{x_w - x_f} T_W & \text{se } x_f / x_p > 1 \end{cases} \quad (6)$$

A Posição da Interface. A Eq. (2) representa um balanço de energia no volume elementar P de tal forma que o primeiro termo representa a variação da energia sensível no intervalo de tempo Δt , o segundo termo mostra um balanço de fluxos de calor nas faces do volume e o termo-fonte contabiliza a variação da energia latente no volume. Conhecido um perfil de temperatura, podem-se calcular os termos do lado esquerdo da Eq. (2) e obter o valor da fração de líquido no instante atual, f_p . O cálculo da variação sensível, VAR, no volume em mdf é feito pela variação da energia sensível, ES, integrada no volume, uma vez que a temperatura no centro deste volume não representa um valor médio e sim pontual, obtido por interpolação linear. A Fig. 2 mostra uma representação gráfica da variação sensível no volume, que é calculada usando as Eqs (7-9) a seguir.

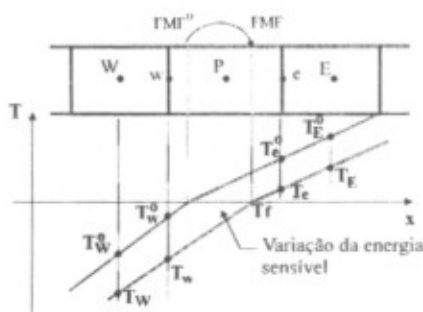


Figura 2 - Variação da energia sensível num volume em mdf

$$ES = \rho c \left[\bar{T}_w (x_f - x_w) + \bar{T}_e (x_e - x_f) \right] \quad (7)$$

onde

$$\bar{T}_w = \frac{T_f + T_w}{2} = \frac{T_w}{2} = \frac{1}{2} \frac{x_f - x_w}{x_f - x_w} T_w, \quad (8)$$

$$\bar{T}_e = \frac{T_f + T_e}{2} = \frac{T_e}{2} = \frac{1}{2} \frac{x_e - x_f}{x_E - x_f} T_e.$$

$$VAR = \frac{(ES - ES^0)}{\Delta t} \quad (9)$$

O valor E^0 é armazenado do tempo anterior no caso da frente permanecer no mesmo volume. Caso contrário, a energia sensível existente em um volume que não estava em mdf é calculada como

$$ES^0 = \rho c T_p^0 \Delta x_p \quad (10)$$

A nova posição da interface é facilmente obtida a partir da nova fração de líquido calculada no balanço para geometria unidimensional. De acordo com a Fig. 2, pode-se dizer que

$$x_f = x_e - f_p \Delta x_p \quad (11)$$

Como no método proposto os fluxos nas faces do volume em mdf são calculados com relação à posição da interface é interessante que uma primeira avaliação de x_f seja feita para cada tempo, com a finalidade de reduzir o número de iterações necessárias para a convergência. Utiliza-se simplesmente a aproximação de velocidade de deslocamento constante para a interface a fim de prever a sua nova posição após um avanço de tempo.

GENERALIZAÇÃO DO MÉTODO

O desempenho do novo método para problemas bidimensionais será mostrado para a categoria de problemas nos quais se pode alinhar uma das coordenadas da malha à frente de mdf. A solução numérica adotada utiliza malha estruturada, e, portanto, os volumes elementares da malha discreta são delimitados por linhas coordenadas. A necessidade de alinhamento da malha à posição da frente de mdf surge por questões numéricas, para facilitar:

- o cálculo das derivadas com relação à posição da interface,
- o cálculo da posição da interface a partir do valor da fração de líquido nos volumes em mdf, resultante do balanço de energia nestes volumes.

Surge a necessidade de utilização de coordenadas generalizadas para que seja possível o alinhamento da malha à posição da interface e também para o tratamento de geometrias arbitrárias. Além disto, utiliza-se malha móvel para que o alinhamento se dê mesmo com o movimento da interface no tempo. Isto é, a malha se alinha à interface à medida que esta se deforma ao longo do tempo. São propostos dois tipos de malha móvel:

- **malha coincidente com a interface.** É a malha móvel comumente utilizada nas soluções pelo método da temperatura, existindo uma mesma linha da malha sempre coincidente com a interface, separando as duas fases. Tem o inconveniente de possuir número fixo de malhas em cada domínio, que se expande ou comprime à medida que o domínio cresce ou diminui.

- **malha ajustável**, que não necessariamente coincide com a interface, apenas, de tempos em tempos se ajusta à posição desta, tornando-se aproximadamente paralela. Neste caso, a frente de mdf caminha pela malha discreta, mudando de volume após alguns avanços de tempo. Assim sendo, não existe mais a restrição de número constante de malhas em cada domínio. Porém, como geralmente, à medida que a interface caminha ela vai se deformando, a malha deve se ajustar para manter um certo paralelismo entre uma das linhas coordenadas e a interface.

A Malha Coincidente Com a Interface. Como se vê na Fig. 3, existe uma coluna de volumes em mdf, que são limitados pela posição da interface no instante anterior e pela atual. A temperatura nestes volumes é conhecida, igual à temperatura de mdf, feita nula como referência. A equação da energia é, então, utilizada para calcular o volume de material que mudou de fase, ou seja, para posicionar corretamente a interface. Este método é semelhante ao método de Voller (1990), mas agora, com malha móvel, permitindo que a temperatura seja feita nula somente no volume de material que realmente se encontra em mdf.

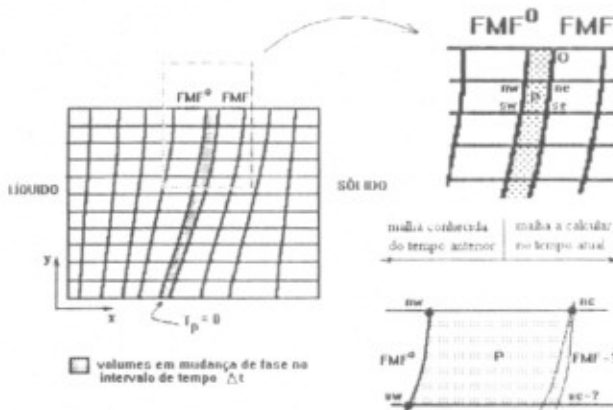


Figura 3 - Malha coincidente com a interface

Com base na Fig. 3, verifica-se que a parte da malha que se encontra até a posição da interface no tempo anterior (FMF^0) se move uma vez para cada avanço de tempo, não necessitando ser convergida junto com a solução. A linha coincidente com a interface é ajustada por método iterativo, e as linhas após a interface são distribuídas de maneira algébrica, geralmente com espaçamento constante, sobre o restante do domínio. A geração da malha parte de um dos pontos onde a interface encontra um contorno, por exemplo, o ponto "o" representado na Fig. 3, no qual a interface encontra a face norte do domínio. Então, a malha é gerada de cima para baixo, encontrando para cada volume em mdf a posição do ponto "se", em função dos demais, "nw", "sw", "ne". O valor do jacobiano inverso, que representa a porção de material que muda de fase no avanço de tempo Δt , é obtido do balanço de energia nos volumes em mdf, uma vez que para eles a fração de líquido atual é igual a um. Através do cálculo das derivadas que compõem a definição do jacobiano da transformação obtém-se uma equação para a ordenada do ponto "se" com relação às coordenadas dos demais pontos de vértices do volume cujo jacobiano é conhecido. Este procedimento encontra-se detalhado em Crespo (1996).

A Malha Ajustável. O segundo método se assemelha mais ao método unidimensional descrito inicialmente. A posição da

interface é acompanhada em cada linha que liga os centros de volume. A nova posição da interface é obtida da fração de líquido, calculada para os volumes em mdf através do balanço de energia. Para relacionar a fração de líquido à posição da interface, considera-se que esta é paralela a uma das linhas coordenadas, no caso linhas ξ , como mostrado na Fig. 4.

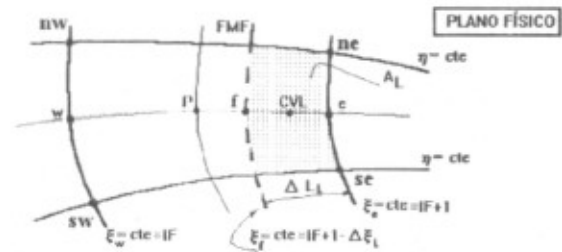


Figura 4- Relação entre a fração de líquido e a posição da interface

A fração de líquido é a relação entre a área de líquido, A_L , e a área total do volume P , A_P , dada por

$$f = A_L/A_P \quad (12)$$

Conforme mostrado em Maliska (1995), a área no plano físico está relacionada à área no plano transformado pelo inverso do jacobiano da transformação, I . Como arbitra-se o valor unitário à área do volume no plano transformado, o inverso do jacobiano é a própria área do volume no plano físico. Então, resulta

$$f = I_{CVL}/I_P \quad (13)$$

Considerando que as variações são lineares dentro do volume, conclui-se que as derivadas para o volume de líquido podem ser dadas por

$$(x_\xi)_{CVL} = \Delta \xi_L (x_\xi)_P \quad (14)$$

$$(y_\xi)_{CVL} = \Delta \xi_L (y_\xi)_P$$

$$(x_\eta)_{CVL} = \frac{1}{2} \left[(2 - \Delta \xi_L) x_{\eta,e} + \Delta \xi_L x_{\eta,w} \right] \quad (15)$$

$$(y_\eta)_{CVL} = \frac{1}{2} \left[(2 - \Delta \xi_L) y_{\eta,e} + \Delta \xi_L y_{\eta,w} \right]$$

O inverso do jacobiano no centro do volume líquido fica

$$I_{CVL} = \Delta \xi_L \left\{ x_{\xi,P} \frac{1}{2} \left[(2 - \Delta \xi_L) y_{\eta,e} + \Delta \xi_L y_{\eta,w} \right] - \frac{1}{2} \left[(2 - \Delta \xi_L) x_{\eta,e} + \Delta \xi_L x_{\eta,w} \right] y_{\xi,P} \right\} \quad (16)$$

Observa-se que se $x_{\eta,e} = x_{\eta,w}$ e $y_{\eta,e} = y_{\eta,w}$ existe proporcionalidade entre as áreas, o que é expresso pela Eq. (16), resultando

$$I_{CVL} = \Delta \xi_L I_P \quad (17)$$

Substituindo a Eq. (16) na expressão da fração de líquido, Eq. (13), obtém-se uma equação de segundo grau para $\Delta \xi_L$. Com o valor de $\Delta \xi_L$, pode-se determinar o valor da coordenada ξ da frente de mdf no volume, isto é, o valor de ξ_i , como representado

na Fig. 4. As coordenadas do ponto *f*, que posiciona a interface no plano físico, são obtidas a partir do valor de ξ_f

$$\begin{aligned} x_{f,P} &= \frac{x_{nw} + x_{sw}}{2} + x_{\xi,P} (\xi_{f,P} - IF) \\ y_{f,P} &= \frac{y_{nw} + y_{sw}}{2} + y_{\xi,P} (\xi_{f,P} - IF) \end{aligned} \quad (18)$$

O método admite um certo desalinhamento entre a interface e a malha. Estabeleceu-se um critério para o realinhamento da malha à posição da interface, utilizando o chamado "fator de desalinhamento", FD, que é a maior diferença entre os valores de ξ_f da coluna de volumes em mdf. Assim, quanto menor o desalinhamento admitido, melhor será a aproximação do cálculo da posição da interface, pois, para ele considerou-se a interface perfeitamente alinhada à malha. Em contrapartida, mais correções da malha serão necessárias, aumentando o tempo de processamento para a solução do problema. Quando o FD atinge o valor máximo admissível, a primeira linha $\xi=cte$ após a interface é recalculada a fim de ficar paralela a esta. As linhas anteriores não são ajustadas e as demais linhas após esta primeira são redistribuídas no restante do domínio.

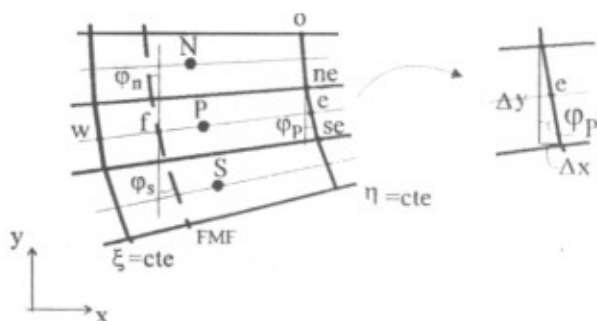


Figura 5 - Cálculo do ângulo da interface

O alinhamento da malha à posição da interface é feito encontrando-se o ângulo de inclinação da interface com relação ao eixo *y*, por exemplo, e fazendo a primeira linha após a interface paralela a ela. Partindo-se de um dos extremos da linha, denominado ponto "o" na Fig. 5, os demais pontos são obtidos por meio do ângulo conhecido da interface. A Fig. 5, mostra os ângulos da interface e da malha, tal que

$$\varphi_p = \frac{\varphi_n + \varphi_s}{2} = \text{tg}^{-1} \left(\frac{\Delta x}{\Delta y} \right) \quad (19)$$

RESULTADOS

Para a geometria unidimensional, as soluções obtidas com o presente método (ODFT) são comparadas à solução exata de Neumann (Carslaw & Jaeger, 1959), e à solução obtida usando o método da entalpia desenvolvido por Voller, apresentado em Voller (1990) e Voller & Swaminathan (1993). Os gráficos apresentam as soluções com relação ao tempo adimensional dado em termo do Fourier, $Fo = \alpha t / L^2$, onde α é a difusividade térmica e L o comprimento característico do problema. As soluções são obtidas para diversos valores do número de Stefan,

definido genericamente como $Ste = (c_l T_l - c_s T_s) / \lambda$, onde c é o calor específico do material, T a temperatura, λ o calor latente de fusão e os subíndices *L* e *S* se referem respectivamente à fase líquida e à sólida. Para a geometria bidimensional as soluções são comparadas novamente com soluções obtidas com o método de Voller (1990) e com alguns dados da literatura.

Resultados Unidimensionais com Propriedades Contínuas.

A Fig. 6 compara históricos de temperatura na posição $x=0,175$, e a Fig. 7 apresenta a posição da interface no tempo para vários valores de *Ste*. Os avanços de tempo foram $\Delta Fo = 0,002$ em todos os casos, menos para $Ste = 5,0$, quando utilizou-se $\Delta Fo = 0,001$.

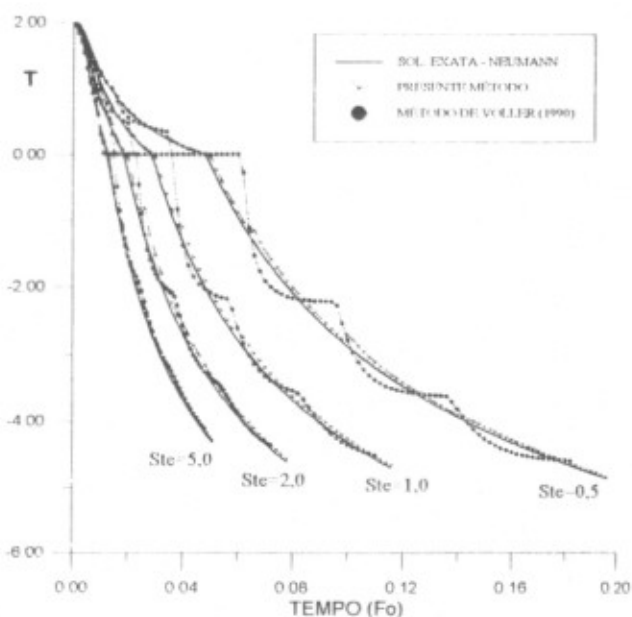


Figura 6 - Histórico de temperatura no ponto $x=0,175$

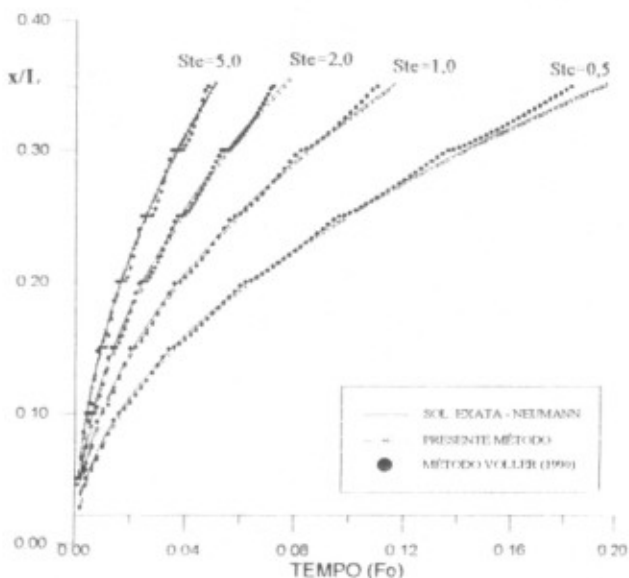


Figura 7 - Posição da interface no tempo

A tabela 3 apresenta os tempos totais de solidificação nos três casos e o número de malhas utilizadas ao longo da solução, isto é, a inicial mais as ajustadas pelo método. A Fig. 9 mostra as curvas de posição x da interface na fronteira norte e na diagonal, comparadas à solução com malha fixa 10×10 volumes no domínio. Como previsto, à medida que se aumenta o FD a solução se deteriora, pois o método considera que a interface é paralela a linhas ξ . Este fato pode ser verificado através da solução com $FD=0,3$. Percebe-se que em certos momentos a solução junto à diagonal fica bastante alterada, concluindo-se que este valor de FD é muito elevado.

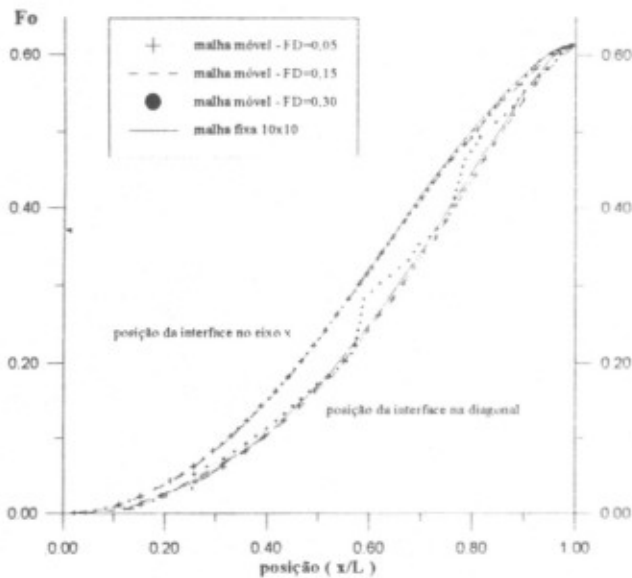


Figura 9 - Previsão da posição da frente com malha ajustável.

A solução usando **malha coincidente com a interface** também foi obtida para malha 10×10 , só que inicialmente comprimida, se expandindo à medida que o domínio sólido aumenta.

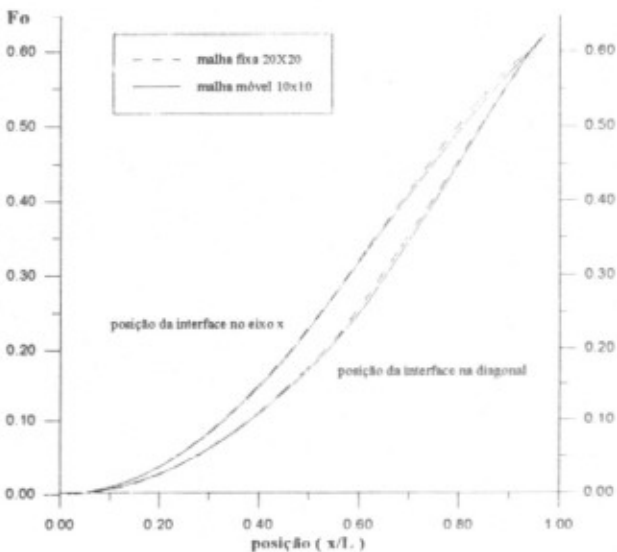


Figura 10 - Solução para malha coincidente com interface

A Fig. 10 mostra as curvas de posição x da interface na fronteira norte e na diagonal, comparadas à solução com malha fixa 20×20 volumes no domínio. Verifica-se uma excelente concordância entre as soluções. Porém, o método apresentou problema no final do domínio, onde a interface tende a se reduzir a um ponto. Por isto, o cálculo do tempo total de solidificação com este método fica prejudicado neste caso. Mas esta é apenas uma peculiaridade da geometria deste problema específico, não configurando um problema do método propriamente dito.

CONCLUSÕES

Um novo método é proposto, o qual não se enquadra em nenhuma das duas linhas em que se vinha historicamente pesquisando. Este é um fato novo na área, que poderá permitir grandes avanços futuros. O método em um domínio com acompanhamento da frente - *ODFT* apresenta excelentes resultados unidimensionais e boas soluções bidimensionais. Dois novos algoritmos para adaptação da malha à posição da interface foram desenvolvidos, mostrando bons resultados.

REFERÊNCIAS

- Carslaw, H. S.; Jaeger, J. C.; "Conduction of Heat in Solids", Clarendon Press, Oxford (1959)
- Crespo, R. S.; "Solução Numérica de Problemas de Mudança de Fase Usando Formulação em Um Domínio com Acompanhamento da Frente", Tese de Doutorado - UFSC (1996)
- Crowley, A. B.; "Numerical Solution of Stefan Problems", Int. J. Heat Mass Transfer, V21, p215-219 (1978)
- Kim, C.-J., Kaviany, M.; "A Numerical Method for Phase-Change Problems With Convection and Diffusion", Int. J. Heat Mass Transfer, V35, p457-467 (1992)
- Lee, S. L., Tzong, R. Y.; "An Enthalpy Formulation for Phase Change Problems With a Large Thermal Diffusivity Jump Across the Interface", Int. J. Heat Mass Transfer, V34, p1491-1502 (1991)
- Maliska, C. R.; "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional", Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro, RJ, Brasil (1995)
- Tacke, K-H.; "Discretization of the Explicit Enthalpy Method for Planar Phase Change", Int. J. Num. Meth. Engng., V21, p543-554 (1985)
- Voller, V. R.; "Fast Implicit Finite-Difference Method for the Analysis of Phase Change Problems", Num. Heat Transfer, B, V.17, p155-169, (1990)
- Voller, V. R., Swaminathan, C. R.; "Treatment of Discontinuous Thermal Conduction in Control-volume Solutions of Phase-Change Problems", Num. Heat Transfer, B, V.24, p161-180, (1993)

ABSTRACT

The method proposed in this work advances a new idea, where a better treatment is giving to the moving front without the inconvenience of applying conditions at the interface. The method is able of predicting the position of the moving front with 0.5% error when compared with analytical solutions. The method is generalized using curvilinear coordinate systems and moving grids. Two moving grid methods are proposed. One-dimensional and two-dimensional problems are solved and compared with available results in the literature.