

ANÁLISE HÍBRIDA NUMÉRICO-ANALÍTICA DA SOLIDIFICAÇÃO DE GOTÍCULAS SUPER-RESFRIADAS

Igor Soares Carvalho

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientadores: Carolina Palma Naveira Cotta Renato Machado Cotta

Rio de Janeiro Dezembro de 2019

ANÁLISE HÍBRIDA NUMÉRICO-ANALÍTICA DA SOLIDIFICAÇÃO DE GOTÍCULAS SUPER-RESFRIADAS

Igor Soares Carvalho

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA MECÂNICA.

Examinada por:

Prof. Renato Machado Cotta, Ph.D.

Prof. Fernando Pereira Duda, D.Sc.

Prof. Leandro Alcoforado Sphaier, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL DEZEMBRO DE 2019 Carvalho, Igor Soares

Análise Híbrida Numérico-Analítica da Solidificação de Gotículas Super-Resfriadas/Igor Soares Carvalho. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2019.

XVII, 99 p.:il.;29,7cm.

Orientadores: Carolina Palma Naveira Cotta

Renato Machado Cotta

Dissertação – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Mecânica, 2019.

Referências Bibliográficas: p. 90-99.

1. Transformação Integral. 2. GITT. 3. Gotículas superresfriadas. 4. Tempo de congelamento. I. Naveira Cotta, Carolina Palma *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a DEUS, por me conceder saúde e sabedoria para seguir sempre em frente. Ao Senhor Jesus seja dada toda honra e toda glória.

À minha esposa Roberta Condé Carvalho, pelo amor, companheirismo e encorajamento durante todo este trabalho.

Aos meus pais, Lauri Rodrigues Carvalho e Regina Soares Carvalho, que além de todo o amor e carinho dados aos filhos, abriram mão de seus sonhos e planos pessoais para investir na minha educação.

À minha irmã, Sarah Soares Carvalho, pela amizade e por sempre estar disponível para me ajudar.

Aos meus orientadores, Professor Renato Cotta e Professora Carolina Cotta, pela paciência, orientação, confiança e amizade. Foi um privilégio trabalhar com vocês.

Aos meus amigos e minha família, e a todos que me ajudaram de forma direta ou indireta na conclusão deste trabalho.

Ao Departamento de Engenharia Mecânica da UFRJ e a COPPE/UFRJ, pela oportunidade me concedida para o desenvolvimento do meu curso de mestrado.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc)

ANÁLISE HÍBRIDA NUMÉRICO-ANALÍTICA DA SOLIDIFICAÇÃO DE GOTÍCULAS SUPER-RESFRIADAS

Igor Soares Carvalho

Dezembro/2019

Orientadores: Carolina Palma Naveira Cotta Renato Machado Cotta

Programa: Engenharia Mecânica

O fenômeno de congelamento de gotículas líquidas super-resfriadas revela comportamentos térmicos importantes para diversas aplicações na engenharia, e a modelagem deste mecanismo seria muito útil na construção de revestimentos gelofóbicos com o intuito de reduzir o acúmulo de gelo sobre superfícies. Neste trabalho soluções híbridas numérico-analíticas são desenvolvidas para o modelo matemático relacionado ao congelamento de uma gotícula de água super-resfriada imersa em uma corrente de ar frio, e sujeita aos três principais fenômenos de transporte na interface entre a gotícula e o ambiente externo: transferência de calor por convecção, transferência de massa por convecção e transferência de calor por radiação. As soluções híbridas, com controle automático de erro, são obtidas através da aplicação da Técnica de Transformação Integral Generalizada (GITT) na formulação diferencial parcial transiente do problema de transferência de calor com contorno móvel. As condições de contorno não-lineares na interface entre a gotícula e o ar são incorporadas diretamente pela escolha de uma autofunção não-linear como base da expansão. Além disso, a frente de solidificação móvel não-linear é resolvida juntamente com o sistema de equações diferenciais ordinárias para as temperaturas transformadas. Após a verificação da solução em relação aos resultados numéricos previamente relatados e a validação com dados experimentais disponíveis na literatura, foi analisada a influência dos parâmetros físicos relacionados ao problema no tempo de congelamento das gotículas.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

HYBRID NUMERICAL-ANALYTICAL ANALYSIS OF THE SOLIDIFICATION OF SUPERCOOLED DROPLETS

Igor Soares Carvalho

December/2019

Advisors: Carolina Palma Naveira Cotta Renato Machado Cotta

Department: Mechanical Engineering

The freezing phenomena in supercooled liquid droplets reveals important thermal behaviors for many engineering applications and modeling such mechanism would be quite beneficial in tailoring surface coatings for achieving icephobicity to reduce ice adhesion and accretion. In this work, hybrid numerical-analytical solutions are developed for the mathematical model related to the freezing of a supercooled droplet immersed in a cold air stream, subjected to the three main transport phenomena at the interface between the droplet and the surroundings: convective heat transfer, convective mass transfer and thermal radiation. The developed error-controlled hybrid solutions are obtained through application of the Generalized Integral Transform Technique (GITT) on the transient partial differential formulation of this moving boundary heat transfer problem. The nonlinear interface temperature boundary conditions are directly accounted for by the choice of a nonlinear eigenfunction expansion base. Also, the nonlinear moving solidification front is solved for together with the ordinary differential system for the integral transformed temperatures. After verification of the solution against previously reported numerical results and validation with experimental data available in the literature, the influence of the related physical parameters on the droplet freezing time is analyzed.

SUMÁRIO

Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xiii
Lista de Símbolos	xv
1. Introdução	1
1.1 Motivação e objetivos	1
1.2 Organização do trabalho	5
2. Revisão Bibliográfica	7
2.1 Solidificação de gotículas de água	7
2.2 Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT)	12
2.3 GITT aplicada à problemas de contorno móvel	14
3. Formulação Físico-Matemática	16
3.1 Problema físico	16
3.2 Formulação matemática	18
3.2.1 Etapa 1: Super-resfriamento	19
3.2.2 Etapa 2: Recalescência	20
3.2.3 Etapa 3: Solidificação (ou congelamento)	22
3.2.4 Etapa 4: Resfriamento da gotícula solidificada	24
4. Método de Solução	25
4.1 Etapa 1: Super-resfriamento	25
4.2 Etapa 2: Recalescência	34
4.3 Etapa 3: Solidificação	34
4.4 Etapa 4: Resfriamento	46
5. Resultados e discussão	55
5.1 Verificação do algoritmo	55
5.1.1 Etapa 1: Super-resfriamento somente com convecção	55
5.1.2 Etapa 3: Solidificação somente com convecção	59
5.2 Validação do modelo: Análise completa do congelamento com convecção, radiação e resfriamento evaporativo	64
5.2.1 Considerações para os dados de entrada da simulação	64
5.2.2 Etapa 1: Super-resfriamento	68
5.2.3 Etapa 2: Recalescência	71
5.2.4 Etapa 3: Solidificação	71

5.2.5 Etapa 4: Resfr	iamento	74
5.2.6 Análise do pro	cesso completo para a temperatura no centro da gotícula	75
5.3 Influência da conv temperatura e no temp	ecção, da radiação e do resfriamento evaporativo na o de solidificação das gotículas	78
5.4 Influência do núm	ero de Stefan na etapa de solidificação (etapa 3)	81
5.5 Influência do tama	nho das gotículas	85
6. Conclusões		87
7. Referências		90

Lista de Figuras

Figura 1.1 - Desenho esquemático da solidificação de gotículas de água imersas em
uma corrente de ar. As setas em azul indicam a direção de propagação da
frente de solidificação4
Figura 2.1 – Aparato experimental utilizado para analisar a solidificação de gotículas
de água. Fonte: HINDMARSH et al. (2003)9
Figura 2.2 – Gotícula de água suspensa por termopar. Adaptado de HINDMARSH et
al. (2003)9
Figura 2.3 - Exemplo de gráfico temperatura no centro da gotícula versus tempo,
obtido por HINDMARSH et al. (2003). 1) Etapa de super-resfriamento.
2) Etapa recalescente. 3) Etapa de solidificação. 4) Etapa de
resfriamento. Adaptado de HINDMARSH et al. (2003)11
Figura 3.1 – Camada de gelo se forma na superfície externa da gotícula, e se propaga
na direção indicada pelas setas em azul17
Figura 3.2 – Posição inicial (R _{ini}) da camada de gelo21
Figura 5.1 – Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica (para $M = 20$)
e a solução puramente numérica via NDSolve (linhas tracejadas na cor
preta) para a variação da temperatura adimensional ao longo do tempo em
diferentes posições, $x_1 = 0, 0.5, 0.75 \ e \ 1. \ Bic_1 = 1057$
Figura 5.2 – Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica (para $M = 20$)
e a solução puramente numérica via NDSolve (linhas tracejadas na cor
preta) para a variação da temperatura adimensional ao longo do tempo em
diferentes posições, $x_1 = 0, 0.5, 0.75 \ e \ 1. \ Bic_1 = 10058$
Figura 5.3 – Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica (para $M = 20$)
e a solução puramente numérica via NDSolve (linhas tracejadas na cor
preta) para a variação da temperatura adimensional ao longo do tempo em
diferentes posições, $x_1 = 0, 0.5, 0.75 \ e \ 1. \ Bic_1 = 1$
Figura 5.4 – Gráfico da posição da interface adimensional $v[\tau_3]$ versus tempo
adimensional $ au_3$. Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica
GITT ($M = 20$) (linha contínua na cor preta) e o método de perturbação
proposto por TABAKOVA et al. (2010) (linha tracejada na cor vermelha)
para $Bic_3 = 1$, $St = 0.01$

- Figura 5.11 Gráfico da temperatura no centro da gotícula T(0,t) versus tempo t. Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica GITT (M = 60)

- Figura 5.16 Gráfico fluxo de calor q(t) versus tempo t. Comparação entre os fluxos de calor para convecção (cor preta e linha sólida), radiação (cor azul e linha tracejada) e resfriamento evaporativo (cor vermelha e linha pontilhada). Para R=0.78 mm, $T_{\infty}=-19$ °C, $T_n=-18.4$ °C e v=0.42 m/s.....79

Lista de Tabelas

Tabela 5.1 – Dados de entrada adimensionais para a simulação de condução de calor
em uma gota esférica sem mudança de fase56
Tabela 5.2 – Valores adimensionais da temperatura $U_l(x_l, \tau_l)$ no centro, no interior e
na superfície da gotícula para $\tau_1 = 0.5$, com diferentes valores de $M \dots 56$
Tabela 5.3 – Valores adimensionais da temperatura $U_1(x_1, \tau_1)$ no centro, no interior e
na superfície da gotícula para $\tau_1 = 0.01$, com diferentes valores de M
Tabela 5.4 – Valores do tempo de congelamento da gotícula e da temperatura na
superfície da gotícula $U_3(y_3, \tau_3)$ para $Bic_3=1$ e $St = 0.01$, com diferentes
valores da ordem de truncamento <i>M</i> 60
Tabela 5.5 – Valores do tempo de congelamento da gotícula e da temperatura na
superfície da gotícula $U_3(y_3, \tau_3)$ para $Bic_3=10$ e $St = 0.01$, com diferentes
valores da ordem de truncamento M60
Tabela 5.6 – Valores do tempo de congelamento da gotícula e da temperatura na
superfície da gotícula $U_3(y_3, \tau_3)$ para $Bic_3=1$ e St =0.1, com diferentes
valores da ordem de truncamento M60
Tabela 5.7 – Propriedades físicas utilizadas na validação. As propriedades da água e
do gelo foram avaliadas a 0 °C. As propriedades do ar foram avaliadas a -
19 °C
Tabela 5.8 – Parâmetros adimensionais para cálculo dos coeficientes de calor por
convecção (h) e massa (h_m)
Tabela 5.9 – Valores da temperatura da gotícula $T[r, t]$ em °C, para diferentes valores
da ordem de truncamento M. Para R=0.78mm, T_{∞} =-19 °C, T_n =-18.4 °C e
<i>v</i> =0.42 m/s68
Tabela 5.10 – Valores do tempo (t) necessário para alcançar a temperatura de
nucleação, para diferentes valores da ordem de truncamento M. Para
<i>R</i> =0.78mm, T_{∞} =-19 °C, T_n =-18.4 °C e v=0.42 m/s. Tempo foi medido em
segundos69
Tabela 5.11 – Valores do tempo de congelamento da gotícula e da temperatura na
superfície da gotícula para a etapa de solidificação, considerando a
formação de uma casca solidificada. Para R=0.78mm, T_{∞} =-19 °C, T_n =-
18.4 °C e v=0.42 m/s72

- Tabela 5.13 Valores da temperatura da gotícula T[r, t] em °C, para diferentes valores de *M*. Para *R*=0.78mm, T_{∞} =-19 °C, T_n =-18.4 °C e *v*=0.42 m/s..74 Tabela 5.14 Parâmetros dos casos estudados na análise da influência do número de

Lista de Símbolos

$a_1[au_1]$	Coeficiente do problema filtro para etapa 1
$b_1[au_1]$	Coeficiente do problema filtro para etapa 1
$a_3[au_3]$	Coeficiente do problema filtro para etapa 3
$b_3[au_3]$	Coeficiente do problema filtro para etapa 3
a4[t4]	Coeficiente do problema filtro para etapa 4
$b_4[au_4]$	Coeficiente do problema filtro para etapa 4
Bic ₁	Grupo adimensional para convecção – Etapa 1
Bim ₁	Grupo adimensional para resfriamento evaporativo – Etapa 1
Bir ₁	Grupo adimensional para radiação – Etapa 1
Bic ₃	Grupo adimensional para convecção – Etapa 3
Bim ₃	Grupo adimensional para resfriamento evaporativo – Etapa 3
Bir ₃	Grupo adimensional para radiação – Etapa 3
Bic ₄	Grupo adimensional para convecção – Etapa 4
Bim ₄	Grupo adimensional para resfriamento evaporativo – Etapa 4
Bir ₄	Grupo adimensional para radiação – Etapa 4
\mathcal{C}_g	Calor específico do gelo
Cl	Calor específico da água
$F_1[x_1,\tau_1]$	Problema filtro para etapa 1
$F_3[x_3, \tau_3]$	Problema filtro para etapa 3
$F_4[x_4, au_4]$	Problema filtro para etapa 4
h	Coeficiente de transferência de calor por convecção
h_m	Coeficiente de transferência de massa
kg	Condutividade térmica do gelo
k_l	Condutividade térmica da água
L	Calor latente de fusão da água
L_e	Calor latente de evaporação da água

L_m	Calor latente de fusão da mistura água/gelo
L_s	Calor latente de sublimação da água
$N_{I}[au_{I}]$	Norma para etapa 1
$N_3[\tau_3]$	Norma para etapa 3
$N_4[au_4]$	Norma para etapa 4
Pr	Número de Prandtl
q_c	Fluxo de calor para convecção
q_m	Fluxo de calor para resfriamento evaporativo
q_r	Fluxo de calor para radiação
R	Raio da gotícula
Re	Número de Reynolds
$R_{ m ini}$	Posição inicial da frente de solidificação após a recalescência
r	Variável na direção radial
s(t)	Posição da frente de solidificação
Sc	Número de Schimdt
Sh	Número de Sherwood
St	Número de Stefan
t	Variável temporal
t_2	Tempo após a etapa de recalescência
t_3	Tempo após a etapa de solidificação
T_c	Temperatura de congelamento
$T_{\rm d}(r)$	Distribuição de temperatura na gotícula após a solidificação
$T_{\rm g}(r,t)$	Temperatura do gelo
$T_{ m ini}$	Temperatura inicial
$T_{\rm l}(r,t)$	Temperatura da água
T_n	Temperatura de nucleação
T_o	Temperatura inicial

T_∞	Temperatura da corrente de ar
<i>U</i> 1,0	Temperatura inicial adimensional para etapa 1
$U_1[x_1, \tau_1]$	Temperatura adimensional para etapa 1
$U_3[x_3, au_3]$	Temperatura adimensional para etapa 3
$U_4[x_4, au_4]$	Temperatura adimensional para etapa 4
V	Velocidade da corrente de ar
V_{dp}	Volume da gotícula
V_g	Volume de gelo após a recalescência
x_1	Coordenada espacial adimensional para etapa 1
<i>x</i> ₃	Coordenada espacial adimensional para etapa 3
X4	Coordenada espacial adimensional para etapa 4
<i>У</i> 3	Coordenada espacial adimensional para etapa 3

SÍMBOLOS GREGOS

3	Emissividade
δ_{ij}	Delta de Kronecker
$\eta(au_3)$	Posição adimensional da frente de solidificação para a etapa 3
$ heta_1[x_1, au_1]$	Temperatura adimensional em coordenadas planas para etapa 1
$\theta_3[x_3, au_3]$	Temperatura adimensional em coordenadas planas para etapa 3
$ heta_4[x_4, au_4]$	Temperatura adimensional em coordenadas planas para etapa 4
$\theta_1^*[x_1, au_1]$	Potencial filtrado para etapa 1
$\theta_3^*[x_3, au_3]$	Potencial filtrado para etapa 3
${ heta_4}^*[x_4, au_4]$	Potencial filtrado para etapa 4
$\overline{\theta_l}^*[\tau_l]$	Potencial transformado para etapa 1
$\overline{\theta_3}^*[\tau_3]$	Potencial transformado para etapa 3
$\overline{\theta_4}^*[\tau_4]$	Potencial transformado para etapa 4
μ_1	Autovalor para etapa 1

μ_3	Autovalor para etapa 3
μ_4	Autovalor para etapa 4
$v(\tau_3)$	Posição adimensional da frente de solidificação para a etapa 3
$ ho_{ m g}$	Massa específica do gelo
$ ho_1$	Massa específica da água
$ ho_{ m v,o}$	Massa específica do vapor na temperatura de 273 K
$ ho_{ m vg,s}$	Massa específica do vapor na superfície da gotícula sólida
$ ho_{\mathrm{vg},\infty}$	Massa específica do vapor no ar para gotícula sólida
$ ho_{ m vl,s}$	Massa específica do vapor na superfície da gotícula líquida
$ ho_{\mathrm{vl},\infty}$	Massa específica do vapor no ar para gotícula líquida
σ	Constante de Stefan-Boltzmann
$ au_{I}$	Tempo adimensional para etapa 1
$ au_3$	Tempo adimensional para etapa 3
$ au_4$	Tempo adimensional para etapa 4
ϕ	Fração de líquido na mistura água/gelo
Ψ_1	Autofunção para etapa 1
Ψ_3	Autofunção para etapa 3
Ψ_4	Autofunção para etapa 4

Subscritos

a	Ar
с	Congelamento
g	Gelo
1	Líquido
n	Nucleação
v	Vapor
0	Ponto inicial
1	Etapa 1 (etapa de super-resfriamento)
3	Etapa 3 (etapa de solidificação)
4	Etapa 4 (etapa de resfriamento)

1. Introdução

1.1 Motivação e objetivos

Problemas que envolvem a solidificação de gotículas encontram aplicação em diversas áreas da engenharia e da indústria. No processo de cristalização por spray ("Spray crystallization") por exemplo, a temperatura de transição e o tempo de congelamento de gotículas super-resfriadas são parâmetros que influenciam diretamente as propriedades dos produtos obtidos. A cristalização por spray é um processo utilizado na indústria alimentícia para produção de determinados tipos de alimentos, que consiste na solidificação de um líquido através de sua atomização em uma atmosfera fria. Através do acompanhamento dos parâmetros citados, é possível otimizar os requisitos de refrigeração e antecipar a microestrutura das gotículas solidificadas, garantindo a qualidade dos produtos (HINDMARSH et al., 2003; ALVIM et al., 2013). A cristalização por spray também é utilizada pela indústria farmacêutica para produção de medicamentos de liberação controlada (ANAL, 2007; LEUENBERGER, 2001). Neste processo, o princípio ativo é misturado a um carreador, para que o medicamento, quando ingerido, possa ser liberado gradativamente dentro do corpo humano. Os materiais ativos, sólidos à temperatura ambiente, são liquefeitos e depois de misturados a uma solução do material carreador, são atomizados e lançados em uma atmosfera de baixa temperatura para formação das micropartículas (JUNIOR, 2013).

No campo da meteorologia, a formação de gelo em nuvens convectivas é diretamente associada ao congelamento de gotículas de água super-resfriadas presentes na atmosfera. Os cristais de gelo presentes nas nuvens têm influência em diferentes processos físicos relacionados à nossa atmosfera, tais como precipitação, radiação e eletricidade (COSTA *et al.*, 2012). O fenômeno da formação de gelo em nuvens é, ainda hoje, um dos maiores desafios para confiabilidade de modelos numéricos para previsão do tempo, sendo um dos motivos o fato de que esses modelos consideram o congelamento das gotículas como um processo instantâneo. No entanto, estudos recentes apontam que o tempo de congelamento das gotículas é vinculado à distribuição espacial das partículas de gelo presentes nesse tipo de nuvem, e por isso é um fator a ser considerado na simulação de condições atmosféricas (YANG, 2018).

O tempo de congelamento de gotículas de água super-resfriadas também é um parâmetro muito importante no estudo de revestimentos de superfícies para evitar o

acúmulo de gelo. O acúmulo de gelo em superfícies expostas a condições atmosféricas adversas é um fenômeno encontrado nas mais diversas áreas de atividade humana. Camadas de gelo podem se formar em navios, turbinas eólicas, linhas de transmissão de energia, plataformas de petróleo, e etc. Muitas vezes a acumulação por gelo tem efeitos indesejáveis sobre essas atividades, sendo que mesmo uma pequena camada de gelo formada pode causar danos catastróficos, como por exemplo a queda de linhas de transmissão de energia, o rompimento de tubulações e condições de voo perigosas para aviões (MISHCHENKO *et al.*, 2010).

A indústria aeronáutica é particularmente afetada por esse problema devido às condições ambientais extremas em que as aeronaves operam. O acúmulo de gelo nas asas pode reduzir a força de sustentação e o ângulo de sustentação máxima, e além disso, pode aumentar a força de arrasto e a velocidade de estol (CAO et al., 2018). A presença de gelo em outros componentes, como no sistema de propulsão ou entradas de ar, reduzem a eficiência destes sistemas, e gelo em sensores aeronáuticos como tubos de Pitot, podem causar erros de leitura por parte desses instrumentos (GENT et al., 2000). Entre 1986 e 1996 a Organização Internacional da Aviação Civil (ICAO sigla em inglês) registrou 42 acidentes aeronáuticos envolvendo a formação de gelo (CAO et al., 2018). Em 2009, ocorreu o trágico acidente do voo AF 447 que vitimou 228 pessoas, por uma sequência de eventos iniciada pelo congelamento simultâneo das sondas Pitot da aeronave AIRBUS A-330 que percorria o trecho Rio de Janeiro-Paris, após o registro de 11 eventos semelhantes anteriores relatados por pilotos da Air France tão somente. O comportamento térmico do sistema anti-gelo de sondas Pitot e os mecanismos de formação de gelo foram recentemente estudados pelo grupo de pesquisas do LTTC e NIDF, PEM-COPPE, UFRJ (SOUZA et al., 2012; BIGDOLI, 2013; LISBOA et al., 2013; SOUZA, 2014; BIGDOLI et al., 2015; SOUZA et al., 2015; SOUZA et al., 2016; LISBOA, 2015; COTTA et al., 2015; COTTA et al., 2016), incluindo o projeto e construção de um túnel de vento climático para experimentos de formação de gelo e voos de ensaio em aeronaves Skyhawk A4 da Marinha do Brasil, que permitiram a validação dos modelos teóricos propostos.

Os métodos de prevenção à formação de gelo atuais apresentam como desvantagem a necessidade do consumo contínuo de energia e/ou consumíveis, acarretando custos adicionais para a operação dos sistemas afetados. Com o intuito de reduzir a energia consumida e os respectivos custos envolvidos, alguns pesquisadores voltaram sua atenção para métodos passivos de prevenção à formação de gelo, dentre os quais podemos citar o revestimento das superfícies expostas a esse fenômeno com

materiais super-hidrofóbicos ou comumente chamados gelofóbicos (JUNG et al., 2011; JUNG et al., 2012; EBERLE et al., 2014; MAITRA et al., 2014; KELEY et al., 2014). Os revestimentos gelofóbicos são estruturados com o objetivo de minimizar as forças de adesão do gelo com a superfície, para que depois de formada, a camada de gelo possa ser removida da superfície passivamente por forças como a gravidade ou o arrasto aerodinâmico. Enquanto os revestimentos gelofóbicos tem como objetivo facilitar a remoção da camada de gelo, os revestimentos super-hidrofóbicos têm como objetivo evitar a formação dessas camadas. Em comparação a um material comum, um material hidrofóbico é capaz de reduzir as forças de adesão com a água, e também causar um aumento do tempo necessário para o congelamento de gotículas em contato com essas superfícies. Essas duas características permitem que as gotículas que se encontram na superfície revestida sejam removidas por forças gravitacionais ou aerodinâmicas, evitando assim a formação de gelo sobre a superfície. Com o crescente interesse em diferentes tipos de revestimentos super-hidrofóbicos para mitigação do acúmulo de gelo, o teste do tempo necessário para o congelamento de uma gotícula de água sobre essas superfícies se tornou um método comum para avaliação da capacidade anticongelante desses revestimentos (CHAUDHARY AND LI, 2014).

O processo de congelamento de gotículas super-resfriadas pode ser divido em quatro etapas (MIYAWAKI et al., 1989; HINDMARSH et al., 2003; CHAUDHARY AND LI, 2014; JUNG et al., 2011). Em um primeiro momento, conhecido como etapa de super-resfriamento, a gotícula se resfria da temperatura inicial até a temperatura na qual se dá início a nucleação dos cristais de gelo. Essa etapa é caracterizada pelo problema convectivo-difusivo transiente no interior da gotícula que envolve convecção, radiação e resfriamento evaporativo na superfície da gotícula. Na segunda etapa, chamada de etapa recalescente, o calor latente liberado na nucleação dos cristais aumenta de forma quase instantânea a temperatura da gotícula. Este aumento eleva a temperatura da gotícula da temperatura onde se iniciou a nucleação (T_n) , até uma temperatura de equilíbrio termodinâmico, onde se dará prosseguimento ao congelamento da gotícula, com o crescimento dos cristais formados na etapa anterior até que a gotícula esteja totalmente solidificada. A etapa caracterizada pelo crescimento dos cristais, é a terceira etapa do processo, chamada de etapa de solidificação. Um desenho esquemático desta etapa pode ser visto na Figura 1.1. A solidificação da gotícula envolve a solução do problema convectivo-difusivo com contorno móvel devido a mudança de fase, conhecido de forma geral na literatura como problema de Stefan. No problema de Stefan para o caso do congelamento de uma gotícula esférica imersa em ar frio, o contorno móvel, também chamado de frente de solidificação, se move da superfície externa da gotícula em direção ao centro, liberando calor latente. Os problemas de Stefan podem ser de uma ou duas fases. No problema de uma fase, a condução de calor só acontece em uma das fases, enquanto a outra fase permanece à temperatura constante e igual à temperatura de equilíbrio para o congelamento. Caso a condução do calor liberado na frente de solidificação ocorra em ambas as fases, o problema é chamado de problema de Stefan de duas fases. Na etapa de resfriamento, a quarta do processo, a gotícula já solidificada é resfriada até alcançar a temperatura do ar externo. O equacionamento matemático desta etapa é similar ao da etapa de super-resfriamento.



Figura 1.1: Desenho esquemático da solidificação de gotículas de água imersas em uma corrente de ar. As setas em azul indicam a direção de propagação da frente de solidificação.

No contexto de metodologias para solução de problemas de contorno móvel, técnicas híbridas numérico-analíticas vêm ganhando especial atenção na literatura cientifica. A Técnica da Transformada Integral Generalizada (sigla em inglês GITT) é uma dessas técnicas híbridas, e tem sido utilizada com sucesso na solução de problemas convectivos-difusivos (COTTA, 1990; 1993; 1994; 1998; COTTA & MIKHAILOV, 1997; COTTA & MIKHAILOV, 2006; COTTA *et al.*, 2017), incluindo problemas térmicos com contornos móveis (COTTA, 1986; RUPERTI JR *et al.*, 1992; DINIZ *et al.*, 1990; SIAS, 2009; MONTEIRO *et al.*, 2011). Essa técnica oferece uma boa relação precisão/custo computacional, tipicamente vista em métodos puramente analíticos, mas apresentando a flexibilidade para solução de problemas diferenciais parciais não-lineares, característica de métodos numéricos (COTTA *et al.*, 2018). Além disso, recentes avanços na GITT permitiram o uso de técnicas para aceleração da convergência em problemas complexos (geometria complexas, condições de contorno não-lineares e etc.), garantido

a precisão dos resultados e diminuindo o custo computacional (COTTA *et al.*, 2018). Dentre esses avanços podemos citar a metodologia adotada por COTTA *et al.* (2015) e COTTA *et al.* (2016), onde as não-linearidades relativas às condições de contorno de problemas convectivo-difusivos são incorporadas ao problema de autovalor adotado na transformação integral. Essa abordagem apresentou um ganho de convergência significativo quando comparada à abordagem clássica da GITT, além de apresentar um comportamento de convergência uniforme em todo domínio de solução, mesmo em posições próximas aos contornos não-lineares (COTTA *et al.*, 2016).

O objetivo deste trabalho é a aplicação da GITT na solução do problema de solidificação de gotículas de água super-resfriada envoltas em uma corrente de ar frio, com o propósito de permitir o uso da simulação computacional na análise de processos que envolvam este fenômeno. As gotículas foram consideradas livres no ar, sem contato com nenhum tipo de superfície, mantendo sua forma esférica durante todo o processo. As equações foram escritas em coordenadas esféricas para uma dimensão, já que a simetria do problema permitiu esta simplificação. Foram analisadas as quatro etapas do processo: etapa de super-resfriamento, etapa recalescente, etapa de solidificação e etapa de resfriamento do sólido. Na etapa de solidificação, foi resolvido o problema de Stefan de uma fase, considerando a condução de calor somente na fase sólida. Para cada uma das etapas, exceto a etapa recalescente, a GITT foi aplicada na obtenção da variação de temperatura com a posição e com o tempo, e na obtenção do tempo de duração destas mesmas etapas. Neste trabalho a metodologia apresentada por COTTA et al. (2016), é pela primeira vez aplicada a problemas de contorno móvel. O problema é formulado em coordenadas esféricas com convecção, radiação e resfriamento evaporativo atuantes nas condições de contorno do problema. Para acelerar a convergência da solução, filtros implícitos foram utilizados para homogeneizar a condição de contorno de terceiro tipo, relativa à troca térmica na superfície da gotícula.

1.2 Organização do trabalho

No Capítulo 2 foi realizada uma revisão da literatura em relação ao tema abordado e às metodologias utilizadas neste trabalho. Os conceitos básicos envolvendo o congelamento de gotículas são apresentados, bem como soluções analíticas e numéricas reportadas anteriormente para solução dessa classe de problemas. No Capítulo 3 foi apresentada a descrição do problema físico e a respectiva formulação matemática relacionada ao congelamento de uma gotícula de água super-resfriada imersa em uma corrente de ar frio.

No Capítulo 4 é demonstrada a metodologia utilizada para solução de cada etapa do problema de congelamento, com o intuito de obter o tempo de congelamento e a distribuição da temperatura na gotícula.

No Capítulo 5 os resultados obtidos através da aplicação da GITT no problema de congelamento são exibidos. Os resultados via GITT são comparados com resultados analíticos, numéricos e experimentais presentes na literatura. Uma análise de influência de alguns parâmetros físicos no tempo de congelamento e a distribuição da temperatura na gotícula também é realizada.

No Capítulo 6 são apresentadas as conclusões deste trabalho baseadas nos resultados obtidos. Além disso melhorias no modelo são sugeridas, bem como propostas para estudos futuros.

2. Revisão Bibliográfica

Este capítulo foi dividido em três tópicos principais e consiste em uma revisão bibliográfica abordando como foram tratados pela literatura os principais assuntos relacionados ao presente trabalho. O primeiro tópico discorre sobre alguns dos trabalhos realizados sobre o fenômeno da solidificação de uma gotícula de líquido. O segundo tópico apresenta o método GITT e os estudos relacionados à aceleração da convergência desta técnica. O terceiro tópico apresenta os trabalhos onde a GITT foi aplicada em problemas envolvendo mudança de fase e contorno móvel.

2.1 Solidificação de gotículas de água

O processo de solidificação de uma gotícula envolve a condução de calor em seu interior, a troca térmica entre a gotícula e o ambiente externo e uma fronteira móvel que separa as fases líquida e sólida, também conhecida como frente de solidificação. Problemas deste tipo são geralmente conhecidos como problemas de Stefan, e sendo assim, o congelamento de uma gotícula pode ser descrito como um problema de Stefan para uma esfera, com uma fronteira que se move de sua superfície exterior em direção ao seu centro. Devido às inúmeras aplicações que envolvem o congelamento de gotículas, como por exemplo a técnica de cristalização por *spray* utilizada nas indústrias alimentícia e farmacêutica, vários trabalhos foram desenvolvidos ao longo dos anos para a solução do problema de Stefan relacionados a este fenômeno. Muitos dos trabalhos iniciais sobre este assunto se concentraram na utilização métodos de perturbação para obter soluções aproximadas para o problema de Stefan de uma fase, considerando as gotículas inicialmente na temperatura de congelamento (PEDROSO & DOMOTO (1973), RILEY *et al.* (1974), STEWARTSON & WAECHTER (1973), SOWARD (1980), DAVIS & HILL 1982).

Dando continuidade a estes trabalhos, FEUILLEBOIS *et al.* (1995) analisaram o problema de Stefan de uma fase, considerando o congelamento de gotículas líquidas sujeitas ao super-resfriamento. O método de perturbação foi utilizado para obter a evolução da frente de solidificação em função do tempo. A superfície da gotícula foi mantida a temperatura constante e igual ao ambiente externo, e a mudança da massa específica sólido/líquido não foi considerada. Os autores postularam três hipóteses para a localização do gelo formado durante a nucleação:

- I. no centro da gotícula;
- II. homogeneamente distribuído na gotícula;
- III. na superfície externa à gotícula.

O método utilizado para solução do problema de Stefan foi comparado à solução por um método numérico, e os resultados apresentaram boa concordância entre si, exceto na região próxima ao centro da gotícula, onde o método utilizado pelos autores divergiu quando as hipóteses II e III foram analisadas. Os resultados obtidos pelas hipóteses I, II e III apresentaram resultados muito próximos, sendo que o resultado para a hipótese II ficou entre os resultados obtidos pelas hipóteses I e III.

Em seu trabalho, HINDMARSH *et al.* (2003) foram capazes de medir experimentalmente o tempo de congelamento de uma gotícula utilizando o aparato experimental mostrado na Figura 2.1. Gotículas de água foram suspensas por um termopar em meio a uma corrente de ar frio, e uma câmera de vídeo capaz de capturar pequenas imagens gravou todo o processo de solidificação. A ponta do termopar foi posicionada próxima ao centro das gotículas para medição da temperatura, como pode ser visto na Figura 2.2. O tempo de congelamento foi obtido para diversos valores de temperatura ambiente, tamanho de gotícula e velocidade da corrente de ar. A mudança abrupta na temperatura medida pelo termopar e a alteração na opacidade da gotícula capturada pelas imagens da câmera, possibilitaram aos autores determinarem experimentalmente a temperatura de nucleação das gotículas para cada cenário estudado. Os valores medidos para as temperaturas de nucleação foram utilizados posteriormente nos modelos numéricos, dada a natureza estocástica deste parâmetro.



Figura 2.1: Aparato experimental utilizado para analisar a solidificação de gotículas de água. Fonte: HINDMARSH *et al.* (2003).



Figura 2.2: Gotícula de água suspensa por termopar. Adaptado de HINDMARSH et al. (2003).

Para o estudo numérico foi considerado que a gotícula mantém seu formato esférico e seu volume constantes, e por isso as equações podem ser analisadas em uma única dimensão espacial. Cada uma das quatro etapas do processo foi analisada separadamente: i) etapa de super-resfriamento; ii) etapa recalescente; iii) etapa de solidificação; iv) etapa de resfriamento. A etapa de solidificação foi resolvida considerando o problema de Stefan de duas fases. Foram considerados dois modelos diferentes em relação à distribuição interna de temperatura nas gotículas, um considerando a condução de calor transiente (com contorno móvel na etapa de solidificação), e outro considerando que a temperatura das gotículas é uniforme. Ambos os modelos foram analisados tanto para a suposição de que as propriedades da água/gelo se mantinham constates, quanto para a suposição de que essas propriedades eram variáveis com a temperatura. O modelo considerando condução de calor na gotícula foi resolvido através do método das diferenças finitas, enquanto o modelo que considera a gotícula com temperatura uniforme foi resolvido através do balanço de energia entre o calor removido pelo ambiente externo e o calor latente/sensível liberado pela gotícula. As soluções obtidas pelos modelos numéricos foram comparadas aos resultados experimentais, e cada etapa do processo foi analisada individualmente. Para cada uma das etapas, o modelo que apresentou menor desvio em relação aos resultados experimentais foi escolhido para o cálculo do tempo de duração da respectiva etapa. Agrupando os modelos escolhidos foi possível montar um gráfico temperatura versus tempo representado como mostrado na Figura 2.3.

Para a etapa de super-resfriamento do líquido, o modelo de temperatura uniforme com propriedades constantes apresentou o melhor resultado, já para a etapa de resfriamento da gotícula solidificada, o modelo de temperatura uniforme com propriedades variáveis obteve melhor concordância com o resultado experimental. Para a etapa de solidificação com condução de calor, foram consideradas as mesmas três hipóteses para a formação de gelo na etapa de recalescência descritas no trabalho de FEUILLEBOIS *et al.* (1995). No caso desta etapa, o modelo que apresentou melhor resultado foi o modelo de condução de calor com fronteira móvel considerando a formação de gelo no centro das gotículas. No entanto HINDMARSH *et al.* (2003) ponderam que o modelo de temperatura uniforme apresentou resultados muito próximos ao modelo de condução de calor, e devido ao menor esforço computacional envolvido neste método, ele foi escolhido para o cálculo do tempo da etapa de solidificação.



Figura 2.3: Exemplo de gráfico temperatura no centro da gotícula versus tempo, obtido por HINDMARSH *et al.* (2003). 1) Etapa de super-resfriamento. 2) Etapa recalescente. 3) Etapa de solidificação. 4) Etapa de resfriamento. Adaptado de HINDMARSH *et al.* (2003).

MCCUE *et al.* (2008) estudaram o problema de Stefan de duas fases relacionado à solidificação em esferas. O método de perturbação foi aplicado para baixos números de Stefan (note que MCCUE *et al.* (2008) utilizam o número de Stefan invertido). O tempo de congelamento e a distribuição de temperatura em ambas as fases foram obtidos considerando-se o problema unidimensional e uma condição de contorno de primeiro tipo na superfície externa da esfera. Uma importante conclusão deste estudo foi que, para as condições estudadas, a influência da fase líquida no processo de solidificação pode ser desprezada.

TABAKOVA *et al.* (2010) estenderam o trabalho de FEUILLEBOIS *et al.* (1995) para o caso em que as gotículas de água super-resfriadas estão sujeitas a convecção térmica em sua superfície. Novamente o problema de Stefan de uma fase foi resolvido pelo método de perturbação, considerando baixos números de Stefan. A influência da convecção no processo de congelamento foi avaliada através do número de Biot. Assim como no trabalho apresentado por FEUILLEBOIS *et al.* (1995), a solução obtida diverge quando se aproxima do núcleo da gotícula. Fora dessa região o resultado obtido apresentou boa concordância com o resultado numérico ao qual foi comparado. Como esperado, os resultados obtidos demonstraram uma influência significativa do número de Biot na transferência de calor dentro da gotícula.

Com o aumento do interesse na aplicação de revestimentos hidrofóbicos para mitigação da formação de gelo, vários trabalhos também vêm sendo realizados sobre o congelamento de gotículas de água depositadas em superfícies (POPOV *et al.* (2005), TOURKINE *et al.* (2009), JUNG *et al.* (2011), JUNG *et al.* (2012)). Muitos desses estudos tiveram como ponto de partida os trabalhos já realizados sobre o congelamento de gotículas de água suspensas, já que muitas conclusões obtidas através destes trabalhos se estendem para o caso de congelamento de gotículas de água sobre superfícies sólidas. CHAUDHARY & LI (2014) estudaram numericamente o congelamento de gotas estáticas sobre superfícies submetidas a um resfriamento rápido e com diferentes ângulos de contato. Assim como feito no trabalho de HINDMARSH *et al.* (2003), o processo de solidificação foi divido em quatro etapas distintas. Os modelos em 2D foram resolvidos através do método dos elementos finitos e experimentos foram conduzidos para comparação com a análise numérica. Os valores comparados apresentaram resultados satisfatoriamente próximos.

2.2 Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT)

Apesar de apresentarem a vantagem de fornecer soluções exatas para problemas envolvendo equações diferenciais, as técnicas analíticas são capazes de resolver somente problemas de modelagem matemática relativamente simples. Com o objetivo de resolver problemas mais complexos, diferentes métodos híbridos numérico-analíticos vêm sendo desenvolvidos, como por exemplo a Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) (COTTA, 1990; 1993; 1994; 1998) (COTTA & MIKHAILOV, 1997; 2006). Esta técnica tem raízes no método analítico de separação de variáveis e na Técnica da Transformada Integral Clássica (CITT) (MIKHAILOV & OZISIK, 1984; OZISIK, 1993).

Nas duas últimas décadas, o método clássico da transformada integral (MIKHAILOV e OZISIK (1984)) foi progressivamente generalizado sob um enfoque híbrido numérico-analítico (COTTA (1990), COTTA (1993), COTTA (1994), COTTA e MIKHAILOV (1997), COTTA (1998), COTTA *et al.* (2018)). A Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) oferece precisão controlada e implementação computacional eficiente para uma grande variedade de problemas não-transformáveis, incluindo as formulações não-lineares mais usuais em aplicações em mecânica dos fluidos e transferência de calor. Além de ser ele próprio um método computacional alternativo, esse método híbrido é particularmente adequado para propósitos de *benchmark* (validação). Em face da possibilidade de controle automático do erro, o método retém características de uma solução puramente analítica. Além do

controle e estimativa de erro bem simples, outro aspecto notável desse método é a extensão direta para situações multidimensionais, com apenas um moderado aumento do esforço computacional. Outra vez, a natureza híbrida é responsável por esse comportamento, uma vez que a parte analítica do procedimento de solução é empregada sobre todas menos uma variável independente, e a tarefa numérica é sempre reduzida à integração de um sistema diferencial ordinário nessa única variável independente restante (ALMEIDA, 2017).

Problemas de difusão e convecção-difusão não-lineares, tiveram solução proposta através da GITT por COTTA (1990). Os termos não-lineares presentes nos operadores diferenciais da equação principal e das equações de condição de contorno, foram agrupados nos respectivos termos fonte. Sendo assim, o problema se torna um problema com operadores diferenciais lineares, mas com termos fonte não-lineares, o que nos permite utilizar operadores lineares na escolha do problema de autovalor auxiliar. O potencial é então representado através de uma expansão que tem como base as autofunções obtidas através deste problema de autovalor auxiliar linear.

Para melhoria do desempenho computacional do método e a solução de eventuais problemas de convergência causados pelas não-linearidades presentes nos termos fonte, algumas soluções filtro foram propostas. MIKHAILOV & COTTA (1998) fizeram o uso de filtros implícitos na solução de problemas de condução de calor com condições de contorno não-lineares em placas planas. MATT (2013) resolveu o problema de vibrações transversais em vigas com excentricidade de massa através da aplicação de filtros implícitos polinomiais juntamente com a GITT.

Apresentando uma nova abordagem, COTTA *et al.* (2015, 2016) incorporaram os operadores diferenciais não-lineares ao problema de autovalor auxiliar. O problema auxiliar não-linear pode também ser transformado, e depois resolvido simultaneamente ao sistema de equações diferenciais ordinárias proveniente do problema original. Para ilustrar o procedimento, esta técnica foi aplicada a um problema de condução com condições de contorno não-lineares. A solução então foi comparada com a metodologia mais usual da GITT descrita nos parágrafos acima, e o resultado demonstrou que a nova abordagem obteve uma convergência melhor do que a metodologia tradicional.

2.3 GITT aplicada à problemas de contorno móvel

Estudos que aplicaram a GITT para análise de processos de mudança de fase com contornos móveis, tema principal do presente trabalho, também podem ser encontrados na literatura (COTTA (1986); RUPERTI JR & COTTA (1991); RUPERTI JR *et al.* (1992); RUPERTI JR *et al.* (1998); SIAS *et al.* (2007); SIAS *et al.* (2009); MONTEIRO *et al.* (2011)).

DINIZ *et al.* (1990) analisaram o problema ablativo unidimensional em placas planas com fluxo de calor prescrito na condição de contorno. Três tipos de fluxo de calor foram analisados: fluxo constante, fluxo com variação linear no tempo e fluxo com variação parabólica no tempo. Os resultados obtidos foram comparados aos resultados encontrados na literatura e apresentaram boa concordância entre si. DINIZ *et al.* (1992) também aplicaram a GITT na solução do problema de ablação para esferas considerando um fluxo de calor prescrito na condição de contorno.

Objetivando a melhoria da convergência da solução via GITT em problemas ablativos, SIAS *et al.* (2007) aplicaram a Técnica do Balanço Integral juntamente com a GITT no problema unidimensional apresentado por DINIZ *et al.* (1990). O resultado obtido mostrou que o emprego da Técnica do Balanço integral conseguiu notável aceleração da convergência quando comparado com a metodologia tradicional da GITT.

SIAS *et al.* (2009) aplicaram a GITT para problemas de ablação com pirólise para geometria plana com fluxo de calor prescrito na condição de contorno. A Técnica das Equações Integrais Acopladas (CIEA) foi utilizada na região afetada pela pirólise. A CIEA proporcionou a simplificação do problema através da redução do número de variáveis independentes.

MONTEIRO *et al.* (2011) estenderam a abordagem híbrida numérico-analítica para a solução de problemas de contorno móvel em duas dimensões espaciais. A GITT foi utilizada na solução do problema de mudança de fase bidimensional de uma substância pura em coordenadas Cartesianas. Um esquema de reordenamento dos autovalores foi utilizado para aceleração da convergência do problema multidimensional. Uma análise física do problema de mudança de fase foi realizada através da variação dos parâmetros físicos que governam o problema, e foi observado que para valores maiores do número de Stefan, maior era a velocidade de avanço do contorno móvel.

Como mencionado no Capítulo 1, o presente trabalho envolve a solução do problema de solidificação de uma gotícula super-resfriada. A troca de calor por radiação

na superfície da gotícula envolve o potencial elevado a quarta ordem, e o termo relativo à troca térmica por resfriamento evaporativo envolve o potencial dentro do expoente de uma função exponencial natural, como será visto no próximo capítulo. A complexidade destes termos inviabiliza a solução analítica deste problema, e a utilização da GITT em detrimento de métodos puramente numéricos possibilita um menor custo computacional e controle de erro mais simples. Como visto nos parágrafos anteriores, o problema de mudança de fase (contorno móvel) por si só já acarreta certa complexidade, e por isso técnicas de aceleração de convergência como a técnica do balanço integral ou o esquema de reordenamento de autovalores vêm sendo utilizadas para melhoria das taxas de convergência da solução via GITT para este tipo de problema. Para garantir a convergência da solução e lidar com os termos não-lineares devido à radiação e o resfriamento evaporativo na superfície da gotícula, foram utilizados no presente trabalho, filtros implícitos juntamente com a metodologia apresentada por COTTA *et al.* (2016), que incorpora os operadores diferenciais não-lineares ao problema de autovalor auxiliar.

3. Formulação Físico-Matemática

Neste capítulo serão discutidos os modelos físicos e a formulação matemática do problema a ser solucionado. Na primeira seção serão descritos os conceitos físicos relacionados ao congelamento de gotículas de água. O processo foi divido em quatro etapas que serão analisadas separadamente. Na segunda parte serão apresentados o equacionamento matemático e as hipóteses consideradas para formulação de cada etapa do problema.

3.1 Problema físico

A mudança de fase da água em seu estado líquido para o estado sólido ocorre através de um processo de cristalização. O processo de cristalização consiste em duas etapas principais, que são a etapa de nucleação e a etapa de crescimento dos cristais. A nucleação é a etapa onde ocorre a formação de novos cristais, podendo ser homogênea, quando não há a influência de partículas sólidas sobre a formação dos cristais, ou heterogênea, quando um sólido pode servir de catalizador da formação dos núcleos. Na etapa de crescimento, os cristais formados na etapa de nucleação servem como um modelo estrutural sobre o qual todo o novo material solidificado é depositado em camadas sucessivas na forma de cristais (KIANI AND SUN, 2001).

Considerando o processo descrito no parágrafo anterior, o congelamento de gotículas de água super-resfriadas vem sendo tratado através de três estágios (ou etapas) na literatura, sendo que um quarto estágio adicional pode ser considerado, descrevendo o resfriamento da gota já congelada até que sua temperatura se iguale à temperatura ambiente (MIYAWAKI *et al.*, 1989) (HINDMARSH *et al.*, 2003) (CHAUDHARY AND LI, 2014) (JUNG *et al.*, 2011). Essas etapas podem ser brevemente descritas como:

- 1) Etapa de super-resfriamento, quando a gotícula, ainda no estado líquido, é resfriada de sua temperatura inicial até uma temperatura abaixo da temperatura de equilíbrio de congelamento, onde se dá início a nucleação. Essa temperatura é conhecida como temperatura de nucleação (T_n) .
- 2) Etapa recalescente, caracterizada pela nucleação dos cristais. Calor latente de fusão é liberado e a gotícula atinge quase instantaneamente a temperatura de equilíbrio para o congelamento (T_c) , retornando assim ao equilíbrio termodinâmico.

- Etapa de solidificação (ou congelamento), onde ocorre o crescimento dos cristais. O crescimento é governado pela troca de calor entre a gotícula e o ambiente externo. Os cristais crescem até que a gotícula esteja completamente congelada.
- Etapa de resfriamento, onde a gotícula solidificada perde calor até que sua temperatura se iguale à do ambiente externo.

As equações que governam o processo de transferência de calor e as propriedades físicas envolvidas são descontínuas entre as etapas, e por isso é necessário que cada uma delas seja avaliada de forma separada e com uma formulação matemática específica (MIYAWAKI *et al.*, 1989) (HINDMARSH *et al.*, 2003) (CHAUDHARY AND LI, 2014).

Durante a nucleação, ou seja, na etapa de recalescência, duas hipóteses serão apresentadas neste trabalho para localização dos cristais de gelo inicialmente formados. Segundo GAO *et al.* (2000), durante o resfriamento, a nucleação ocorre inicialmente na superfície externa da gotícula, já que esta, por estar mais fria que o interior da gotícula, atinge primeiro a temperatura de nucleação. Sendo assim, a primeira hipótese considera a formação de uma casca esférica de gelo, que se propaga com o tempo para o interior da gotícula como indicado na Figura 3.1 (HINDMARSH *et al.*, 2003).



Figura 3.1: Camada de gelo se forma na superfície externa da gotícula, e se propaga na direção indicada pelas setas em azul.

A segunda hipótese considera que a nucleação ocorre de forma homogênea, com os cristais dispersos uniformemente na gotícula, formando uma mistura líquido-sólido,

caracterizada por uma aparência opaca (HINDMARSH *et al.*, 2003) (TABAKOVA *et al.*, 2009).

3.2 Formulação matemática

O objetivo deste trabalho é avaliar o tempo de congelamento de gotícula de água super-resfriada, e sendo assim, como visto no item 3.1, o problema de solidificação será divido em 4 etapas diferentes. As seguintes hipóteses foram feitas para solução do problema:

- As gotículas estão em repouso e imersas em uma corrente de ar, e portanto, sujeitas à convecção forçada;
- As gotículas mantêm seu volume e forma esférica inicial durante todo o processo;
- A análise da transferência de calor será feita em 1D devido à simetria do problema;
- O gelo e a água são substâncias isotrópicas e homogêneas, e suas propriedades são consideradas constantes;
- A mudança da massa específica na interface líquido/gelo será desprezada, assim como o escoamento induzido na fase líquida;
- No final da etapa de recalescência, a temperatura da gotícula será considerada uniforme e igual à temperatura de equilíbrio para o congelamento T_c;
- 7) Durante a etapa de solidificação, a temperatura da fase líquida será considerada constante e igual à T_c. Sendo assim, o calor latente liberado na frente de solidificação será removido através da condução de calor na fase solidificada (Problema de Stefan de uma fase).

O processo de transferência de calor para gotículas de água imersas no ar é governado basicamente por três mecanismos na interface gotícula-ar: convecção, radiação e resfriamento evaporativo (HINDMARSH *et al.*, 2003). Esses três mecanismos serão considerados na modelagem do presente trabalho. Para o grau de super-resfriamento estudado em seu trabalho (T_n entre -3°C e -21°C), HINDMARSH *et al.* (2003) afirmam que o modelo considerando propriedades constantes para a água e o gelo, apresentou bons resultados quando comparados a resultados experimentais. Outros estudos realizados para
análise de congelamento de gotículas de água também utilizam a hipótese de propriedades constantes (FEUILLEBOIS *et al.*, 1995; MCCUE *et al.*, 2008; TABAKOVA, *et al.*, 2010). Como neste trabalho não foram analisados casos com grau elevado de super-resfriamento, o uso da hipótese de propriedades constante é plausível, já que essa hipótese simplifica o modelo matemático e diminui o custo computacional sem que haja comprometimento na acurácia dos resultados obtidos.

3.2.1 Etapa 1: Super-resfriamento

A etapa de super-resfriamento será modelada através da equação da condução de calor unidimensional em coordenadas esféricas, com suas respectivas condições de contorno, como segue abaixo (HINDMARSH *et al.*, 2003):

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 k_l \frac{\partial T_l[r,t]}{\partial r} \right) = \rho_l c_l \frac{\partial T_l[r,t]}{\partial t} \quad para \ 0 < r < R; t > 0 \tag{3.1}$$

$$T_l[r,0] = T_{ini} \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial T_l[r,t]}{\partial r}\Big|_{r=0} = 0$$
(3.3)

$$-k_{l}\frac{\partial T_{l}[r,t]}{\partial r}\Big|_{r=R} = h(T_{l}[R,t] - T_{\infty}) + h_{m}L_{e}(\rho_{vl,s}[T_{l}[R,t]] - \rho_{vl,\infty}) + \varepsilon\sigma(T_{l}^{4}[R,t] - T_{\infty}^{4})$$

$$(3.4)$$

onde $T_l(K)$ é a temperatura do líquido (água), $k_l(W/mK)$ é a condutividade térmica do líquido, $c_l(J/kgK)$ é o calor específico do líquido, $\rho_l(kg/m^3)$ é a massa específica do líquido, t(s) é o tempo, $T_{ini}(K)$ é a temperatura inicial do líquido, $T_{\infty}(K)$ é a temperatura do ar, $h(W/m^2K)$ é a coeficiente de transferência de calor por convecção, $h_m(m/s)$ é o coeficiente de transferência de massa, $\rho_{vl,s}(kg/m^3)$ é a massa específica do vapor de água na superfície da gotícula, $\rho_{vl,\infty}(kg/m^3)$ é a massa específica do vapor de água no ar, $L_e(J/kg)$ é o calor latente de evaporação, ε é a emissividade da superfície da gotícula e σ (W/m^2K^4) é a constante de Stefan-Boltzmann.

Assumindo equilíbrio termodinâmico na interface entre a gotícula e o ar, o vapor de água presente nessa interface deverá estar na mesma temperatura da superfície da gotícula e no estado de saturação. Considerando o vapor como um gás ideal, a equação que representa a dependência de $\rho_{vl,s}$ com a temperatura na superfície da gotícula pode ser obtida através da equação de Clapeyron e da equação da pressão de vapor saturado nessa mesma superfície. Existem vários trabalhos na literatura que apresentaram uma correlação para a variação da pressão de vapor saturado com a temperatura, sendo que um resumo dessas correlações pode ser encontrado em MURPHY & KOOP (2005). A correlação apresentada por BOHREN & ALBRECHT (1998) foi utilizada no presente estudo, visto que essa expressão já havia sido utilizada em outro trabalho para análise do congelamento de gotículas super-resfriadas (HINDMARSH *et al.*, 2004). Através da correlação apresentada por BOHREN & ALBRECHT (1998), obtém-se a seguinte expressão para $\rho_{vl,s}$:

$$\rho_{vl,s}[T_l[R,t]] = \frac{1,323}{T_l[R,t]} \exp\left[19,83 - 5417/T_l[R,t]\right]$$
(3.5)

onde T_l é a temperatura do líquido em Kelvin.

A massa específica do vapor de água no ar, $\rho_{vl,\infty}$, pode ser obtida multiplicandose o lado direito da equação acima pelo valor da umidade relativa do ar, e aplicando o valor para temperatura do ar externo no lugar da temperatura na superfície da gotícula, como demonstrado abaixo:

$$\rho_{\nu l,\infty}[T_{\infty}] = RH\left(\frac{1,323}{T_{\infty}}\exp\left[19,83 - 5417/T_{\infty}\right]\right)$$
(3.6)

onde *RH* representa o valor da umidade relativa do ar, e T_{∞} é a temperatura do ar em Kelvin.

3.2.2 Etapa 2: Recalescência

A etapa recalescente será modelada de acordo com a equação estabelecida por HINDMARSH *et al.* (2003). Esta equação se baseia na seguinte premissa de que o calor necessário para elevar a temperatura da gotícula de T_n para T_c , deve ser igual ao calor latente liberado para formar o volume de gelo produzido pela nucleação. A equação proposta por HINDMARSH *et al.* (2003) é:

$$V_g = V_{dp} c_l \rho_l (T_c - T_n) / (L \rho_g)$$
(3.7)

onde V_g (m^3) é o volume de gelo, V_{dp} (m^3) é o volume da gotícula, c_l (J/kgK) é o calor específico do líquido, T_c (K) é a temperatura de congelamento, T_n (K) é a temperatura de nucleação, L (J/kg) é o calor latente de solidificação, ρ_l (kg/m^3) é a massa específica do líquido, ρ_g (kg/m^3) é a massa específica do gelo.

Conforme discutido no item 3.1, o volume de gelo inicialmente formado será tratado de duas formas. Se for considerada a formação de uma casca esférica na superfície da gotícula, a posição inicial da interface, R_{ini} , será dada pela seguinte fórmula:



Figura 3.2: Posição inicial (Rini) da camada de gelo.

Caso a segunda hipótese seja adotada, ou seja, uma distribuição homogênea do gelo formado na etapa recalescente por toda a gotícula, podemos considerar a mistura água-gelo como uma fase uniforme. Neste caso a posição inicial da interface seria na superfície externa da gotícula, mas o calor latente de fusão *L* seria substituído por um novo valor relativo à mistura água-gelo (TABAKOVA *et al.*, 2009). O novo valor para o calor latente de fusão da mistura *Lm*, seria:

$$L_m = \emptyset L \tag{3.9}$$

onde a fração de líquido presente na mistura, ϕ , é dada pela fórmula abaixo:

$$\phi = 1 - c_l \rho_l (T_c - T_n) / \rho_g L$$
(3.10)

3.2.3 Etapa 3: Solidificação (ou congelamento)

A etapa de solidificação é um problema de condução de calor com fronteira móvel, também conhecido como problema de Stefan. Deverão ser resolvidas, simultaneamente, as equações para a distribuição de temperatura na gotícula e para a posição da frente de solidificação. A equação da posição da frente de solidificação, também conhecida como condição de Stefan, descreve a dependência entre a velocidade da interface e a remoção do calor latente liberado nesta mesma interface (MCCUE *et al.*, 2008). Segundo a hipótese feita no item 3.2, a temperatura da fase líquida se mantém constante e igual à temperatura de congelamento T_c . Sendo assim, será considerada apenas a condução de calor no gelo. Segue abaixo o sistema de equações que regem a condução de calor na fase solidificada (HINDMARSH *et al.*, 2003):

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 k_g \frac{\partial T_g[r, t]}{\partial r} \right) = \rho_g c_g \frac{\partial T_g[r, t]}{\partial t} \quad para \ s[t] < r < R; \ t > t_2$$
(3.11)

$$T_g[r, t_1] = T_c \tag{3.12}$$

$$T_g[s[t], t] = T_c \tag{3.13}$$

$$-k_{g} \frac{\partial T_{g}[r,t]}{\partial r} \bigg|_{r=R} = h \big(T_{g}[R,t] - T_{\infty} \big) + h_{m} L_{s} \left(\rho_{vg,s} \big[T_{g}[R,t] \big] - \rho_{vg,\infty} \right)$$

$$+ \varepsilon \sigma (T_{g}^{4}[R,t] - T_{\infty}^{4})$$
(3.14)

onde T_g (K)é a temperatura do gelo, k_g (W/mK) é a condutividade térmica do gelo, c_g (J/kgK) é o calor específico do gelo, ρ_g (kg/m³) é a massa específica do gelo, t (s) é o tempo, t_2 (s) é o tempo no qual termina a etapa recalescente (etapa 2), T_{∞} (K) é a temperatura do ar, h (W/m²K) é a coeficiente de transferência de calor por convecção, h_m (m/s) é o coeficiente de transferência de massa, $\rho_{vg,s}$ (kg/m³) é a massa específica do vapor de água na superfície da gotícula, $\rho_{vg,\infty} (kg/m^3)$ é a massa específica do vapor de água no ar, $L_s (J/kg)$ é o calor latente de sublimação, ε é a emissividade, $\sigma (W/m^2K^4)$ é a constante de Stefan-Boltzmann e s[t] (m) é a posição da frente de solidificação.

As equações de $\rho_{vg,s}$ e $\rho_{vg,\infty}$ para a fase sólida, podem ser obtidas da mesma maneira do que as equações utilizadas para a fase líquida. Através da correlação apresentada por BOHREN & ALBRECHT (1998) para o gelo, obtemos as seguintes expressões para $\rho_{vg,s}$ e $\rho_{vg,\infty}$ respectivamente:

$$\rho_{vg,s}\left[T_g[R,t]\right] = \frac{1,323}{T_g[R,t]} \exp\left[22,49 - 6141/T_g[R,t]\right]$$
(3.15)

$$\rho_{\nu g,\infty}[T_{\infty}] = RH\left(\frac{1,323}{T_{\infty}}\exp\left[22,49 - 6141/T_{\infty}\right]\right)$$
(3.16)

onde T_g é a temperatura do gelo em Kelvin, e T_{∞} é a temperatura do ar em Kelvin.

A equação diferencial para a posição da frente de solidificação vai depender da hipótese adotada para localização do gelo formado na etapa de recalescência. Para a hipótese de formação de uma casca esférica na superfície da gota, deverá ser adotado o sistema composto pela equação (3.17.a) abaixo e sua respectiva condição inicial, a equação (3.17.b). Já para hipótese de distribuição uniforme do gelo inicialmente formado, o sistema composto pelas equações (3.18.a) e (3.18.b) deverá ser adotado.

$$k_g \frac{\partial T_g[r,t]}{\partial r} \bigg|_{r=s[t]} = L\rho_g \frac{\partial s[t]}{\partial t} \quad para \ 0 < s[t] < 1; \ t > t_2$$
(3.17.a)

$$s[0] = R_{ini} \tag{3.17.b}$$

$$k_g \frac{\partial T_g[r,t]}{\partial r} \bigg|_{r=s[t]} = L_m \rho_g \frac{\partial s[t]}{\partial t} \quad para \ 0 < s[t] < 1; \ t > t_2$$
(3.18.a)

$$s[0] = R$$
 (3.18.b)

3.2.4 Etapa 4: Resfriamento da gotícula solidificada

A etapa de resfriamento da gotícula solidificada se inicia no tempo $t = t_3$, marcando assim o fim da etapa de solidificação. Essa etapa tem a mesma formulação matemática da etapa de super-resfriamento descrita no item 3.2.1, com a diferença que as propriedades relativas à fase líquida serão substituídas pelas propriedades da fase sólida, como mostrado abaixo (HINDMARSH *et al.*, 2003):

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 k_g \frac{\partial T_g[r, t]}{\partial r} \right) = \rho_g c_g \frac{\partial T_g[r, t]}{\partial t} \quad para \ 0 < r < R; t > t_3$$
(3.19)

$$T_g[r, t_2] = T_d[r]$$
(3.20)

$$\left. \frac{\partial T_g[r,t]}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \tag{3.21}$$

$$-k_{g}\frac{\partial T_{g}[r,t]}{\partial r}\Big|_{r=R} = h(T_{g}[R,t] - T_{\infty}) + h_{m}L_{s}\left(\rho_{vg,s}\left[T_{g}[R,t]\right] - \rho_{vg,\infty}\right) + \varepsilon\sigma(T_{g}^{4}[R,t] - T_{\infty}^{4})$$
(3.22)

onde $T_g(K)$ é a temperatura do sólido (gelo), $k_g(W/mK)$ é a condutividade térmica do sólido, $c_g(J/kgK)$ é o calor específico do sólido, $\rho_g(kg/m^3)$ é a massa específica do sólido, t(s) é o tempo, $t_3(s)$ é o tempo no qual termina a etapa de solidificação (etapa 3), $T_d(K)$ é a distribuição de temperatura na gotícula imediatamente após a conclusão da etapa de solidificação, $T_{\infty}(K)$ é a temperatura do ar, $h(W/m^2K)$ é a coeficiente de transferência de calor por convecção, $h_m(m/s)$ é o coeficiente de transferência de massa, $L_s(J/kg)$ é o calor latente de sublimação, ε é a emissividade da superfície do gelo, $\sigma(W/m^2K^4)$ é a constante de Stefan-Boltzmann, $\rho_{vg,s}(kg/m^3)$ é dado pela equação (3.15), e $\rho_{vg,\infty}(kg/m^3)$ é dado pela equação (3.16).

4. Método de Solução

Para resolver o problema proposto no capítulo anterior, a Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) será empregada em cada uma das etapas anteriormente descritas, com exceção da etapa de recalescência, pois como discutido no capítulo anterior, foi assumido que esta etapa ocorre instantaneamente. Com o objetivo de diminuir o custo computacional, as não linearidades presentes nas condições de contorno do problema original serão incorporadas ao problema de autovalor, assim como foi proposto por COTTA *et al.* (2015, 2016). Filtros implícitos também foram utilizados para homogeneizar a condição de contorno na superfície externa da gotícula.

4.1 Etapa 1: Super-resfriamento

Abaixo estão descritos os grupos adimensionais utilizados na formulação do problema para a etapa de super-resfriamento:

$$U_1 = T_l / T_{\infty} \tag{4.1}$$

$$U_{1,o} = T_o/T_{\infty} \tag{4.2}$$

$$x_1 = r/R \tag{4.3}$$

$$\tau_1 = k_l t / (c_l \rho_l R^2) \tag{4.4}$$

Aplicando os grupos adimensionais 4.1-4.4 nas equações 3.1-3.4, obtemos o seguinte problema diferencial parcial adimensional:

$$\frac{1}{x_1^2} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^2 \frac{\partial U_1[x_1, \tau_1]}{\partial x_1} \right) = \frac{\partial U_1[x_1, \tau_1]}{\partial \tau_1} \quad para \ 0 < x_1 < 1; \tau_1 > 0 \tag{4.5}$$

$$U_1[x_1, 0] = U_{1,o} \tag{4.6}$$

$$\frac{\partial U_1[0,\tau_1]}{\partial x_1} = 0 \tag{4.7}$$

$$-\frac{\partial U_{1}[x_{1},\tau_{1}]}{\partial x_{1}}\Big|_{x_{1}=1} = Bic_{1}(U_{1}[1,\tau_{1}]-1) + Bim_{1}\left(\frac{\rho_{\nu l,s}[U_{1}[1,\tau_{1}]]-\rho_{\nu l,\infty}}{\rho_{\nu,o}}\right) +Bir_{1}(U_{1}^{4}[1,\tau_{1}]-1)$$
(4.8)

onde Bic_1 é o número de Biot para transferência de calor por convecção, Bim_1 é o número de Biot para transferência de massa, Bir_1 é o grupo adimensional para transferência de calor por radiação e $\rho_{vl,s}$ é a massa específica de vapor na superfície da gotícula líquida:

$$Bic_1 = \frac{hR}{k_l} \tag{4.9}$$

$$Bim_1 = \frac{h_m L_e R \rho_{\nu,o}}{k_l T_{\infty}} \tag{4.10}$$

$$Bir_1 = \frac{\varepsilon \sigma R T_{\infty}^3}{k_l} \tag{4.11}$$

$$\rho_{\nu l,s} \left[U_1[1,\tau_1] \right] = \frac{1,323}{T_\infty U_1[1,\tau_1]} \exp \left[\frac{19,83 - 5417}{T_\infty U_1[1,\tau_1]} \right]$$
(4.12)

e $\rho_{v,o}$ é a massa específica do vapor saturado de água na temperatura de 273 K.

O número de Biot Bic_1 representa a razão entre a resistência térmica para condução e a resistência térmica para a convecção na superfície da gotícula. Os grupos Bim_1 e Bir_1 tem significados semelhantes ao número de Biot para a transferência de massa e a transferência de calor por radiação. O grupo Bim_1 representa a razão entre a resistência térmica para condução e a resistência térmica para o resfriamento evaporativo, e o grupo Bir_1 representa a razão entre a resistência térmica para condução e a resistência térmica para a troca por radiação. Os valores desses grupos adimensionais governam a variação de temperatura dentro da gotícula. Será visto no Capítulo 5 que, para valores muito baixos de Bic_1 , Bim_1 e Bir_1 , a temperatura dentro da gotícula tende a ser uniforme.

Para simplificar a formulação, podemos ainda utilizar a seguinte transformação no problema adimensional, fazendo com que as equações tomem a forma de equações em sistema de coordenadas retangulares ao invés de equações descritas no sistema de coordenadas esféricas:

$$\theta_1 = x_1 U_1 \tag{4.13}$$

Após aplicação da transformação acima, o novo sistema de equações fica como mostrado abaixo:

$$\frac{\partial^2 \theta_1[x_1, \tau_1]}{\partial x_1^2} = \frac{\partial \theta_1[x_1, \tau_1]}{\partial \tau_1} \qquad para \ 0 < x_1 < 1; \tau_1 > 0 \tag{4.14}$$

$$\theta_1[x_1, 0] = x_1 U_{1,0} \tag{4.15}$$

$$\theta_1[0, \tau_1] = 0 \tag{4.16}$$

$$\frac{\partial \theta_1[x_1, \tau_1]}{\partial x_1} \Big|_{x_1 = 1} + B_1[\theta_1[1, \tau_1]] \theta_1[1, \tau_1] = H_1$$
(4.17)

onde:

$$B_1[\theta_1[1,\tau_1]] = Bic_1 + Bir_1\theta_1^{3}[1,\tau_1] + \frac{\rho_{\nu l,s}[\theta_1[1,\tau_1]]Bim_1}{\rho_{\nu,o}} - 1$$
(4.18)

$$H_1 = Bic_1 + Bir_1 + \rho_{\nu l,\infty} Bim_1 / \rho_{\nu,o}$$
(4.19)

$$\rho_{\nu l,s}[\theta_1[1,\tau_1]] = \frac{1,323}{T_{\infty}\theta_1^2[1,\tau_1]} \exp\left[\frac{19,83-5417}{T_{\infty}\theta_1[1,\tau_1]}\right]$$
(4.20)

Com o objetivo de homogeneizar a condição de contorno representada pela equação (4.17), foi proposto o emprego do seguinte filtro implícito:

$$\theta_1[x_1, \tau_1] = F_1[x_1, \tau_1] + \theta_1^*[x_1, \tau_1]$$
(4.21)

onde F_1 é o filtro proposto e θ_1^* é o problema filtrado. Para o problema filtro foi escolhida uma equação linear em x_1 , já que um filtro linear é a forma mais simples que é capaz de homogeneizar a condição de contorno representada pela equação (4.17). Abaixo segue a equação proposta para o filtro linear:

$$F_1[x_1, \tau_1] = a_1[\tau_1]x_1 + b_1[\tau_1] \tag{4.22}$$

onde $a_1[\tau_1]$ e $b_1[\tau_1]$ são os coeficientes da equação, e a variável τ_1 age como um parâmetro na equação proposta para o filtro.

Aplicando as equações (4.21) e (4.22) no sistema de equações (4.14-4.17), obtemos as equações para os coeficientes $a_1[\tau_1] e b_1[\tau_1]$:

$$a_1[\tau_1] = \frac{H_1}{1 + B_1[\theta_1[1,\tau_1]]} \tag{4.23}$$

$$b_1[\tau_1] = 0 \tag{4.24}$$

onde $B_1[\theta_1[1, \tau_1]]$ é dado pela equação (4.18).

O problema filtrado é dado pelo sistema de equações abaixo:

$$\frac{\partial^2 \theta_1^{*}[x_1, \tau_1]}{\partial x_1^{2}} = \frac{\partial \theta_1^{*}[x_1, \tau_1]}{\partial \tau_1} + x_1 \frac{\partial a_1[\tau_1]}{\partial \tau_1} \quad para \ 0 < x_1 < 1; \tau_1 > 0$$
(4.25)

$$\theta_1^*[x_1, 0] = x_1(U_{1,o} - a_1[0]) \tag{4.26}$$

$$\theta_1^*[0,\tau_1] = 0 \tag{4.27}$$

$$\frac{\partial \theta_1^*[x_1,\tau_1]}{\partial x_1} \bigg|_{x_1=1} + B_1[a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1,\tau_1]]\theta_1^*[1,\tau_1] = 0$$
(4.28)

onde:

$$B_{1}[a_{1}[\tau_{1}] + \theta_{1}^{*}[1,\tau_{1}]] = Bic_{1} + Bir_{1}(a_{1}[\tau_{1}] + \theta_{1}^{*}[1,\tau_{1}])^{3} + \frac{\rho_{\nu l,s}[a_{1}[\tau_{1}] + \theta_{1}^{*}[1,\tau_{1}]]Bim_{1}}{\rho_{\nu,o}} - 1$$

$$(4.29)$$

$$\rho_{\nu l,s}[a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1,\tau_1]] =$$

$$\frac{1,323}{T_{\infty}(a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1,\tau_1])^2} \exp\left[\frac{19,83 - 5417}{T_{\infty}(a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1,\tau_1])}\right]$$
(4.30)

$$a_{1}[\tau_{1}] = \frac{H_{1}}{1 + B_{1}[a_{1}[\tau_{1}] + \theta_{1}^{*}[1,\tau_{1}]]}$$
(4.31)

Para solução do problema filtrado, emprega-se então a Técnica da Transformada Integral Generalizada. Como forma de iniciar a aplicação desta técnica, foi escolhido o seguinte par transformada-inversa:

$$\overline{\theta_{1_{i}}}^{*}[\tau_{1}] = \int_{0}^{1} \psi_{1_{i}}[x_{1},\tau_{1}] \theta_{1}^{*}[x_{1},\tau_{1}] dx_{1} \quad Transformada$$
(4.32)

$$\theta_1^*[x_1,\tau_1] = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\overline{\theta_{1_i}^*[\tau_1]}\psi_{1_i}[x_1,\tau_1]}{N_{1_i}[\tau_1]} \quad Inversa \tag{4.33}$$

O problema de autovalor é então escolhido com base no sistema de equações homogêneas do problema original. Seguindo a metodologia proposta por COTTA *et al.* (2016) para aceleração da convergência de problemas convectivos-difusivos, o problema de autovalor proposto incorpora o termo não-linear $B_1[a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1,\tau_1]]$ presente na condição de contorno de terceiro tipo do problema original. Diferentemente do que ocorre na aplicação da abordagem tradicional da GITT, a presença dessa não-linearidade faz com que as autofunções e os autovalores se tornem variáveis no tempo. O sistema de equações do problema de autovalor proposto é dado pelas equações abaixo:

$$\frac{\partial^2 \psi_1[x_1, \tau_1]}{\partial x_1^2} + \mu_{1i}^2[\tau_1] \psi_1[x_1, \tau_1] = 0 \quad para \ 0 < x_1 < 1 \tag{4.34}$$

$$\psi_1[0,\tau_1] = 0 \tag{4.35}$$

$$\frac{\partial \psi_1[x_1, \tau_1]}{\partial x_1} \Big|_{x_1 = 1} + B_1[a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1, \tau_1]]\psi_1[x_1, \tau_1] = 0$$
(4.36)

onde μ_{1i} representa os autovalores e $B_1[a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1, \tau_1]]$ é dado pela equação (4.29).

O problema acima tem como solução a seguinte autofunção:

$$\psi_1[x_1, \tau_1] = sen[\mu_{1i}[\tau_1]x_1] \tag{4.37}$$

A norma e a equação transcendental correspondentes ao problema de autovalor não linear são, respectivamente:

$$N_{1i}[\tau_1] = \int_0^1 \psi_1^2[x_1, \tau_1] \, dx_1 \tag{4.38}$$

$$\mu_{1i}[\tau_1]cos[\mu_{1i}[\tau_1]] + B_1[a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1,\tau_1]]sen[\mu_{1i}[\tau_1]] = 0$$
(4.39)

onde $B_1[a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1,\tau_1]]$ é dado pela equação (4.29).

Passando-se ao processo de transformação integral propriamente dito, aplica-se o operador integral $\int_0^1 \psi_{1i} dx_1$ nos dois lados da equação (4.25):

$$\int_{0}^{1} \psi_{1i}[x_{1},\tau_{1}] \frac{\partial^{2} \theta_{1}^{*}[x_{1},\tau_{1}]}{\partial x_{1}^{2}} dx_{1} = \int_{0}^{1} \psi_{1i}[x_{1},\tau_{1}] \frac{\partial \theta_{1}^{*}[x_{1},\tau_{1}]}{\partial \tau_{1}} dx_{1} + \frac{\partial a_{1}[\tau_{1}]}{\partial \tau_{1}} \int_{0}^{1} \psi_{1i}[x_{1},\tau_{1}] x_{1} dx_{1}$$

$$(4.40)$$

Utilizando a segunda fórmula de Green no termo do lado esquerdo da equação acima obtemos:

$$\int_{0}^{1} \psi_{1i}[x_{1},\tau_{1}] \frac{\partial^{2} \theta_{1}^{*}[x_{1},\tau_{1}]}{\partial x_{1}^{2}} dx_{1} = \int_{0}^{1} \theta_{1}^{*}[x_{1},\tau_{1}] \frac{\partial^{2} \psi_{1i}[x_{1},\tau_{1}]}{\partial x_{1}^{2}} dx_{1} + \left[\psi_{1i}[x_{1},\tau_{1}] \frac{\partial \theta_{1}^{*}[x_{1},\tau_{1}]}{\partial x_{1}} - \theta_{1}^{*}[x_{1},\tau_{1}] \frac{\partial \psi_{1i}[x_{1},\tau_{1}]}{\partial x_{1}}\right]_{0}^{1}$$
(4.41)

onde:

$$\left[\psi_{1i}[x_1,\tau_1]\frac{\partial\theta_1^*[x_1,\tau_1]}{\partial x_1} - \theta_1^*[x_1,\tau_1]\frac{\partial\psi_{1i}[x_1,\tau_1]}{\partial x_1}\right]_0^1 = 0$$
(4.42)

e

$$\int_{0}^{1} \theta_{1}^{*}[x_{1},\tau_{1}] \frac{\partial^{2} \psi_{1i}[x_{1},\tau_{1}]}{\partial x_{1}^{2}} dx_{1} = -\int_{0}^{1} \theta_{1}^{*}[x_{1},\tau_{1}] \mu_{1i}^{2}[\tau_{1}] \psi_{1i}[x_{1},\tau_{1}] dx_{1} \qquad (4.43)$$

Aplicando o teorema de Leibniz no primeiro termo do lado direito da equação (4.40), temos:

$$\int_{0}^{1} \psi_{1i}[x_{1},\tau_{1}] \frac{\partial \theta_{1}^{*}[x_{1},\tau_{1}]}{\partial \tau_{1}} dx_{1}$$

$$= \frac{\partial \int_{0}^{1} \theta_{1}^{*}[x_{1},\tau_{1}] \psi_{1i}[x_{1},\tau_{1}] dx_{1}}{\partial \tau_{1}} - \int_{0}^{1} \theta_{1}^{*}[x_{1},\tau_{1}] \frac{\partial \psi_{1i}[x_{1},\tau_{1}]}{\partial x_{1}} dx_{1}$$

$$(4.44)$$

A condição inicial, equação (4.26), pode ser transformada assim como foi feito para a equação (4.25):

$$\int_{0}^{1} \psi_{1_{i}}[x_{1},\tau_{1}]\theta_{1}^{*}[x_{1},0] dx_{1} = \int_{0}^{1} \psi_{1_{i}}[x_{1},\tau_{1}]x_{1}(U_{1,o}-a_{1}[0]) dx_{1}$$
(4.45)

Substituindo as equações (4.41-4.44) na equação (4.40), e depois de alguma manipulação matemática, obtemos a equação (4.46). A equação (4.46) juntamente com a condição inicial transformada (eq. (4.45)) formam um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs). O sistema formado corresponde ao sistema transformado para o problema filtrado, sendo composto pelas equações descritas abaixo:

$$\frac{d\overline{\theta_{1_{i}}}^{*}[\tau_{1}]}{d\tau_{1}} + \sum_{j=1}^{\infty} \left(\delta_{ij} \mu_{1_{i}}^{2}[\tau_{1}] - \int_{0}^{1} \frac{\psi_{1_{j}}[x_{1},\tau_{1}]}{N_{1_{j}}[\tau_{1}]} \frac{\partial\psi_{1_{i}}[x_{1},\tau_{1}]}{\partial x_{1}} dx_{1} \right) \overline{\theta_{1_{j}}}^{*}[\tau_{1}]$$

$$= -\frac{da_{1}[\tau_{1}]}{d\tau_{1}} \int_{0}^{1} \psi_{1_{i}}[x_{1},\tau_{1}] x_{1} dx_{1}$$
(4.46)

$$\overline{\theta_{1_{l}}}^{*}[0] = (U_{1,o} - a_{1}[0]) \int_{0}^{1} \psi_{1_{l}}[x_{1}, 0] x_{1} dx_{1}$$
(4.47)

onde:

$$a_{1}[\tau_{1}] = \frac{H_{1}}{1 + B_{1}[a_{1}[\tau_{1}] + \theta_{1}^{*}[1,\tau_{1}]]}$$
(4.48)

$$B_{1}[a_{1}[\tau_{1}] + \theta_{1}^{*}[1,\tau_{1}]] = Bic_{1} + Bir_{1}(a_{1}[\tau_{1}] + \theta_{1}^{*}[1,\tau_{1}])^{3} + \frac{\rho_{vl,s}[a_{1}[\tau_{1}] + \theta_{1}^{*}[1,\tau_{1}]]Bim_{1}}{\rho_{v,o}} - 1$$

$$(4.49)$$

$$\rho_{\nu l,s}[a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1,\tau_1]] = \frac{1,323}{T_{\infty}(a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1,\tau_1])^2} \exp\left[\frac{19,83 - 5417}{T_{\infty}(a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1,\tau_1])}\right]$$
(4.50)

$$\theta_1^*[1,\tau_1] = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\overline{\theta_{1_i}^*[\tau_1]\psi_{1_i}[1,\tau_1]}}{N_{1_i}[\tau_1]}$$
(4.51)

e ψ_{1i} é dado pela equação (4.37), e N_{1i} é dado pela equação (4.38).

Para solucionar o sistema acima necessitamos também dos autovalores $\mu_{1i}[\tau_1]$ e do coeficiente $a_1[\tau_1]$. Podemos diferenciar as equações (4.39) e (4.48) em relação à τ_1 , e formar um novo sistema de EDOs contendo as equações diferenciais para $\overline{\theta_{1i}}^*[\tau_1]$, $\mu_{1i}[\tau_1]$ e $a_1[\tau_1]$, e suas respectivas condições iniciais.

Para obtenção dos autovalores $\mu_{1i}[\tau_1]$, podemos diferenciar a equação transcendental (eq. (4.39)) em relação à τ_1 , e usar a própria equação (4.39) para $\tau_1 = 0$ como condição inicial. Assim é estabelecida a EDO para os autovalores $\mu_{1i}[\tau_1]$, como pode ser visto nas equações abaixo:

$$\frac{d\mu_{1i}[\tau_{1}]}{d\tau_{1}} (cos[\mu_{1i}[\tau_{1}]] - \mu_{1i}[\tau_{1}]sen[\mu_{1i}[\tau_{1}]] + B_{1}[a_{1}[\tau_{1}] + \theta_{1}^{*}[1,\tau_{1}]]cos[\mu_{1i}[\tau_{1}]]) + \frac{\partial B_{1}[a_{1}[\tau_{1}] + \theta_{1}^{*}[1,\tau_{1}]]}{\partial \tau_{1}}sen[\mu_{1i}[\tau_{1}]] = 0$$
(4.52)

$$\mu_{1i}[0]cos[\mu_{1i}[0]] + B_1[a_1[0] + \theta_1^*[1,0]]sen[\mu_{1i}[0]] = 0$$
(4.53)

onde $B_1[a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1,\tau_1]]$ é dado pela equação (4.49) e $\theta_1^*[1,\tau_1]$ é dado pela equação (4.51).

Do mesmo modo, o coeficiente $a_1[\tau_1]$ é obtido através da diferenciação da equação (4.48) em relação a τ_1 , e da utilização da própria equação (4.48) para $\tau_1=0$ como condição inicial. A EDO relativa ao coeficiente $a_1[\tau_1]$ e sua respectiva condição inicial são apresentadas abaixo:

$$\frac{da_1[\tau_1]}{d\tau_1}(1+B_1[a_1[\tau_1]+\theta_1^*[1,\tau_1]]) + \frac{\partial B_1[a_1[\tau_1]+\theta_1^*[1,\tau_1]]}{\partial \tau_1}a_1[\tau_1] = 0 \quad (4.54)$$

$$a_1[0] = \frac{H_1}{1 + B_1[a_1[0] + \theta_1^*[1,0]]}$$
(4.55)

onde $B_1[a_1[\tau_1] + \theta_1^*[1,\tau_1]]$ é dado pela equação (4.49) e $\theta_1^*[1,\tau_1]$ é dado pela equação (4.51).

As equações (4.46),(4.47) e (4.52-4.55) formam um sistema de EDOs acoplado. Após o truncamento em determinada ordem M, que garanta a convergência, este sistema será resolvido numericamente. A distribuição de temperatura na gotícula $\theta_1^*[x_1, \tau_1]$, é obtida através da fórmula da inversa (eq. (4.33)) aplicada aos potenciais transformados $\overline{\theta_1}^*[\tau_1]$ resultantes da solução numérica do sistema de EDOs. O campo de temperatura original pode ser obtido somando-se o filtro mais a distribuição de temperatura representada pelo problema filtrado $\theta_1^*[x_1, \tau_1]$ (eq. (4.21)), e retomando as mudanças de variáveis realizadas.

4.2 Etapa 2: Recalescência

Como explicado no capítulo anterior, é assumido que a etapa de recalescência ocorre instantaneamente. Sendo assim, o único cálculo necessário para esta etapa, é o volume de gelo formado pela nucleação, já que este valor tem impacto nos valores de ϕ e R_{ini} . Como visto na equação (3.7), esse valor é obtido por uma simples equação algébrica, não necessitando de nenhum método matemático em especial para sua determinação.

4.3 Etapa 3: Solidificação

Com o objetivo de simplificar as equações, os grupos adimensionais utilizados na etapa de solidificação serão modificados em relação à etapa de super-resfriamento. Seguem abaixo os grupos adimensionais relacionados à solidificação (etapa 3):

$$U_{3} = \frac{T_{g} - T_{c}}{T_{\infty} - T_{c}}$$
(4.56)

$$y_3 = r/R \tag{4.57}$$

$$\alpha_g = k_g / (c_g \rho_g) \tag{4.58}$$

$$v[\tau_3] = s[\tau_3]/R \tag{4.59}$$

$$\tau_3 = \alpha_g t/R^2 \tag{4.60}$$

Aplicando os grupos adimensionais nas equações (3.11- 3.18.b), obtemos o seguinte sistema adimensional:

$$\frac{1}{y_3^2} \frac{\partial}{\partial y_3} \left(y_3^2 \frac{\partial U_3[y_3, \tau_3]}{\partial y_3} \right) = \frac{\partial U_3[y_3, \tau_3]}{\partial \tau_3} \quad para \ \nu[\tau_3] < y_3 < 1; \tau_3 > 0$$
(4.61)

$$U_3[y_3, 0] = 0 \tag{4.62}$$

$$U_3[\nu[\tau_3], \tau_3] = 0 \tag{4.63}$$

$$-\frac{\partial U_{3}[y_{3},\tau_{3}]}{\partial y_{3}}\Big|_{y_{3}=1} = Bic_{3}(U_{3}[1,\tau_{3}]-1)$$

$$+Bim_{3}\left(\frac{\rho_{vg,s}[U_{3}[1,\tau_{3}]] - \rho_{vg,\infty}}{\rho_{v,o}}\right)$$

$$+Bir_{3}(U_{3}[1,\tau_{3}](U_{3}^{3}[1,\tau_{3}]\beta^{3} + 4U_{3}^{2}[1,\tau_{3}]\beta^{2} + 6U_{3}[1,\tau_{3}]\beta + 4)$$

$$+\left(1 - T_{\infty}^{4}/T_{c}^{4}\right)1/\beta)$$

$$(4.64)$$

$$\frac{\partial U_3[y_3,\tau_3]}{\partial y_3}\bigg|_{y_3=\nu[\tau_3]} = \frac{L\rho_g \alpha_g}{k_g (T_\infty - T_c)} \frac{\partial \nu[\tau_3]}{\partial \tau_3}$$
(4.65.a)

$$v[0] = R_{ini}/R \tag{4.65.b}$$

$$\frac{\partial U_3[y_3,\tau_3]}{\partial y_3}\bigg|_{y_3=v[\tau_3]} = \frac{L_m \rho_g \alpha_g}{k_g (T_\infty - T_c)} \frac{\partial v[\tau_3]}{\partial \tau_3}$$
(4.66.a)

$$v[0] = 1$$
 (4.66.b)

onde Bic_3 é o número de Biot para transferência de calor por convecção, Bim_3 é o número de Biot para transferência de massa, Bir_3 é o grupo adimensional para transferência de calor por radiação e $\rho_{vg,s}$ é a massa específica do vapor na superfície sólida da gotícula:

$$Bic_3 = \frac{hR}{k_g} \tag{4.67}$$

$$Bim_3 = \frac{h_m L_s R \rho_{\nu,o}}{k_g (T_\infty - T_c)}$$
(4.68)

$$Bir_3 = \frac{\varepsilon \sigma R T_c^3}{k_g} \tag{4.69}$$

$$\beta = \frac{T_{\infty} - T_c}{T_c} \tag{4.70}$$

$$\rho_{vg,s} \left[\theta_3 [1, \tau_3] \right] = \frac{1,323}{(T_{\infty} - T_c) U_3 [1, \tau_3] + T_c} \exp \left[\frac{22,49 - 6141}{(T_{\infty} - T_c) U_3 [1, \tau_3] + T_c} \right]$$
(4.71)

e $\rho_{v,o}$ é a massa específica do vapor saturado de água na temperatura de 273 K.

Assim como foi feito na etapa de super-resfriamento, podemos aplicar a seguinte transformação no sistema adimensional, fazendo com que as equações tomem a forma de equações em sistema de coordenadas Cartesianas ao invés de equações típicas do sistema de coordenadas esféricas:

$$\theta_3 = y_3 U_3 \tag{4.72}$$

Após aplicação da transformação, o novo sistema de equações fica como mostrado abaixo:

$$\frac{\partial^2 \theta_3[y_3, \tau_3]}{\partial y_3^2} = \frac{\partial \theta_3[y_3, \tau_3]}{\partial \tau_3} \quad para \ \nu[\tau_3] < y_3 < 1; \tau_3 > 0 \tag{4.73}$$

$$\theta_3[y_3, 0] = 0 \tag{4.74}$$

$$\theta_3[\nu[\tau_3], \tau_3] = 0 \tag{4.75}$$

$$\frac{\partial \theta_3[y_3, \tau_3]}{\partial y_3} \bigg|_{y_3 = 1} + B_3[\theta_3[1, \tau_3]] \theta_3[1, \tau_3] = H_3$$
(4.76)

$$\frac{\partial \theta_3[y_3, \tau_3]}{\partial y_3} \bigg|_{y_3 = \nu[\tau_3]} = \frac{L\rho_g \alpha_g}{k_g (T_\infty - T_c)} \nu[\tau_3] \frac{\partial \nu[\tau_3]}{\partial \tau_3}$$
(4.77.a)

$$v[0] = R_{ini}/R \tag{4.77.b}$$

$$\frac{\partial \theta_3[y_3, \tau_3]}{\partial y_3} \bigg|_{y_3 = \nu[\tau_3]} = \frac{L_m \rho_g \alpha_g}{k_g (T_\infty - T_c)} \nu[\tau_3] \frac{\partial \nu[\tau_3]}{\partial \tau_3}$$
(4.78.a)

$$v[0] = 1$$
 (4.78.b)

onde:

$$B_{3}[\theta_{3}[1,\tau_{3}]] =$$

$$Bic_{3} + 4Bir_{3}\left(\left(1 + \beta\theta_{3}[1,\tau_{3}] + \frac{\beta^{2}\theta_{3}^{2}[1,\tau_{3}]}{2}\right)\left(1 + \frac{\beta\theta_{3}[1,\tau_{3}]}{2}\right)\right) + \frac{\rho_{vg,s}[\theta_{3}[1,\tau_{3}]]Bim_{3}}{\rho_{v,o}} - 1$$

$$(4.79)$$

$$H_{3} = Bic_{3} - Bir_{3} \left(1 - \frac{T_{\infty}^{4}}{T_{c}^{4}}\right) \frac{1}{\beta} + \rho_{\nu g, \infty} Bim_{3} / \rho_{\nu, o}$$
(4.80)

$$\rho_{\nu g,s} \Big[\theta_3 [1, \tau_3] \Big] = \frac{1,323}{((T_{\infty} - T_c)\theta_3 [1, \tau_3] + T_c)\theta_3 [1, \tau_3]} \exp \left[\frac{22,49 - 6141}{(T_{\infty} - T_c)\theta_3 [1, \tau_3] + T_c} \right]$$
(4.81)

O sistema adimensional acima gera problemas de autovalor mais complexos devido aos limites da coordenada y. Para simplificação, podemos ainda aplicar a seguinte transformação no sistema adimensional:

$$x_3 = 1 - y_3 \tag{4.82}$$

$$\eta[\tau_3] = 1 - \nu[\tau_3] \tag{4.83}$$

Após aplicação da transformação relativa as equações (4.82) e (4.83), o novo sistema de equações fica como mostrado abaixo:

$$\frac{\partial^2 \theta_3[x_3, \tau_3]}{\partial x_3^2} = \frac{\partial \theta_3[x_3, \tau_3]}{\partial \tau_3} \quad para \ 0 < x_3 < \eta[\tau_3]; \tau_3 > 0 \tag{4.84}$$

$$\theta_3[x_3, 0] = 0 \tag{4.85}$$

$$\theta_3[\eta[\tau_3], \tau_3] = 0 \tag{4.86}$$

$$-\frac{\partial \theta_3[x_3, \tau_3]}{\partial x_3} \bigg|_{x_3=0} + B_3[\theta_3[0, \tau_3]]\theta_3[0, \tau_3] = H_3$$
(4.87)

$$\frac{\partial \theta_3[x_3, \tau_3]}{\partial x_3} \bigg|_{x_3 = \eta[\tau_3]} = \frac{L\rho_g \alpha_g}{k_g (T_\infty - T_c)} (1 - \eta[\tau_3]) \frac{\partial \eta[\tau_3]}{\partial \tau_3}$$
(4.88.a)

$$\eta[0] = 1 - R_{ini}/R \tag{4.88.b}$$

$$\frac{\partial \theta_3[x_3, \tau_3]}{\partial x_3} \bigg|_{x_3 = \eta[\tau_3]} = \frac{L_m \rho_g \alpha_g}{k_g (T_\infty - T_c)} (1 - \eta[\tau_3]) \frac{\partial \eta[\tau_3]}{\partial \tau_3}$$
(4.89.a)

$$\eta[0] = 0 \tag{4.89.b}$$

onde:

$$B_{3}[\theta_{3}[0,\tau_{3}]] =$$

$$Bic_{3} + 4Bir_{3}\left(\left(1 + \beta\theta_{3}[0,\tau_{3}] + \frac{\beta^{2}\theta_{3}^{2}[0,\tau_{3}]}{2}\right)\left(1 + \frac{\beta\theta_{3}[0,\tau_{3}]}{2}\right)\right) + \frac{\rho_{vg,s}[\theta_{3}[0,\tau_{3}]]Bim_{3}}{\rho_{v,o}} - 1$$
(4.90)

$$H_{3} = Bic_{3} - Bir_{3} \left(1 - \frac{T_{\infty}^{4}}{T_{c}^{4}}\right) \frac{1}{\beta} + \rho_{\nu g, \infty} Bim_{3} / \rho_{\nu, o}$$
(4.91)

$$\rho_{\nu g,s} \Big[\theta_3[0, \tau_3] \Big] =$$

$$\frac{1,323}{((T_{\infty} - T_c)\theta_3[0, \tau_3] + T_c)\theta_3[0, \tau_3]} \exp \left[\frac{22,49 - 6141}{(T_{\infty} - T_c)\theta_3[0, \tau_3] + T_c} \right]$$
(4.92)

Para esta etapa, foi proposta novamente a utilização de um filtro implícito para homogeneizar a condição de contorno representada pela equação (4.87):

$$\theta_3[x_3, \tau_3] = F_3[x_3, \tau_3] + \theta_3^*[x_3, \tau_3]$$
(4.93)

onde F_3 é o filtro proposto e θ_3^* é a solução do problema filtrado. Mais uma vez foi escolhida uma equação linear em x_3 para o filtro, já que um filtro linear é a forma mais simples que é capaz de homogeneizar a condição de contorno representada pela equação (4.87). Abaixo segue a equação proposta para o filtro linear:

$$F_3[x_3, \tau_3] = a_3[\tau_3]x_3 + b_3[\tau_3] \tag{4.94}$$

onde $a_3[\tau_3]$ e $b_3[\tau_3]$ são os coeficientes da equação, e a variável τ_3 age como um parâmetro na equação proposta para o filtro.

Aplicando as equações (4.93) e (4.94) no sistema de equações (4.84-4.87), obtemos as equações para os termos $a_3[\tau_3]$ e $b_3[\tau_3]$ do filtro F_3 :

$$a_3[\tau_3] = \frac{-H_3}{1 + B_3[\theta_3[0, \tau_1]]\eta[\tau_3]}$$
(4.95)

$$b_3[\tau_3] = \frac{H_3\eta[\tau_3]}{1 + B_3[\theta_3[0,\tau_1]]\eta[\tau_3]}$$
(4.96)

onde $B_3[\theta_3[0, \tau_3]]$ é dado pela equação (4.90).

O problema filtrado é obtido através do emprego da equação (4.93) nas equações do sistema adimensionalizado (eqs. 4.84-4.87). Em um primeiro momento, vamos tratar da transformação das equações referentes à transferência de calor na fase sólida. Assim, aplicando a equação (4.93) nas equações (4.84-4.87), temos:

$$\frac{\partial^2 \theta_3^{*}[x_3, \tau_3]}{\partial x_3^{2}} = \frac{\partial \theta_3^{*}[x_3, \tau_3]}{\partial \tau_3} + x_3 \frac{\partial a_3[\tau_3]}{\partial \tau_3} + \frac{\partial b_3[\tau_3]}{\partial \tau_3}$$

$$para \ 0 < x_3 < \eta[\tau_3]; \tau_3 > 0$$
(4.97)

$$\theta_3^*[x_3, 0] = -a_3[0]x_3 - b_3[0] \tag{4.98}$$

$$-\frac{\partial \theta_3^*[x_3,\tau_3]}{\partial x_3}\Big|_{x_3=0} + B_3 \Big[b_3[\tau_3] + \theta_3^*[0,\tau_3] \Big] \theta_3^*[0,\tau_3] = 0$$
(4.99)

$$\theta_3^*[\eta[\tau_3], \tau_3] = 0 \tag{4.100}$$

onde:

$$B_{3}[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]] = Bic_{3}$$

$$+4Bir_{3}\left(\left(1 + \beta(b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]) + \frac{\beta^{2}(b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}])^{2}}{2}\right)$$

$$\left(1 + \frac{\beta(b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}])}{2}\right)\right) + \frac{\rho_{vg,s}[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]]Bim_{3}}{\rho_{v,o}} - 1$$

$$(4.101)$$

$$a_{3}[\tau_{3}] = \frac{-H_{3}}{1 + B_{3}[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]]\eta[\tau_{3}]}$$
(4.102)

$$b_{3}[\tau_{3}] = \frac{H_{3}\eta[\tau_{3}]}{1 + B_{3}[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]]\eta[\tau_{3}]}$$
(4.103)

$$\rho_{\nu g,s} \Big[\theta_3[0, \tau_3] \Big] =$$

$$\frac{1,323}{\Big((T_{\infty} - T_c)(b_3[\tau_3] + \theta_3^*[0, \tau_3]) + T_c \Big) (b_3[\tau_3] + \theta_3^*[0, \tau_3])}$$

$$\exp \Big[\frac{22,49 - 6141}{(T_{\infty} - T_c)(b_3[\tau_3] + \theta_3^*[0, \tau_3]) + T_c} \Big]$$
(4.104)

Novamente a Técnica da Transformada Integral Generalizada será utilizada para solução do problema filtrado. O par transformada-inversa escolhido foi:

$$\overline{\theta_{3_{l}}}^{*}[\tau_{3}] = \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3_{l}}[x_{3},\tau_{3}] \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}] dx_{3} \quad Transformada$$
(4.105)

$$\theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}] = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\overline{\theta_{3_{i}}^{*}[\tau_{3}]\psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}]}}{N_{3_{i}}[\tau_{3}]} \quad Inversa \tag{4.106}$$

O problema de autovalor é escolhido com base no sistema de equações homogêneas do problema original. Novamente, a metodologia proposta por COTTA *et al.* (2016) para aceleração da convergência de problemas convectivos-difusivos será adotada, desta vez em um problema de contorno móvel. O problema de autovalor proposto incorpora o termo não-linear $B_3[b_3[\tau_3] + \theta_3^*[0,\tau_3]]$ presente na condição de contorno de terceiro tipo do problema original, fazendo com que as autofunções e os autovalores se tornem variáveis no tempo. O sistema de equações do problema de autovalor proposto é dado pelas equações abaixo:

$$\frac{\partial^2 \psi_3[x_3, \tau_3]}{\partial x_3^2} + \mu_3^2[\tau_3]\psi_3[x_3, \tau_3] = 0 \quad para \ 0 < x_3 < \eta[\tau_3]$$
(4.107)

$$-\frac{\partial\psi_3[x_3,\tau_3]}{\partial x_3}\Big|_{x_3=0} + B_3[b_3[\tau_3] + \theta_3^*[0,\tau_3]]\psi_3[x_3,\tau_3] = 0$$
(4.108)

$$\psi_3[\eta[\tau_3], \tau_3] = 0 \tag{4.109}$$

onde μ_{3i} representa os autovalores e $B_3[b_3[\tau_3] + \theta_3^*[0, \tau_3]]$ é dado pela equação (4.101).

A partir do problema auxiliar acima obtemos, respectivamente, a autofunção, a norma e a equação transcendental para os autovalores:

$$\psi_3[x_3, \tau_3] = sen[\mu_{3i}[\tau_3]\eta[\tau_3] - x_3]$$
(4.110)

$$N_{3i}[\tau_3] = \int_0^{\eta[\tau_3]} \psi_3^2[x_3, \tau_3] \, dx_3 \tag{4.111}$$

$$\mu_{3_{i}}[\tau_{3}]cos[\mu_{3_{i}}[\tau_{3}]\eta[\tau_{3}]] + B_{3}[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]]sen[\mu_{3_{i}}[\tau_{3}]\eta[\tau_{3}]] = 0 \quad (4.112)$$

Aplicando o operador integral $\int_0^{\eta[\tau_3]} \psi_{3i} dx_3$ nos dois lados da equação (4.97), temos:

$$\int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}] \frac{\partial^{2} \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}]}{\partial x_{3}^{2}} dx_{3} = \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}] \frac{\partial \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}]}{\partial \tau_{3}} dx_{3} + \frac{\partial a_{3}[\tau_{3}]}{\partial \tau_{3}} \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}] x_{3} dx_{3} + \frac{\partial b_{3}[\tau_{3}]}{\partial \tau_{3}} \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}] dx_{3}$$

$$(4.113)$$

Utilizando a segunda fórmula de Green no termo do lado esquerdo da equação acima obtemos:

$$\int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3i}[x_{3},\tau_{3}] \frac{\partial^{2} \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}]}{\partial x_{3}^{2}} dx_{3} = \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}] \frac{\partial^{2} \psi_{3i}[x_{3},\tau_{3}]}{\partial x_{3}^{2}} dx_{3} + \left[\psi_{3i}[x_{3},\tau_{3}] \frac{\partial \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}]}{\partial x_{3}} - \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}] \frac{\partial \psi_{3i}[x_{3},\tau_{3}]}{\partial x_{3}}\right]_{0}^{\eta[\tau_{3}]}$$
(4.114)

onde:

$$\left[\psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}]\frac{\partial\theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}]}{\partial x_{3}} - \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}]\frac{\partial\psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}]}{\partial x_{3}}\right]_{0}^{\eta[\tau_{3}]} = 0$$
(4.115)

e

$$\int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}] \frac{\partial^{2} \psi_{3i}[x_{3},\tau_{3}]}{\partial x_{3}^{2}} dx_{3}$$

$$= -\int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}] \mu_{3i}^{2}[\tau_{3}] \psi_{3i}[x_{3},\tau_{3}] dx_{3}$$
(4.116)

Aplicando o teorema de Leibniz no primeiro termo do lado direito da equação (4.113), temos:

$$\int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3i}[x_{3},\tau_{3}] \frac{\partial \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}]}{\partial \tau_{3}} dx_{3}$$

$$= \frac{\partial \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}] \psi_{3i}[x_{3},\tau_{3}] dx_{3}}{\partial \tau_{3}} + \left| \psi_{3i}[x_{3},\tau_{3}] \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}] \right|_{x_{3}=0} \frac{d0}{d\tau_{3}}$$

$$- \left| \psi_{3i}[x_{3},\tau_{3}] \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}] \right|_{x_{3}=\eta[\tau_{3}]} \frac{d\eta[\tau_{3}]}{d\tau_{3}}$$

$$- \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \theta_{3}^{*}[x_{3},\tau_{3}] \frac{\partial \psi_{3i}[x_{3},\tau_{3}]}{\partial x_{3}} dx_{3}$$

$$(4.117)$$

A condição inicial é transformada através do mesmo operador integral utilizado na transformação da equação (4.97):

$$\int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}]\theta_{3}^{*}[x_{3},0] dx_{3} = -a_{3}[0] \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}]x_{3} dx_{3}$$

$$-b_{3}[0] \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}] dx_{3}$$
(4.118)

Substituindo as equações (4.114-117) na equação (4.113), e depois de alguma manipulação matemática, obtemos a equação (4.119). A equação (4.119) juntamente com a condição inicial transformada (eq. (4.118)) formam um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs), que corresponde ao sistema formado corresponde ao sistema transformado para o problema filtrado, sendo composto pelas equações descritas abaixo:

$$\frac{d\overline{\theta_{3_{l}}}^{*}[\tau_{3}]}{d\tau_{3}} + \sum_{j=1}^{\infty} (\delta_{ij}\mu_{3_{l}}^{2}[\tau_{3}] - \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \frac{\psi_{3_{j}}[x_{3},\tau_{3}]}{N_{3_{j}}[\tau_{3}]} \frac{\partial\psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}]}{\partial x_{3}} dx_{3})\overline{\theta_{3_{j}}}^{*}[\tau_{3}] =$$

$$-\frac{da_{3}[\tau_{3}]}{d\tau_{3}} \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}]x_{3} dx_{3} - \frac{db_{3}[\tau_{3}]}{d\tau_{3}} \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}] dx_{3}$$

$$(4.119)$$

$$\overline{\theta_{3_{i}}}^{*}[0] = -a_{3}[0] \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}]x_{3} dx_{3}$$

$$-b_{3}[0] \int_{0}^{\eta[\tau_{3}]} \psi_{3_{i}}[x_{3},\tau_{3}] dx_{3}$$
(4.120)

onde ψ_{3_i} é dado pela equação (4.110) e N_{3_i} é dado pela equação (4.111). Os coeficientes $a_3[\tau_3]$ e $b_3[\tau_3]$ serão resolvidos simultaneamente ao sistema acima, como veremos adiante.

Procedemos agora para o tratamento das equações relativas à fronteira móvel, substituindo a equação do filtro, equação (4.93), e a inversa, equação (4.106), nas equações (4.88) e (4.89). As equações tomam a seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial x_3} \left(\sum_{j=1}^{\infty} \frac{\overline{\theta_{3_j}}^*[\tau_3] \psi_{3_j}[x_3, \tau_3]}{N_{3_j}[\tau_3]} \right) \bigg|_{x_3 = \eta[\tau_3]} + a_3[\tau_3]$$

$$= \frac{L\rho_g \alpha_g}{k_g(T_\infty - T_c)} (1 - \eta[\tau_3]) \frac{d\eta[\tau_3]}{d\tau_3}$$
(4.121.a)

$$\eta[0] = 1 - R_{ini}/R \tag{4.121.b}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_{3}} \left(\sum_{j=1}^{\infty} \frac{\overline{\theta_{3_{j}}}^{*}[\tau_{3}]\psi_{3_{j}}[x_{3},\tau_{3}]}{N_{3_{j}}[\tau_{3}]} \right) \bigg|_{x_{3}=\eta[\tau_{3}]} + a_{3}[\tau_{3}]$$

$$= \frac{L_{m}\rho_{g}\alpha_{g}}{k_{g}(T_{\infty} - T_{c})} (1 - \eta[\tau_{3}]) \frac{d\eta[\tau_{3}]}{d\tau_{3}}$$

$$\eta[0] = 0 \qquad (4.122.b)$$

onde ψ_{3_i} é dado pela equação (4.110) e N_{3_i} é dado pela equação (4.111). O coeficiente $a_3[\tau_3]$ será resolvido simultaneamente ao sistema acima, como veremos adiante.

Para obter os valores de $\mu_{3i}[\tau_3]$, como feito para a etapa de super-resfriamento, diferenciamos a equação transcendental (eq. (4.112)) em relação a τ_3 . A equação resultante da diferenciação juntamente com a própria equação transcendental para $\tau_3 =$ 0, são apresentadas abaixo:

$$\frac{d\mu_{3i}[\tau_{3}]}{d\tau_{3}}\left(\cos\left[\mu_{3i}[\tau_{3}]\eta[\tau_{3}]\right] - \mu_{3i}[\tau_{3}]\eta[\tau_{3}]sen\left[\mu_{3i}[\tau_{3}]\eta[\tau_{3}]\right]\right) + B_{3}\left[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]\right]\eta[\tau_{3}]cos\left[\mu_{3i}[\tau_{3}]\eta[\tau_{3}]\right]\right) \\ - \mu_{3i}^{2}[\tau_{3}]sen\left[\mu_{3i}[\tau_{3}]\eta[\tau_{3}]\right]\frac{d\eta[\tau_{3}]}{d\tau_{3}} + B_{3}\left[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]\right]\mu_{3i}[\tau_{3}]cos\left[\mu_{3i}[\tau_{3}]\eta[\tau_{3}]\right]\frac{d\eta[\tau_{3}]}{d\tau_{3}} + \frac{\partial B_{3}\left[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]\right]}{\partial\tau_{3}}sen\left[\mu_{3i}[\tau_{3}]\eta[\tau_{3}]\right] = 0$$
(4.123)

$$\mu_{3_i}[0]cos[\mu_{3_i}[0]\eta[0]] + B_3[b_3[0] + \theta_3^*[0,0]]sen[\mu_{3_i}[0]\eta[0]] = 0$$
(4.124)

onde:

$$B_{3}[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]] = Bic_{3}$$

$$+4Bir_{3}\left(\left(1 + \beta(b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]) + \frac{\beta^{2}(b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}])^{2}}{2}\right)$$

$$\left(1 + \frac{\beta(b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}])}{2}\right)\right) + \frac{\rho_{vg,s}[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]]Bim_{3}}{\rho_{v,o}} - 1$$

$$(4.125)$$

$$\rho_{\nu g,s} \Big[\theta_3[0, \tau_3] \Big] =$$

$$1,323$$

$$\overline{((T_{\infty} - T_c)(b_3[\tau_3] + \theta_3^*[0, \tau_3]) + T_c)(b_3[\tau_3] + \theta_3^*[0, \tau_3])}$$

$$\exp\left[\frac{22,49 - 6141}{(T_{\infty} - T_c)(b_3[\tau_3] + \theta_3^*[0, \tau_3]) + T_c}\right]$$

$$(4.126)$$

$$\theta_3^*[0,\tau_3] = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\overline{\theta_{3_j}^*[\tau_3]\psi_{3_j}[0,\tau_3]}}{N_{3_j}[\tau_3]}$$
(4.127)

O mesmo procedimento é feito para obtenção das equações diferenciais ordinárias relativas aos coeficientes $a_3[\tau_3]$ e $b_3[\tau_3]$. As equações diferenciais e suas respectivas condições iniciais são dadas abaixo:

$$\frac{da_{3}[\tau_{3}]}{d\tau_{3}} \left(1 + B_{3}[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]]\eta[\tau_{3}]\right) \\
+ \frac{\partial B_{3}[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]]}{\partial \tau_{3}} a_{3}[\tau_{3}]\eta[\tau_{3}] \\
+ a_{3}[\tau_{3}]B_{3}[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]]\frac{d\eta[\tau_{3}]}{d\tau_{3}} = 0$$
(4.128)

$$a_{3}[0] = \frac{-H_{3}}{1 + B_{3}[b_{3}[0] + \theta_{3}^{*}[0,0]]\eta[0]}$$
(4.129)

$$\frac{db_{3}[\tau_{3}]}{d\tau_{3}} \left(1 + B_{3}[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]]\eta[\tau_{3}]\right) + \frac{\partial B_{3}[b_{3}[\tau_{3}] + \theta_{3}^{*}[0,\tau_{3}]]}{\partial \tau_{3}} b_{3}[\tau_{3}]\eta[\tau_{3}]$$
(4.130)

$$+b_3[\tau_3]B_3[b_3[\tau_3] + \theta_3^*[0,\tau_3]]\frac{d\eta[\tau_3]}{d\tau_3} - H_3\frac{d\eta[\tau_3]}{d\tau_3} = 0$$

$$b_{3}[0] = \frac{H_{3}\eta[0]}{1 + B_{3}[b_{3}[0] + \theta_{3}^{*}[0,0]]\eta[0]}$$
(4.131)

onde ψ_{3_i} é dado pela equação (4.110), N_{3_i} é dado pela equação (4.111), $B_3[b_3[\tau_3] + \theta_3^*[0,\tau_3]]$ é dado pela equação (4.125), e $\theta_3^*[0,\tau_3]$ é dado pela equação (4.127).

O sistema de EDOs acoplado é formado pelas equações (4.119-120), (4.123-124) e (4.128-131). Dependendo da hipótese escolhida para formação de gelo na etapa de recalescência, também farão parte do sistema de EDOs as equações (4.121) ou (4.122). Após o truncamento em determinada ordem *M*, que garanta a convergência, o sistema acoplado será resolvido numericamente. A distribuição de temperatura na gotícula $\theta_3^*[x_3, \tau_3]$, é obtida através da fórmula da inversa (eq. (4.106)) aplicada aos potenciais transformados $\overline{\theta_{3_i}}^*[\tau_3]$ resultantes da solução numérica do sistema de EDOs. O campo de temperatura original pode ser obtido somando-se o filtro e a distribuição de temperatura representada pelo problema filtrado $\theta_3^*[x_3, \tau_3]$, como mostrado na equação (4.93). A posição da interface da gotícula é dada através dos valores $\eta[\tau_3]$ provenientes da solução numérica do sistema de EDOs, retomando as mudanças de variáveis que foram feitas:

$$s[\tau_3] = R(1 - \eta[\tau_3]) \tag{4.132}$$

4.4 Etapa 4: Resfriamento

A modelagem matemática etapa de resfriamento da gotícula congelada é bastante similar à etapa de super-resfriamento do líquido e, portanto o método utilizado para solução de ambas as etapas é praticamente o mesmo. A diferença básica neste caso é que a gotícula não apresenta temperatura inicial uniforme. Abaixo estão descritos os grupos adimensionais utilizados nas equações do problema:

$$U_4 = T_g / T_\infty \tag{4.133}$$

$$x_4 = r/R \tag{4.134}$$

$$\tau_4 = k_g t / \left(c_g \rho_g R^2 \right) \tag{4.135}$$

Aplicando estes grupos adimensionais nas equações (3.19-3.22), obtemos o seguinte sistema adimensional:

$$\frac{1}{x_4^2} \frac{\partial}{\partial x_4} \left(x_4^2 \frac{\partial U_4[x_4, \tau_4]}{\partial x_4} \right) = \frac{\partial U_4[x_4, \tau_4]}{\partial \tau_4} \quad para \ 0 < x_4 < 1; \tau_4 > 0 \tag{4.136}$$

$$U_4[x_4, 0] = U_d(x_4) \tag{4.137}$$

$$\frac{\partial U_4[0,\tau_4]}{\partial x_4} = 0 \tag{4.138}$$

$$-\frac{\partial U_{4}[x_{4},\tau_{4}]}{\partial x_{4}}\Big|_{x_{4}=1}$$

$$=Bic_{4}(U_{4}[1,\tau_{4}]-1)+Bim_{4}\left(\frac{\rho_{vg,s}[U_{4}[1,\tau_{4}]]-\rho_{vg,\infty}}{\rho_{v,o}}\right) \qquad (4.139)$$

$$+Bir_{4}(U_{4}{}^{4}[1,\tau_{4}]-1)$$

onde $U_d(x_4)$ é a distribuição de temperatura na gotícula após a etapa 3, Bic_4 é o número de Biot para transferência de calor por convecção, Bim_4 é o número de Biot para transferência de massa, Bir_4 é o grupo adimensional para transferência de calor por radiação e $\rho_{vg,s}$ é a massa específica do vapor na superfície da gotícula sólida:

$$Bic_4 = \frac{hR}{k_g} \tag{4.140}$$

$$Bim_4 = \frac{h_m L_s R \rho_{\nu,o}}{k_g T_{\infty}} \tag{4.141}$$

$$Bir_4 = \frac{\varepsilon \sigma R T_{\infty}^3}{k_g} \tag{4.142}$$

$$\rho_{vg,s} \left[U_4[1,\tau_4] \right] = \frac{1,323}{T_\infty U_4[1,\tau_4]} \exp\left[\frac{22,49 - 6141}{T_\infty U_4[1,\tau_4]} \right]$$
(4.143)

Seguindo a metodologia utilizada no item 4.1 deste capítulo, faremos a transformação das equações do sistema de coordenadas esféricas para o sistema de coordenadas Cartesianas, utilizando a seguinte expressão:

$$\theta_4 = x_4 U_4 \tag{4.144}$$

Após a transformação descrita acima, o novo sistema de equações fica como mostrado abaixo:

$$\frac{\partial^2 \theta_4[x_4, \tau_4]}{\partial x_4^2} = \frac{\partial \theta_4[x_4, \tau_4]}{\partial \tau_4} \qquad para \ 0 < x_4 < 1; \tau_4 > 0 \tag{4.145}$$

$$\theta_4[x_4, 0] = x_4 U_d(x_4) \tag{4.146}$$

$$\theta_4[0,\tau_4] = 0 \tag{4.147}$$

$$\frac{\partial \theta_4[x_4, \tau_4]}{\partial x_4}\Big|_{x_4=1} + B_4[\theta_4[1, \tau_4]]\theta_4[1, \tau_4] = H_4$$
(4.148)

onde:

$$B_{4}[\theta_{4}[1,\tau_{4}]] = Bic_{4} + Bir_{4}\theta_{4}^{3}[1,\tau_{4}] + \frac{\rho_{\nu g,s}[\theta_{4}[1,\tau_{4}]]Bim_{4}}{\rho_{\nu,o}} - 1$$
(4.149)

$$H_4 = Bic_4 + Bir_4 + \rho_{vg,\infty} Bim_4 / \rho_{v,o}$$
(4.150)

$$\rho_{\nu g,s}[\theta_4[1,\tau_4]] = \frac{1,323}{T_{\infty}\theta_4^{\ 2}[1,\tau_4]} \exp\left[\frac{22,49-6141}{T_{\infty}\theta_4[1,\tau_4]}\right]$$
(4.151)

Novamente um filtro implícito será empregado para homogeneizar a condição de contorno representada pela equação (4.148):

$$\theta_4[x_4, \tau_4] = F_4[x_4, \tau_4] + \theta_4^*[x_4, \tau_4]$$
(4.152)

onde F_4 é o filtro proposto e θ_4^* é a solução do problema filtrado. Para a expressão do filtro foi escolhida uma equação linear em x_4 , já que um filtro linear é a forma mais simples que é capaz de homogeneizar a condição de contorno representada pela equação (4.148). Abaixo segue a equação proposta para o filtro linear:

$$F_4[x_4, \tau_4] = a_4[\tau_4]x_4 + b_4[\tau_4] \tag{4.153}$$

onde $a_4[\tau_4]$ e $b_4[\tau_4]$ são os coeficientes da equação do filtro, e a variável τ_4 age como um parâmetro na equação proposta para o filtro.

Aplicando a equação (4.152) no sistema de equações (4.145-4.148), obtemos as equações para os coeficientes $a_4[\tau_4] \in b_4[\tau_4]$:

$$a_4[\tau_4] = \frac{H_4}{1 + B_4[\theta_4[1, \tau_4]]} \tag{4.154}$$

$$b_4[\tau_4] = 0 \tag{4.155}$$

onde $B_4[\theta_4[1, \tau_4]]$ é dado pela equação (4.149).

O problema filtrado é dado pelo sistema de equações abaixo:

$$\frac{\partial^2 \theta_4^{*}[x_4, \tau_4]}{\partial x_4^{2}} = \frac{\partial \theta_4^{*}[x_4, \tau_4]}{\partial \tau_4} + x_4 \frac{\partial a_4[\tau_4]}{\partial \tau_4} \quad para \ 0 < x_4 < 1; \tau_4 > 0 \tag{4.156}$$

$$\theta_4^*[x_4, 0] = x_4(U_d(x_4) - a_4[0]) \tag{4.157}$$

$$\theta_4^{*}[0,\tau_4] = 0 \tag{4.158}$$

$$\frac{\partial \theta_4^*[x_4, \tau_4]}{\partial x_4} \bigg|_{x_4=1} + B_4[a_4[\tau_4] + \theta_4^*[1, \tau_4]]\theta_4^*[1, \tau_4] = 0$$
(4.159)

onde:

$$B_{4}[a_{4}[\tau_{4}] + \theta_{4}^{*}[1,\tau_{4}]] = Bic_{4} + Bir_{4}(a_{4}[\tau_{4}] + \theta_{4}^{*}[1,\tau_{4}])^{3} + \frac{\rho_{vg,s}[a_{4}[\tau_{4}] + \theta_{4}^{*}[1,\tau_{4}]]Bim_{4}}{\rho_{v,o}} - 1$$

$$\rho_{vg,s}[a_{4}[\tau_{4}] + \theta_{4}^{*}[1,\tau_{4}]] = 1$$

$$1,323 \qquad [22,49 - 6141] \qquad (4.161)$$

$$\frac{1,323}{T_{\infty}(a_4[\tau_4] + \theta_4^{*}[1,\tau_4])^2} \exp\left[\frac{22,49 - 6141}{T_{\infty}(a_4[\tau_4] + \theta_4^{*}[1,\tau_4])}\right]$$
(4.161)

$$a_4[\tau_4] = \frac{H_4}{1 + B_4[a_4[\tau_4] + \theta_4^*[1, \tau_4]]}$$
(4.162)

Para solução do problema filtrado é empregada a Técnica da Transformada Integral Generalizada, utilizando-se o seguinte par transformada-inversa:

$$\overline{\theta_{4_{l}}}^{*}[\tau_{4}] = \int_{0}^{1} \psi_{4_{l}}[x_{4}, \tau_{4}] \theta_{4}^{*}[x_{4}, \tau_{4}] dx_{4} \quad Transformada$$
(4.163)

$$\theta_4^{*}[x_4, \tau_4] = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\overline{\theta_{4_i}^{*}[\tau_4]}\psi_{4_i}[x_4, \tau_4]}{N_{4_i}[\tau_4]} \quad Inversa \tag{4.164}$$

O problema de autovalor é então escolhido com base no sistema de equações homogêneas do problema original. Seguindo a metodologia proposta por COTTA *et al.* (2016) para aceleração da convergência de problemas convectivos-difusivos, o problema de autovalor proposto incorpora o termo não-linear $B_4[a_4[\tau_4] + \theta_4^*[1,\tau_4]]$ presente na condição de contorno de terceiro tipo do problema original. Diferentemente do que ocorre na aplicação da abordagem tradicional da GITT, a presença dessa não-linearidade faz com que as autofunções e os autovalores se tornem variáveis no tempo. O sistema de equações do problema de autovalor proposto é dado pelas equações abaixo:

$$\frac{\partial^2 \psi_4[x_4, \tau_4]}{\partial x_4^2} + \mu_{4i}^2[\tau_4] \psi_4[x_4, \tau_4] = 0 \qquad para \ 0 < x_4 < 1 \tag{4.165}$$

$$\psi_4[0,\tau_4] = 0 \tag{4.166}$$

$$\frac{\partial \psi_4[x_4, \tau_4]}{\partial x_4}\Big|_{x_4=1} + B_4[a_4[\tau_4] + \theta_4^*[1, \tau_4]]\psi_4[x_4, \tau_4] = 0$$
(4.167)

onde μ_{4_i} representa os autovalores e $B_4[a_4[\tau_4] + \theta_4^*[1, \tau_4]]$ é dado pela equação (4.160).

O problema acima tem como solução a seguinte autofunção:

$$\psi_4[x_4, \tau_4] = sen[\mu_{4_i}[\tau_4]x_4] \tag{4.168}$$

A norma e a equação transcendental correspondentes ao problema de autovalor não linear são, respectivamente:

$$N_{4i}[\tau_4] = \int_0^1 \psi_4^2[x_4, \tau_4] \, dx_4 \tag{4.169}$$

$$\mu_{4i}[\tau_4]cos[\mu_{4i}[\tau_4]] + B_4[a_4[\tau_4] + \theta_4^*[1,\tau_4]]sen[\mu_{4i}[\tau_4]] = 0$$
(4.170)

onde $B_4[a_4[\tau_4] + \theta_4^*[1, \tau_4]]$ é dado pela equação (4.160).

Aplicando o operador integral $\int_0^1 \psi_{4i} dx_4$ nos dois lados da equação (4.156), temos:

$$\int_{0}^{1} \psi_{4_{i}}[x_{4},\tau_{4}] \frac{\partial^{2} \theta_{4}^{*}[x_{4},\tau_{4}]}{\partial x_{4}^{2}} dx_{4} = \int_{0}^{1} \psi_{4_{i}}[x_{4},\tau_{4}] \frac{\partial \theta_{4}^{*}[x_{4},\tau_{4}]}{\partial \tau_{4}} dx_{4} + \frac{\partial a_{4}[\tau_{4}]}{\partial \tau_{4}} \int_{0}^{1} \psi_{4_{i}}[x_{4},\tau_{4}] x_{4} dx_{4}$$

$$(4.171)$$

Utilizando a segunda fórmula de Green no termo do lado esquerdo da equação acima obtemos:

$$\int_{0}^{1} \psi_{4i}[x_{4},\tau_{4}] \frac{\partial^{2} \theta_{4}^{*}[x_{4},\tau_{4}]}{\partial x_{4}^{2}} dx_{4} = \int_{0}^{1} \theta_{4}^{*}[x_{4},\tau_{4}] \frac{\partial^{2} \psi_{4i}[x_{4},\tau_{4}]}{\partial x_{4}^{2}} dx_{4}$$
(4.172)

+
$$\left[\psi_{4_{i}}[x_{4},\tau_{4}]\frac{\partial\theta_{4}^{*}[x_{4},\tau_{4}]}{\partial x_{4}}-\theta_{4}^{*}[x_{4},\tau_{4}]\frac{\partial\psi_{4_{i}}[x_{4},\tau_{4}]}{\partial x_{4}}\right]_{0}^{1}$$

onde:

$$\left[\psi_{4_{i}}[x_{4},\tau_{4}]\frac{\partial\theta_{4}^{*}[x_{4},\tau_{4}]}{\partial x_{4}} - \theta_{4}^{*}[x_{4},\tau_{4}]\frac{\partial\psi_{4_{i}}[x_{4},\tau_{4}]}{\partial x_{4}}\right]_{0}^{1} = 0$$
(4.173)

e

$$\int_{0}^{1} \theta_{4}^{*}[x_{4},\tau_{4}] \frac{\partial^{2} \psi_{4i}[x_{4},\tau_{4}]}{\partial x_{4}^{2}} dx_{4} = -\int_{0}^{1} \theta_{4}^{*}[x_{4},\tau_{4}] \mu_{4i}^{2}[\tau_{4}] \psi_{4i}[x_{4},\tau_{4}] dx_{4} \qquad (4.174)$$

Aplicando o teorema de Leibniz no primeiro termo do lado direito da equação (4.171), temos:

$$\int_{0}^{1} \psi_{4_{i}}[x_{4},\tau_{4}] \frac{\partial \theta_{4}^{*}[x_{4},\tau_{4}]}{\partial \tau_{4}} dx_{4}$$

$$= \frac{\partial \int_{0}^{1} \theta_{4}^{*}[x_{4},\tau_{4}] \psi_{4_{i}}[x_{4},\tau_{4}] dx_{4}}{\partial \tau_{4}} - \int_{0}^{1} \theta_{4}^{*}[x_{4},\tau_{4}] \frac{\partial \psi_{4_{i}}[x_{4},\tau_{4}]}{\partial x_{4}} dx_{4}$$
(4.175)

A condição inicial, equação (4.157), pode ser transformada assim como foi feito para a equação (4.156):

$$\int_0^1 \psi_{4_i}[x_4, \tau_4] \theta_4^*[x_4, 0] \, dx_4 = \int_0^1 \psi_{4_i}[x_4, \tau_4] x_4(U_d(x_4) - a_4[0]) \, dx_4 \tag{4.176}$$

Substituindo as equações (4.172-175) na equação (4.171), e depois de alguma manipulação matemática, obtemos a equação (4.177), que juntamente com a equação (4.176) formam o sistema de EDOs abaixo:

$$\frac{d\overline{\theta_{4_{l}}}^{*}[\tau_{4}]}{d\tau_{4}} + \sum_{j=1}^{\infty} \left(\delta_{ij} \mu_{4_{i}}^{2}[\tau_{4}] - \int_{0}^{1} \frac{\psi_{4_{j}}[x_{4},\tau_{4}]}{N_{4_{j}}[\tau_{4}]} \frac{\partial\psi_{4_{i}}[x_{4},\tau_{4}]}{\partial x_{4}} dx_{4} \right) \overline{\theta_{4_{j}}}^{*}[\tau_{4}]$$
(4.177)

$$= -\frac{da_{4}[\tau_{4}]}{d\tau_{4}} \int_{0}^{1} \psi_{4i}[x_{4}, \tau_{4}] x_{4} dx_{4}$$
$$\overline{\theta_{4i}}^{*}[0] = \int_{0}^{1} U_{d}(x_{4}) \psi_{4i}[x_{4}, 0] x_{4} dx_{4} - a_{4}[0] \int_{0}^{1} \psi_{4i}[x_{4}, 0] x_{4} dx_{4}$$
(4.178)

onde:

$$a_{4}[\tau_{4}] = \frac{H_{4}}{1 + B_{4}[a_{4}[\tau_{4}] + \theta_{4}^{*}[1,\tau_{4}]]}$$
(4.179)

$$B_{4}[a_{4}[\tau_{4}] + \theta_{4}^{*}[1,\tau_{4}]] = Bic_{4} + Bir_{4}(a_{4}[\tau_{4}] + \theta_{4}^{*}[1,\tau_{4}])^{3} + \frac{\rho_{vg,s}[a_{4}[\tau_{4}] + \theta_{4}^{*}[1,\tau_{4}]]Bim_{4}}{\rho_{v,o}} - 1$$

$$(4.180)$$

$$\rho_{\nu g,s}[a_4[\tau_4] + \theta_4^*[1,\tau_4]] = \frac{1,323}{T_{\infty}(a_4[\tau_4] + \theta_4^*[1,\tau_4])^2} \exp\left[\frac{22,49 - 6141}{T_{\infty}(a_4[\tau_4] + \theta_4^*[1,\tau_4])}\right]$$
(4.181)

$$\theta_4^*[1,\tau_4] = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\overline{\theta_{4_i}^*[\tau_4]}\psi_{4_i}[1,\tau_4]}{N_{4_i}[\tau_4]}$$
(4.182)

e ψ_{4_i} é dado pela equação (4.168), e N_{4_i} é dado pela equação (4.169).

Como visto no item 4.1 deste capítulo, precisamos obter também as equações diferenciais para os autovalores $\mu_{4i}[\tau_4]$ e para o coeficiente $a_4[\tau_4]$. Novamente as equações (4.170) e (4.179) são diferenciadas em relação a τ_4 . As equações diferenciadas e suas condições iniciais para $\mu_{4i}[\tau_4]$ e $a_4[\tau_4]$, respectivamente, são:

$$\frac{\partial \mu_{4_{i}}[\tau_{4}]}{\partial \tau_{4}} (\cos[\mu_{4_{i}}[\tau_{4}]] - \mu_{4_{i}}[\tau_{4}] sen[\mu_{4_{i}}[\tau_{4}]] + B_{4}[a_{4}[\tau_{4}] + \theta_{4}^{*}[1,\tau_{4}]] cos[\mu_{4_{i}}[\tau_{4}]]) + \frac{\partial B_{4}[a_{4}[\tau_{4}] + \theta_{4}^{*}[1,\tau_{4}]]}{\partial \tau_{4}} sen[\mu_{4_{i}}[\tau_{4}]] = 0$$
(4.183)

$$\mu_{4_i}[0]cos[\mu_{4_i}[0]] + B_4[a_4[0] + \theta_4^*[1,0]]sen[\mu_{4_i}[0]] = 0$$
(4.184)

$$\frac{\partial a_4[\tau_4]}{\partial \tau_4} (1 + B_4[a_4[\tau_4] + \theta_4^*[1, \tau_4]])
+ \frac{\partial B_4[a_4[\tau_4] + \theta_4^*[1, \tau_4]]}{\partial \tau_4} a_4[\tau_4] = 0$$
(4.185)

$$a_4[0] = \frac{H_4}{1 + B_4[a_4[0] + \theta_4^*[1,0]]}$$
(4.186)

onde $B_4[a_4[\tau_4] + \theta_4^*[1,\tau_4]]$ é dado pela equação (4.180) e $\theta_4^*[1,\tau_4]$ é dado pela equação (4.182).

As equações (4.177-178) e (4.183-4.186) formam um sistema de EDOs acoplado. Após o truncamento em determinada ordem M, que garanta a convergência, este sistema será resolvido numericamente. A distribuição de temperatura na gotícula $\theta_4^*[x_4, \tau_4]$, é obtida através da fórmula da inversa (eq. (4.164)) aplicada aos potenciais transformados $\overline{\theta_{4_l}}^*[\tau_4]$ resultantes da solução numérica do sistema de EDOs. O campo de temperatura original pode ser obtido somando-se o filtro e a distribuição de temperatura representada pelo problema filtrado $\theta_4^*[x_4, \tau_4]$ (eq. (4.152)), e retomando as mudanças de variáveis realizadas.
5. Resultados e discussão

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos através da aplicação da Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) no problema de solidificação de uma gotícula de água super-resfriada. Na primeira parte, uma verificação do algoritmo desenvolvido a partir da metodologia apresentada no capítulo anterior será realizada através da análise de um modelo mais simples. Esse modelo, que considera apenas convecção como condição de contorno na superfície externa da gotícula, terá seus resultados comparados com resultados numéricos, obtidos através da rotina NDSolve do Mathematica v11.3, e também com resultados obtidos por TABAKOVA et al. (2010). Serão analisadas as etapas 1 e 3 (super-resfriamento e solidificação). A etapa 4 não será analisada nesta primeira parte, visto que a metodologia empregada em sua solução é idêntica a da etapa 1. Em um segundo momento, será feita a validação deste modelo e do algoritmo desenvolvidos, através da comparação com resultados experimentais, obtidos por HINDMARSH et al. (2003), para o congelamento completo de uma gotícula de água imersa em uma corrente de ar, considerando convecção, radiação e resfriamento evaporativo atuantes na transferência de calor entre a gotícula e o ambiente externo. Para as soluções via GITT, os sistemas de EDOs acoplados obtidos através da metodologia apresentada no Capítulo 4 foram resolvidos através da rotina NDSolve do Mathematica v11.3. O computador utilizado foi um MacBook Pro com processador Intel Core i5 de 2GHz de memória RAM.

5.1 Verificação do algoritmo

5.1.1 Etapa 1: Super-resfriamento somente com convecção

Zerando os termos referentes à transferência de calor por radiação e resfriamento evaporativo no algoritmo desenvolvido a partir da metodologia apresentada no Capítulo 4 deste trabalho, pode-se analisar o resfriamento de uma gotícula sujeita apenas a convecção na sua superfície externa. A solução híbrida numérico-analítica proposta foi então comparada com uma solução puramente numérica do sistema diferencial parcial formulado, fornecida pelo uso da rotina *NDSolve* do software *Mathematica* v11.3. Os dados de entrada adimensionais usados para essa primeira simulação são apresentados na Tabela 5.1.

Parâmetros	Valores
U _{1,0}	2
Bic ₁	10

Tabela 5.1 – Dados de entrada adimensionais para a simulação de condução de calor em uma gota esférica sem mudança de fase.

Para a simulação relativa aos dados de entrada presentes na Tabela 5.1, a convergência da temperatura adimensional $U_1(x_1, \tau_1)$ foi testada em três pontos do domínio espacial. Foram escolhidos o centro da gotícula ($x_1 = 0$), a superfície da gotícula $(x_1 = 1)$ e um ponto intermediário no interior da gota $(x_1 = 0.5)$. A escolha destes três pontos permite uma boa amostragem para representar a convergência da temperatura em todo o domínio. Para testar a convergência da solução em relação ao tempo, a convergência da temperatura nos três pontos citados acima foi avaliada para dois valores da variável de tempo adimensional τ_l . A Tabela 5.2 ilustra a convergência da temperatura nesses pontos quando $\tau_l = 0.5$, que representa um valor de τ_l em que as temperaturas na gotícula já estão próximas ao regime permanente ($U_1 = 1$). Para este caso podemos ver que a convergência para o quinto dígito significativo foi alcançada já para M=5. A Tabela 5.3 apresenta a convergência da temperatura quando $\tau_l = 0.01$, sendo este valor de τ_l suficientemente pequeno para representar o início do resfriamento da gotícula, quando o gradiente de temperatura ainda é alto. Neste caso podemos ver que a convergência para o quinto dígito significativo foi alcançada para M=10. Como pode-se ver nas Tabelas 5.2 e 5.3, a convergência da solução via GITT é mais lenta para valores de τ_1 próximos ao início do resfriamento, como esperado para expansões em autofunções.

Tabela 5.2 – Valores adimensionais da temperatura $U_l(x_l, \tau_l)$ no centro, no interior e na superfície da gotícula para $\tau_1 = 0.5$, com diferentes valores de *M*.

М	U1 [0,0.5]	U1 [0.5,0.5]	U ₁ [1,0.5]
1	1.0345	1.0240	1.0036
5	1.0345	1.0240	1.0036
10	1.0345	1.0240	1.0036

М	<i>U</i> ₁ [0,0.01]	U ₁ [0.5,0.01]	<i>U</i> ₁ [1,0.01]
1	2.7761	2.2379	1.1882
5	2.0329	2.0030	1.3934
10	1.9999	1.9998	1.3961
15	2.0000	1.9998	1.3961
20	2.0000	1.9998	1.3961

Tabela 5.3 – Valores adimensionais da temperatura $U_l(x_l, \tau_l)$ no centro, no interior e na superfície da gotícula para $\tau_1 = 0.01$, com diferentes valores de *M*.

A comparação entre as soluções híbrida numérico-analítica e puramente numérica pode ser vista na Figura 5.1. Os resultados são plotados ao longo do tempo para a variação da temperatura adimensional em diferentes posições $x_1 = 0, 0.5, 0.75 e$ 1, sendo que a linha continua representa a solução por GITT para M=20, e a linha pontilhada representa a solução numérica pela *NDSolve*. Como pode ser visto abaixo, os resultados comparados possuem uma excelente concordância entre si.



Figura 5.1: Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica (para M = 20) e a solução puramente numérica via *NDSolve* (linhas tracejadas na cor preta) para a variação da temperatura adimensional ao longo do tempo em diferentes posições, $x_1 = 0, 0.5, 0.75 e 1, Bic_1 = 10$.

Como discutido no Capítulo 4 deste trabalho, para problemas que envolvem a convecção de calor, o número de Biot (Bic_1) é um importante parâmetro adimensional. Ele representa a razão entre a resistência térmica para condução e a resistência térmica para a convecção na superfície da gotícula. Para valores baixos de Bic_1 a temperatura dentro da gotícula tende a ser uniforme.

Para os dados apresentados na Tabela 5.1, o número de Biot (Bic_1) é igual à 10. Mais duas simulações foram realizadas comparando a solução via GITT (para M=20) e a solução numérica para verificar a concordância entre as soluções em relação a variação do número de Biot. Os resultados para $Bic_1 = 100$ e $Bic_1 = 1$ são mostrados nas Figuras 5.2 e 5.3 respectivamente.



Figura 5.2: Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica (para M = 20) e a solução puramente numérica via *NDSolve* (linhas tracejadas na cor preta) para a variação da temperatura adimensional ao longo do tempo em diferentes posições, $x_1 = 0, 0.5, 0.75 e 1$. Para $Bic_1 = 100$.



Figura 5.3: Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica (para M = 20) e a solução puramente numérica via *NDSolve* (linhas tracejadas na cor preta) para a variação da temperatura adimensional ao longo do tempo em diferentes posições, $x_1 = 0, 0.5, 0.75 e 1$. Para $Bic_1 = 1$.

A solução via GITT apresentou excelente concordância com a solução numérica em toda faixa de variação do número de Biot. Como era esperado, os resultados obtidos para baixos números de Biot apresentaram um resfriamento mais lento, e temperatura mais uniforme dentro da gotícula.

5.1.2 Etapa 3: Solidificação somente com convecção

TABAKOVA *et al.* (2010) resolveram analiticamente o problema de Stefan relacionado ao congelamento de uma gotícula de líquido sujeita apenas a convecção em sua superfície externa. O método de perturbação foi aplicado a problemas com números de Stefan (*St*) menores do que 1. Para verificação dos resultados, os autores utilizaram uma solução numérica baseada no método das diferenças finitas.

Assim como neste trabalho, TABAKOVA *et al.* (2010) consideraram que as gotículas mantêm seu volume e forma esférica inicial, que a mudança da massa específica na interface líquido/gelo pode ser desprezada, e que a temperatura da gotícula será considerada uniforme e igual à temperatura de equilíbrio de congelamento no início do processo. Além disso, TABAKOVA *et al.* (2010) consideram que a nucleação ocorre de forma homogênea, com os cristais dispersos uniformemente na gotícula, e sendo assim, as equações (3.14) são utilizadas para representar o movimento da frente de solidificação.

Os resultados obtidos através da GITT, a partir da metodologia apresentada no item 4.3 do Capítulo 4 deste trabalho, são comparados com os resultados obtidos por TABAKOVA *et al.* (2010) para diferentes números de Stefan (*St*) e números de Biot (*Bi*). Nas simulações via GITT, os valores adimensionais de distribuição de temperatura adimensional $U_3(y_3, \tau_3)$, e do tempo de congelamento adimensional τ_3 , apresentaram convergência no quarto dígito significativo para valores de M=20 ou menores, como pode-se ver nas tabelas abaixo:

M	$ au_3$	U3 [1, 0.5]	U3 [1, 0.1]
5	0.5032	1.1123	1.8934
10	0.5033	1.1130	1.8934
15	0.5033	1.1132	1.8934
20	0.5034	1.1133	1.8934
25	0.5034	1.1133	1.8934

Tabela 5.4 – Valores do tempo de congelamento da gotícula e da temperatura na superfície da gotícula $U_3(y_3, \tau_3)$ para $Bic_3 = 1$ e St = 0.01, com diferentes valores da ordem de truncamento M.

Tabela 5.5 – Valores do tempo de congelamento da gotícula e da temperatura na superfície da gotícula $U_3(y_3, \tau_3)$ para $Bic_3 = 10$ e St = 0.01, com diferentes valores da ordem de truncamento M.

М	<i>T</i> 3	U3 [1, 0.2]	U3 [1, 0.1]
5	0.2016	1.0087	1.1082
10	0.2017	1.0088	1.1082
15	0.2017	1.0088	1.1082
20	0.2017	1.0088	1.1082

Tabela 5.6 – Valores do tempo de congelamento da gotícula e da temperatura na superfície da gotícula $U_3(y_3, \tau_3)$ para $Bic_3 = 1$ e St = 0.1, com diferentes valores da ordem de truncamento M.

М	$ au_3$	U3 [1, 0.5]	U3 [1, 0.1]
5	0.5329	1.2968	1.8945
10	0.5337	1.2979	1.8945
15	0.5341	1.2983	1.8945
20	0.5342	1.2984	1.8945
25	0.5342	1.2984	1.8945

As Figuras 5.4 e 5.5 representam a comparação entre os resultados para St = 0.01 e $Bic_3 = 1$, sendo que a ordem de truncamento utilizada para solução via GITT foi M=20. Na Figura 5.4 podemos ver que os valores adimensionais da posição da interface $v[\tau_3]$ apresentam boa concordância entre a GITT e o método de perturbação. A Figura 5.5 compara os perfis de temperatura adimensionais na fase sólida para $\tau_3 = 0.2$ e $\tau_3 = 0.5$. É possível ver que para $\tau_3 = 0.2$, os perfis de temperatura obtidos pela GITT e pelo método de perturbação apresentam boa concordância. Para $\tau_3 = 0.5$ os perfis apresentam uma pequena diferença entre si, sendo que essa mesma diferença pode ser notada quando

os resultados obtidos por TABAKOVA *et al.* (2010) são comparados com o método numérico utilizado pelos autores para verificação dos resultados. Esta diferença pode ser explicada, visto que segundo TABAKOVA *et al.* (2010), quanto maior o número de Stefan e mais próximo do tempo de congelamento, menos consistentes são os resultados obtidos pelo método de perturbação utilizado. Para este caso $\tau_3 = 0.5$ é um tempo muito próximo do tempo de congelamento ($\tau_3 = 0.50339$), e por isso a solução obtida pelo método de perturbação se distancia da solução via GITT.



Figura 5.4: Gráfico da posição da interface adimensional $v[\tau_3]$ versus tempo adimensional τ_3 . Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica GITT (M = 20) (linha contínua na cor preta) e o método de perturbação proposto por TABAKOVA *et al.* (2010) (linha tracejada na cor vermelha) para $Bic_3 = 1, St = 0.01$.



Figura 5.5: Gráfico distribuição de temperatura adimensional $U_3(y_3, \tau_3)$ versus comprimento adimensional y_3 . Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica GITT (M = 20) (linhas contínuas) e o método de perturbação proposto por TABAKOVA *et al.* (2010) (linhas tracejadas) para os perfis de temperatura em $\tau_3 = 0.2$ e $\tau_3 = 0.5$. Neste caso temos $Bic_3 = 1$ e St = 0.01.

A Figura 5.6 compara a posição da interface em relação ao tempo $v[\tau_3]$, quando Bic₃ = 10 e St = 0.01. A comparação demonstra que, para baixos números de Stefan, mesmo com o aumento do número de Biot, a solução via GITT (para M = 20) continua praticamente coincidindo com a solução alcançada via método de perturbação.



Figura 5.6: Gráfico posição da interface adimensional $v[\tau_3]$ versus tempo adimensional τ_3 . Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica GITT (M = 20) (linha contínua na cor preta) e o método de perturbação proposto por TABAKOVA et al. (2010) (linha tracejada na cor vermelha) para Bic₃ = 10 e St = 0.01.

A Figura 5.7 compara a posição da interface em relação ao tempo quando $Bic_3 = 1 e St = 0.1$. Neste caso, devido ao aumento do número de Stefan, o resultado via GITT se afasta do resultado via método de perturbação quando nos aproximamos do tempo de congelamento. Como dito anteriormente, quanto maior o número de Stefan e mais próximo do tempo de congelamento, piores são os resultados obtidos pelo método de perturbação utilizado. Para efeito de comparação, a Figura 5.8 mostra a posição da interface em relação ao tempo para a solução via GITT e para a solução numérica baseada no método das diferenças finitas utilizado por TABAKOVA *et al.* (2010) para verificação dos resultados obtidos em seu trabalho. Podemos ver na Figura 5.8 que a solução via GITT apresentou boa concordância com a solução numérica, mesmo para tempos próximos ao tempo de congelamento.



Figura 5.7: Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica GITT (M = 20) (linha contínua na cor preta) e o método de perturbação proposto por TABAKOVA *et al.* (2010) (linha tracejada na cor vermelha) para a variação da posição da interface adimensional $v[\tau_3]$ com o tempo τ_3 . Para $Bic_3 = 1 \text{ e } St = 0.1$.



Figura 5.8: Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica GITT (M = 20) (linha contínua na cor preta) e a solução numérica por diferenças finitas utilizada na verificação por TABAKOVA *et al.* (2010) (linha tracejada na cor azul) para a variação da posição da interface adimensional $v[\tau_3]$ com o tempo τ_3 . Para $Bic_3 = 1$ e St = 0.1.

5.2 Validação do modelo: Análise completa do congelamento com convecção, radiação e resfriamento evaporativo

O modelo para solução de congelamento de uma gotícula de água super-resfriada será validado através da comparação com os resultados experimentais obtidos por HINDMARSH *et al.* (2003) para o caso onde: R=0.78mm, $T\infty=-19$ °C, Tn=-18.4 °C *e* v=0.42 m/s. Como descrito anteriormente no Capítulo 2 deste trabalho, HINDMARSH *et al.* (2003) mediram o tempo de congelamento e a temperatura de gotículas de água suspensas por um termopar. As propriedades físicas utilizadas e considerações feitas para representar o modelo físico do experimento, serão discutidas no item 5.2.1. Nos items 5.2.2-5, as etapas serão analisadas separadamente seguindo a metodologia apresentada no Capítulo 4 deste trabalho. No item 5.2.6 os gráficos de cada etapa serão plotados combinados para se obter o gráfico do processo completo de congelamento da gotícula.

5.2.1 Considerações para os dados de entrada da simulação

Como discutido no Capítulo 3, o modelo matemático considera que as propriedades da água permanecem constantes e iguais aos valores dessas propriedades na temperatura de 0 °C, e sendo assim todas as propriedades relacionadas à água e ao gelo

nesta seção são consideradas na temperatura de 0 °C. As propriedades relacionadas ao ar foram avaliadas na temperatura de -19 °C.

Ao examinarmos os dados utilizados por HINDMARSH *et al.* (2003) em seu modelo teórico, os valores para duas propriedades não correspondem aos valores encontrados na literatura: o valor para a viscosidade do ar a -19 ^{o}C , e o valor para a condutividade térmica do gelo. A viscosidade do ar utilizada por HINDMARSH *et al.* (2003) foi de 0.0000473 *Ns/m*². Este valor é muito acima do valor encontrado na literatura. Em INCROPERA & DEWITT (1996) por exemplo, o valor da viscosidade do ar para essa temperatura é 0.00001616 *Ns/m*². O valor de condutividade térmica para o gelo encontrado em INCROPERA & DEWITT (1996) foi de 1.88 *W/mK*. Esse valor também difere do valor apresentado no trabalho de HINDMARSH *et al.* (2003), que foi de 2.26 *W/mK*. Por compatibilidade com os valores presentes na literatura em geral, os valores encontrados em INCROPERA & DEWITT (1996) para viscosidade do ar e para a condutividade térmica do gelo foram utilizados neste trabalho.

Na descrição do experimento realizado, HINDMARSH *et al.* (2003) afirmam que as correntes de ar utilizadas tiveram a umidade retirada através de sílica gel. Apesar disso, os autores apresentam uma correlação para os valores da massa específica de vapor de água no ar ($\rho_{\nu,\infty}$). A correlação apresentada por HINDMARSH *et al.* (2003) para $\rho_{\nu,\infty}$ foi retirada de DORSEY (1940), e pode ser vista na equação abaixo:

$$\rho_{\nu,\infty} = 1/\rho_{\nu,o}(\exp\left[-0.0773T_{\infty}\right])$$
(5.2)

onde $\rho_{v,o} = 0.004847 \ kg/m^3$, é a massa específica do vapor saturado de água na temperatura de 273 K e T_{∞} é a temperatura do ar em Kelvin.

O uso dessa correlação levaria a um valor para $\rho_{\nu,\infty}$ em unidades de m^3/kg , o que seria um erro de unidade para esta propriedade. Portanto, no modelo analisado via GITT será considerado que $\rho_{\nu,\infty} = 0$, ou seja, a corrente externa à gotícula será assumida ser de ar seco.

Em relação à massa específica do vapor na superfície da gotícula ($\rho_{vl,s}$ ou $\rho_{vl,s}$), nenhuma fórmula foi mencionada em HINDMARSH *et al.* (2003) para variação desta propriedade com a temperatura. Como explicado no Capítulo 3, a equação que associa $\rho_{v,s}$ com a temperatura na superfície da gotícula pode ser obtida através da equação de Clapeyron e da equação da pressão de vapor saturado. As correlações apresentadas por BOHREN & ALBRECHT (1998) foram utilizadas no presente estudo, e podem ser consultadas nas equações (3.5) e (3.15) do Capítulo 3.

Para o cálculo dos coeficientes de transferência calor por convecção (h) e massa (h_m), BEARD & PRUPPACHER (1970, 1971) desenvolveram um experimento para gotículas de água em queda livre, através do qual eles chegaram a novas correlações para os números de Nusselt e Sherwood. As correlações obtidas por BEARD & PRUPPACHER (1970, 1971) são apropriadas para o caso do congelamento de gotículas de água imersas em uma corrente de ar, devido à similaridade das condições para transferência de calor e massa nos dois casos, e por isso essas correlações foram adotadas para o cálculo dos coeficientes de transferência de calor por convecção (h) e massa (h_m) foram calculados através das relações obtidas por BEARD & PRUPPACHER (1970, 1971) para os números de Nusselt e Sherwood:

$$Nu = 1.56 + 0.616(Re^{1/2})(Pr^{1/3})$$
(5.3)

$$Sh = 1.56 + 0.616(Re^{1/2})(Sc^{1/3})$$
 (5.4)

Com base nas informações descritas acima, as Tabelas 5.7 e 5.8 mostram respectivamente, os valores das propriedades físicas utilizadas e os parâmetros adimensionais utilizados para o cálculo dos coeficientes de calor por convecção (h) e massa (h_m) :

Propriedades	Valores	Fonte
$D_a (m^2/2)$	2.060 x 10 ⁻⁵	HINDMARSH et al. (2003)
$c_l (J/kgK)$	4217	HINDMARSH et al. (2003)
$c_g (J/kgK)$	2040	HINDMARSH et al. (2003)
$k_a (J/msK)$	0.0234	HINDMARSH et al. (2003)
$k_l (J/msK)$	0.569	HINDMARSH et al. (2003)
$k_g (J/msK)$	1.88	INCROPERA & DEWITT (1996)
L (J/kg)	3.33 x 10 ⁵	HINDMARSH et al. (2003)
$L_e(J/kg)$	2.502×10^6	HINDMARSH et al. (2003)
$L_s(J/kg)$	2.838 x 10 ⁶	HINDMARSH et al. (2003)
ε	0.96	HINDMARSH et al. (2003)
$\mu_a (Ns/m^2)$	1.663 x 10 ⁻⁵	INCROPERA & DEWITT (1996)
$\rho_a (kg/m^3)$	1.3317	HINDMARSH et al. (2003)
$\rho_l (kg/m^3)$	1000	HINDMARSH et al. (2003)
$\rho_g (kg/m^3)$	920	HINDMARSH et al. (2003)
$\rho_{v,o} (kg/m^3)$	4.8473 x 10 ⁻³	HINDMARSH et al. (2003)
$\rho_{vl,s} \left(kg/m^3 \right)$	Ver Eq. (3.5) – Cap. 3	HINDMARSH et al. (2004)
$\rho_{vg,s} \left(kg/m^3 \right)$	Ver Eq. (3.15) – Cap. 3	HINDMARSH et al. (2004)
$\rho_{v,\infty} (kg/m^3)$	0	-
σ	5.670 x 10 ⁻⁸	HINDMARSH et al. (2003)

Tabela 5.7 – Propriedades físicas utilizadas na validação. As propriedades da água e do gelo foram avaliadas a 0 °C. As propriedades do ar foram avaliadas a -19 °C.

Tabela 5.8 – Parâmetros adimensionais para cálculo dos coeficientes de calor por convecção (h) e massa (h_m) .

Parâmetro	Correlação
Nusselt (Nu)	2 <i>Rh/k_a</i>
Prandtl (Pr)	$\mu_a/\rho_a \alpha_a$
Reynolds (Re)	$2R\rho_a v_\infty/\mu_a$
Schmidt (Sc)	$\mu_a/\rho_a D_a$
Sherwood (Sh)	$2Rh_m/D_a$

No experimento realizado por HINDMARSH *et al.* (2003), a gotícula foi suspensa por um termopar, no entanto, o modelo matemático utilizado neste trabalho (Capítulo 3) despreza a presença do termopar dentro da gotícula. A justificativa para isso reside no fato de que HINDMARSH *et al.* (2003) relatam que trabalhos experimentais encontrados na literatura já demonstraram que, para gotículas e termopares com tamanhos similares aos utilizados no ensaio, a condução de calor através do termopar é desprezível. Essa informação foi confirmada através das simulações numéricas realizadas por HINDMARSH *et al.* (2003).

5.2.2 Etapa 1: Super-resfriamento

Considerando a metodologia apresentada no Capítulo 4, a solução para a etapa de super-resfriamento (etapa 1) obtida via GITT foi comparada aos resultados experimentais obtidos por HINDMARSH *et al.* (2003). A Tabela 5.9 apresenta a convergência da temperatura T[r, t] da solução via GITT para diferentes valores de r e t. Foram escolhidos três pontos para representar a convergência da temperatura em todo o domínio (r=0, R/2 e R). Para testar a convergência da solução em relação ao tempo, a temperatura nos três pontos citados acima foi testada para dois valores da variável t, um próximo ao início do super-resfriamento e outro próximo ao fim desta etapa. A Tabela 5.10 apresenta a convergência da solução para o tempo de duração da etapa de super-resfriamento (etapa 1).

М	T [0,5]	T [0,20]	T [R/2,5]	T [R/2,20]	T [R,5]	T [R,20]
5	-3.4912	-16.8407	-3.8240	-16.9129	-4.7968	-17.1250
10	-3.4910	-16.8407	-3.8240	-16.9129	-4.7968	-17.1250
15	-3.4911	-16.8408	-3.8241	-16.9130	-4.7969	-17.1251
20	-3.4911	-16.8408	-3.8241	-16.9130	-4.7969	-17.1251
25	-3.4911	-16.8408	-3.8241	-16.9130	-4.7969	-17.1251
30	-3.4911	-16.8408	-3.8241	-16.9130	-4.7969	-17.1251

Tabela 5.9 – Valores da temperatura da gotícula T[r, t] em °C, para diferentes valores da ordem de truncamento *M*. Para *R*=0.78mm, T_{∞} =-19 °C, *Tn*=-18.4 °C e *v*=0.42 m/s.

Tabela 5.10 – Valores do tempo (*t*) necessário para alcançar a temperatura de nucleação, para diferentes valores da ordem de truncamento *M*. Para R=0.78mm, $T_{\infty}=-19$ °C, Tn=-18.4 °C e v=0.42 m/s. Tempo foi medido em segundos.

М	t(s)
5	27.9020
10	27.9018
15	27.9017
20	27.9017
25	27.9017
30	27.9017

Os resultados apresentados nas tabelas acima demonstram o excelente comportamento de convergência da solução obtida via GITT. As temperaturas em todos os pontos escolhidos e para os dois valores da variável t possuem pelo menos 5 dígitos significativos convergidos para ordens de truncamento tão baixas quanto M = 15. A utilização de duas técnicas de aceleração de convergência (filtro implícito e problema de autovalor não-linear) combinadas provou ser eficiente na redução do custo computacional.

Observando a Tabela 5.9 nota-se que o valor da temperatura é muito próximo para as três posições escolhidas (0, R/2 e R). Isso ocorre porque os valores dos grupos adimensionais Bic_1 , Bim_1 e Bir_1 são muito baixos nessas condições. Para o caso em estudo nesta seção (R=0.78mm, $T\infty=-19 \ ^oC$, $Tn=-18.4 \ ^oC e v=0.42 \ m/s$), temos: $Bic_1 =$ 0.1146, $Bim_1 = 0.0047$ e $Bir_1 = 0.0012$. Como explicado no Capítulo 4, esses grupos representam a razão entre a resistência térmica para condução e a resistência térmica para a troca térmica na superfície das gotículas. Quando temos valores baixos para Bic_1 , Bim_1 e Bir_1 a temperatura dentro da gotícula tende a ser uniforme. As equações que determinam esses grupos adimensionais podem ser vistas abaixo:

$$Bic_1 = \frac{hR}{k_l} \tag{5.5}$$

$$Bim_1 = \frac{h_m L_e R \rho_{\nu,o}}{k_l T_{\infty}}$$
(5.6)

$$Bir_1 = \frac{\varepsilon \sigma R T_{\infty}^3}{k_l} \tag{5.7}$$

onde k_l é a condutividade térmica do líquido, T_{∞} é a temperatura do ar, h é a coeficiente de transferência de calor por convecção, h_m é o coeficiente de transferência de massa, $\rho_{v,o}$ é a massa específica do vapor saturado de água na temperatura de 273 K, L_e é o calor latente de evaporação, ε é a emissividade e σ é a constante de Stefan-Boltzmann.

A Figura 5.9 mostra o gráfico da variação da temperatura no centro da gotícula com o tempo para solução obtida através da GITT (para M = 15) e para o resultado experimental obtido por HINDMARSH *et al.* (2003). Existe um pequeno atraso no início do experimento (linhas pontilhadas em vermelho) que foi levado em conta. Esse atraso, representado por um segmento reto no início do processo, é resultado do atraso entre o tempo de inicialização do aparato experimental em relação ao tempo de medição de temperatura na gotícula, e tem duração de aproximadamente 1.5 segundos, e por este motivo o gráfico da simulação se inicia em 1.5 segundos ao invés de zero. Pode-se observar que os resultados obtidos via GITT apresentam boa concordância com os resultados experimentais. O tempo necessário para a gotícula alcançar a temperatura de nucleação foi de 29 segundos no experimento, e aproximadamente 28 segundos pela simulação. As possíveis causas para esta diferença serão discutidas na seção 5.2.6 deste capítulo.



Figura 5.9: Gráfico da temperatura no centro da gotícula T(0,t) versus tempo t. Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica GITT (M = 15) (linha contínua na cor preta) e o experimento realizado por HINDMARSH *et al.* (2003) (linha tracejada na cor vermelha). Para R=0.78mm, $T_{\infty}=-19$ °C, Tn=-18.4 °C e v=0.42 m/s.

Como descrito na introdução deste capítulo, o sistema de EDOs acoplado obtido através da aplicação da metodologia apresentada no Capítulo 4 foi resolvido através da rotina *NDSolve* do *Mathematica* v11.3. Para M=15, o tempo de CPU gasto, ou seja, o tempo que o *NDSolve* demorou para resolver o sistema de EDOs para a etapa de super-resfriamento (etapa 1) foi de 1.24109 segundo. Para M=30, o tempo de CPU foi de 7.02006 segundos. Esses dados demonstram o baixo custo computacional relativo à aplicação da GITT nesta etapa.

5.2.3 Etapa 2: Recalescência

Como explicado anteriormente, foi assumi que a etapa de recalescência ocorre instantaneamente, e sendo assim a aplicação da GITT não é necessária neste caso. Utilizando as equações (3.7-3.9) podemos calcular os valores de ϕ e R_{ini} , que são dados iniciais para a simulação da etapa de solidificação (etapa 3). Aplicando os valores das propriedades físicas presentes na Tabela 5.7 e os dados relativos ao caso estudado ($R=0.78 \text{ mm}, T\infty=-19 \text{ °C}, Tn=-18.4 \text{ °C} e v=0.42 \text{ m/s}$) nas equações (3.7-3.9), obtemos $\phi=0.7385$ e $R_{ini}=0.758 \text{ mm}$.

5.2.4 Etapa 3: Solidificação

A etapa de solidificação (etapa 3) foi solucionada partindo de duas hipóteses diferentes para localização do volume de gelo formado na etapa recalescente (etapa 2). A primeira hipótese considera a formação de uma casca esférica na superfície da gotícula, onde a posição inicial da frente de solidificação é igual à R_{ini} . Seguindo metodologia apresentada no Capítulo 4, a GITT foi empregada na solução da etapa 3 considerando esta primeira hipótese. A Tabela 5.11 apresenta a convergência da solução para o tempo de duração da etapa de solidificação e as temperaturas superficiais para dois valores da variável t, um próximo ao início da solidificação e outro próximo ao fim desta etapa. A temperatura superfícial para t = 5 s apresentou convergência muito rápida, alcançando 4 dígitos significativos convergidos para M = 5. Para o tempo de duração da etapa e a temperatura superfícial para t = 23 s, a convergência para seis dígitos significativos só foi alcançada, na pior situação, para M = 60. Entretanto, para ordens de truncamento tão baixas quanto M = 30 obtêm-se quatro dígitos significativos convergidos.

М	<i>t(s)</i>	T [R,5](°C)	T [R,23] (°C)
5	24.1009	-0.2131	-2.4776
10	24.1065	-0.2131	-2.4746
15	24.1083	-0.2131	-2.4736
20	24.1093	-0.2131	-2.4731
25	24.1098	-0.2131	-2.4728
30	24.1102	-0.2131	-2.4726
35	24.1104	-0.2131	-2.4725
40	24.1106	-0.2131	-2.4724
45	24.1108	-0.2131	-2.4723
50	24.1109	-0.2131	-2.4722
55	24.1110	-0.2131	-2.4721
60	24.1111	-0.2131	-2.4721

Tabela 5.11 – Valores do tempo de congelamento da gotícula e da temperatura na superfície da gotícula para a etapa de solidificação, considerando a formação de uma casca solidificada. Para R=0.78mm, $T_{\infty}=-19$ °C, Tn=-18.4 °C e v=0.42 m/s.

A segunda hipótese considera uma distribuição homogênea do gelo formado na etapa recalescente por toda gotícula. Neste caso a posição inicial da interface seria na superfície externa da gotícula, mas o calor latente de fusão L seria substituído por um novo valor relativo à mistura água-gelo. A Tabela 5.12 apresenta a convergência da solução via GITT da etapa 3 considerando a segunda hipótese. Os valores para o tempo de duração da etapa de solidificação e as temperaturas superfíciais para dois valores da variável t, são mostrados abaixo. O comportamento da convergência da solução para a segunda hipótese é bem parecido com o da primeira hipótese. Novamente a temperatura superfícial para t = 5 s apresentou convergência muito rápida, alcançando 3 dígitos significativos convergidos para M = 5. O tempo de duração da etapa e a temperatura superfícial para t = 23 s alcançaram, respectivamente, 6 e 5 dígitos significativos convergidos para M = 60.

Tabela 5.12 – Valores do tempo de congelamento da gotícula e da temperatura na superfície da gotícula para a etapa de solidificação, considerando o gelo homogeneamente disperso no interior da gotícula. Para R=0.78mm, T_{∞} =-19 °C, Tn=-18.4 °C e v=0.42 m/s.

М	t(s)	T (R,5) (°C)	T (R,23) (°C)
5	23.5905	-0.0968	-2.8479
10	23.5961	-0.0968	-2.8418
15	23.5979	-0.0968	-2.8400
20	23.5992	-0.0968	-2.8383
25	23.5997	-0.0968	-2.8378
30	23.6002	-0.0968	-2.8372
35	23.6003	-0.0968	-2.8371
40	23.6006	-0.0968	-2.8369
45	23.6007	-0.0968	-2.8368
50	23.6008	-0.0968	-2.8367
55	23.6009	-0.0968	-2.8366
60	23.6009	-0.0968	-2.8366

Os resultados obtidos para ambas condições foram bem próximos, sendo que o tempo de congelamento para a primeira hipótese foi 24.11 segundos e o tempo para a segunda hipótese foi 23.60 segundos. O tempo de congelamento obtido experimentalmente por HINDMARSH *et al.* (2003) foi de aproximadamente 20 segundos. Mesmo que por uma pequena margem, a segunda hipótese apresentou resultado mais próximo ao obtido experimentalmente. A diferença entre os valores experimentais e os obtidos através da GITT será discutida na seção 5.2.6 deste capítulo. A influência do número de Stefan nesta etapa será discutida na seção 5.4 deste capítulo.

A etapa de solidificação (etapa 3) é a etapa mais complexa da análise do congelamento da gotícula super-resfriada devido a presença de um contorno móvel, e por isso é esperado que o tempo de CPU gasto para que o sistema de EDOs acoplado seja resolvido nesta etapa seja maior do que o das outras. Para M=30, o tempo de CPU gasto para resolver o sistema de EDOs relativo à etapa 3 foi de 38.8321 segundos, e para M=60, o tempo de CPU foi de 257.345 segundos. De fato, podemos ver que para M=30, o tempo de CPU gasto para resolver o sistema de EDOs da etapa 3 foi bem maior do que o tempo gasto para resolver o sistema de EDOs da etapa 3 foi bem maior do que o tempo de CPU gasto para resolver o sistema de EDOs da etapa 3 foi bem maior do que o tempo de CPU gasto para resolver o sistema de EDOs da etapa 3 foi bem maior do que o tempo de CPU gasto para resolver o sistema de EDOs da etapa 3 foi bem maior do que o tempo de CPU gasto para etapa 1 (38.8321 segundos contra 7.02006 segundos). Ainda sim, a utilização

da GITT proporcionou um baixo custo computacional para solução da etapa 3, visto que o resultado convergido para 6 dígitos significativos (M=60) foi obtido em pouco mais de 4 minutos.

5.2.5 Etapa 4: Resfriamento

A etapa de resfriamento (etapa 4) tem modelagem matemática muito parecida com a etapa de super-resfriamento (etapa 1), e por isso o comportamento da convergência da solução é semelhante nas duas situações, como pode ser visto na Tabela 5.13. Mais uma vez foram escolhidos três pontos para representar a convergência da temperatura em todo o domínio para dois valores da variável t, um próximo ao início da etapa e outro próximo ao fim da etapa. Pode-se notar na Tabela 5.13 que assim como na etapa de superresfriamento (etapa 1), a temperatura na gotícula é praticamente uniforme devido aos baixos valores dos parâmetros adimensionais Bic_4 , $Bim_4 e Bir_4$.

Tabela 5.13 – Valores da temperatura da gotícula T[r, t] em °C, para diferentes valores de M. Para R=0.78mm, $T_{\infty}=-19$ °C, Tn=-18.4 °C e v=0.42 m/s.

М	T [0,53]	T [0,59]	T [R/2,53]	T [R/2,59]	T [R,53]	T [R,59]
5	-7.7852	-17.3451	-7.8615	-17.3639	-8.0886	-17.4201
10	-7.7852	-17.3450	-7.8615	-17.3639	-8.0886	-17.4202
15	-7.7852	-17.3450	-7.8615	-17.3639	-8.0886	-17.4202
20	-7.7852	-17.3450	-7.8615	-17.3639	-8.0886	-17.4202

A Figura 5.10 mostra o gráfico da variação da temperatura no centro da gotícula com o tempo para a solução obtida através da GITT (para M = 15) e para o resultado experimental obtido por HINDMARSH *et al.* (2003), sendo que uma diferença entre as curvas pode ser observada. Essa diferença ocorre porque a etapa de resfriamento (etapa 4) começa em tempos diferentes para a simulação e o experimento. A causa para essa diferença no tempo de início da etapa 4 será discutida no item 5.2.6.



Figura 5.10: Gráfico da temperatura no centro da gotícula T(0,t) versus tempo t. Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica GITT (M = 15) (linha contínua na cor preta) e o experimento realizado por HINDMARSH *et al.* (2003) (linha tracejada na cor vermelha). Para R=0.78mm, $T_{\infty}=-19$ °C, Tn=-18.4 °C e v=0.42 m/s.

O tempo de CPU gasto para solução desta etapa foi de 1.23242 segundo para M=15, e de 6.99764 segundos para M=30. Como era esperado o tempo de CPU gasto nesta etapa foi similar ao tempo de CPU gasto na solução da etapa 1, devido a similaridade entre as modelagens matemáticas destas etapas.

5.2.6 Análise do processo completo para a temperatura no centro da gotícula

A figura 5.11 abaixo mostra a comparação entre o resultado para o processo completo de congelamento da gotícula obtido via GITT e o resultado experimental obtido por HINDMARSH *et al.* (2003). Para a etapa de solidificação (etapa 3) a hipótese que considera uma distribuição homogênea do gelo formado na etapa recalescente foi adotada, já que esta apresentou resultado mais próximo ao resultado experimental como mencionado na seção 5.2.4 deste capítulo. A ordem de truncamento para a solução híbrida aqui reportada foi de M = 60, bem acima do requerido para convergência na escala gráfica.



Figura 5.11: Gráfico da temperatura no centro da gotícula T(0,t) versus tempo t. Comparação entre a solução híbrida numérico-analítica GITT (M = 60) (linha contínua na cor preta) e o experimento realizado por HINDMARSH *et al.* (2003) (linha tracejada na cor vermelha). Para R=0.78mm, $T_{\infty}=-19$ °C, Tn=-18.4 °C e v=0.42 m/s.

Como pode ser visto na Figura 5.11, a solução via GITT apresentou boa concordância com os resultados experimentais, no entanto determinadas diferenças podem ser notadas entre as curvas apresentadas. Alguns fatos observados durante os procedimentos experimentais explicam em parte essas diferenças. Durante a etapa de congelamento, HINDMARSH *et al.* (2003) observaram o aparecimento de bolhas de ar logo abaixo da ponta do termopar. Isso ocorre devido à diferença de solubilidade do ar no gelo e na água. A solubilidade do ar no gelo é muito menor do que na água, e à medida que o gelo vai se formando na superfície externa da gotícula, o ar vai se concentrando na parte que ainda está líquida. Quando a concentração de ar na fase líquida atinge a saturação, bolhas começam a se formar na superfície interna do gelo, o que causa uma alteração no processo de solidificação da água explica a diferença observada no final da etapa de solidificação (etapa 3) entre os dados experimentais e a simulação via GITT, como pode ser visto na Figura 5.12. A Figura 5.13 mostra o surgimento das bolhas de ar em imagens capturadas por HINDMARSH *et al.* (2003).



Figura 5.12: Detalhe retirado da Figura 5.11. Diferença entre a solução via GITT (linha contínua na cor preta) e os resultados experimentais obtidos por HINDMARSH *et al.* (2003) (linha tracejada na cor vermelha).



Figura 5.13: Formação de bolhas de ar dentro das gotículas durante o congelamento. Adaptado de HINDMARSH *et al.* (2003).

A presença de ar dissolvido dentro da gotícula líquida também pode parcilamente explicar a diferença observada na etapa de super-resfriamento (etapa 1). Ar dissolvido em água diminui a condutividade térmica desta substância, e a diminuição da condutividade térmica causa um resfriamento mais lento para a gotícula.

Como explicado na seção 3.2.3, a etapa de congelamento foi modelada a partir de duas hipóteses diferentes: I) considerando o gelo formado na etapa recalescente disperso homogeneamente em meio a gotícula; II) o gelo formado na etapa recalescente se concentrou na superfície da gotícula, formando assim uma casca esférica de gelo. Foi visto na seção 5.2.4, que a hipótese I apresentou melhor resultado quando comparada ao resultado experimental. FEUILLEBOIS *et al.* (1995) já havia afirmado que o este modelo era o mais apropriado para representar a realidade, e essa hipótese foi posteriormente confirmada por trabalhos experimentais (TABAKOVA *et al.*, 2010). A diferença desses modelos em comparação com o resultado experimental pode ser vista nas Figuras 5.14 e 5.15.



Figura 5.14: Gráfico da temperatura no centro da gotícula T(0,t) versus tempo t. Comparação solução via GITT para hipótese I (linha contínua na cor preta), a solução via GITT para hipótese II (linha pontilhada na cor azul) e os resultados experimentais obtidos por HINDMARSH *et al.* (2003) (linha tracejada na cor vermelha). Para R=0.78mm, T_{∞} =-19 °C, Tn=-18.4 °C e v=0.42 m/s.



Figura 5.15: Detalhe retirado da Figura 5.14. Diferença entre a solução via GITT para hipótese I (linha contínua na cor preta), a solução via GITT para hipótese II (linha pontilhada na cor azul) e os dados experimentais obtidos por HINDMARSH *et al.* (2003) (linha tracejada na cor vermelha).

5.3 Influência da convecção, da radiação e do resfriamento evaporativo na temperatura e no tempo de solidificação das gotículas

Nesta seção utilizaremos as mesmas condições simuladas na seção 5.2 (R=0.78mm, $T\infty=-19$ °C, Tn=-18.4 °C e v=0.42 m/s) para analisar a influência dos três modos de transferência de calor presentes na superfície da gotícula. Os fluxos de calor para convecção (q_c), radiação (q_r) e resfriamento evaporativo (q_m) são representados pelas equações (5.8), (5.9) e (5.10) respectivamente.

$$q_c = h(T[R, t] - T_{\infty}) \tag{5.8}$$

$$q_r = \varepsilon \sigma (T[R, t]^4 - T_{\infty}^4)$$
(5.9)

$$q_m = h_m L_e \left(\rho_{\nu l,s} [T[R, t]] - \rho_{\nu l,\infty} \right)$$
(5.10)

onde T[R,t] é a temperatura na superfície da gotícula, t é o tempo, T_{∞} é a temperatura do ar, h é a coeficiente de transferência de calor por convecção, h_m é o coeficiente de transferência de massa, L_e é o calor latente de evaporação, ε é a emissividade, σ é a constante de Stefan-Boltzmann, $\rho_{vl,\infty}$ é massa específica do vapor de água no ar e $\rho_{vl,s}$ é massa específica do vapor de água na superfície da gotícula dada por:

$$\rho_{vl,s}[T[R,t]] = \frac{1,323}{T[R,t]} \exp\left[19,83 - 5417/T[R,t]\right]$$
(5.11)

O gráfico abaixo representa a variação dos fluxos de calor para cada mecanismo de troca térmica em função do tempo ao longo da etapa de super-resfriamento (etapa 1), a partir da solução obtida via GITT:



Figura 5.16: Gráfico fluxo de calor q(t) versus tempo t. Comparação entre os fluxos de calor para convecção (cor preta e linha sólida), radiação (cor azul e linha tracejada) e resfriamento evaporativo (cor vermelha e linha pontilhada). Para R=0.78mm, $T_{\infty}=-19$ °C, Tn=-18.4 °C e v=0.42 m/s.

A contribuição de cada mecanismo na troca térmica entre a gotícula e o ambiente durante a etapa de super-resfriamento (etapa 1) pode ser obtida integrando-se as equações (5.8) a (5.10) entre os limites t = 0 e $t = t_1$, onde t_1 é o tempo de duração da etapa de super-resfriamento (etapa 1). Como era esperado, a convecção é o principal mecanismo de troca térmica entre a gotícula e o ambiente, correspondendo a aproximadamente 58,2% do total do calor trocado durante o tempo de duração da etapa de super-resfriamento (etapa 1), enquanto a parcela relativa ao resfriamento evaporativo e a radiação representaram, respectivamente, 39% e 2,8% deste total.

Quando o tempo se aproxima dos 19 segundos, o resfriamento evaporativo se torna o principal mecanismo de troca térmica. Isso ocorre porque com o passar do tempo a temperatura da superfície da gotícula se aproxima da temperatura ambiente, e a diferença $(T(R, t) - T_{\infty})$ encontrada na equação do fluxo de calor por convecção, se aproxima de zero, enquanto a diferença $(\rho_{vl,s}(T(R,t)) - \rho_{vl,\infty})$ encontrada na equação do fluxo de calor para o resfriamento evaporativo se estabiliza em determinado valor, já que neste caso $\rho_{\nu l,\infty} = 0$. Considere por exemplo o caso extremo, em que a temperatura da superfície da gotícula seja igual à temperatura do ar externo, neste caso q_c seria igual à zero, mas q_m seria igual à 208,91 W/m^2 . Isso significa que, para gotículas com temperaturas próximas à temperatura ambiente, o resfriamento evaporativo é o mecanismo de troca térmica mais importante. A importância do resfriamento evaporativo para temperaturas superficiais próximas à temperatura ambiente também foi observada por STRUB et al. (2003). STRUB et al. (2003) analisaram o tempo de congelamento de gotículas super-resfriadas imersas em uma corrente de ar frio. Em seus experimentos, os autores observaram que após congeladas, as gotículas se estabilizavam a uma temperatura abaixo da temperatura ambiente, e justificaram esse fato explicando que mesmo quando a temperatura da superfície das gotículas se iguala a temperatura ambiente, o fluxo de calor devido ao resfriamento evaporativo continua ativo, assim como mostrado na Figura 5.16.

A Figura 5.17 exibe o gráfico q(t) versus t para a etapa de solidificação (etapa 3). A contribuição de cada mecanismo na troca térmica entre a gotícula e o ambiente pode ser obtida da mesma forma feita para a etapa de super-resfriamento (etapa 1). Na etapa de solidificação (etapa 3) a participação da convecção continua sendo o principal mecanismo atuante na transferência de calor, com cerca de 61% do total do calor trocado durante o tempo de duração da etapa de solidificação (etapa 3), enquanto a parcela relativa ao resfriamento evaporativo e a radiação representaram, respectivamente, 36% e 3%. A participação da convecção nesta etapa é maior porque a temperatura superficial da gotícula se mantém praticamente constante durante a solidificação. Como veremos na seção adiante, quando existe certa combinação de valores entre o número de Stefan e os outros números adimensionais, como o número de Biot por exemplo, a temperatura superficial da gotícula pode se manter muito próxima ao valor de sua temperatura inicial durante a etapa de solidificação (etapa 3). Caso a temperatura superficial varie dentro de um intervalo de temperatura maior para esta etapa, um padrão parecido com o apresentado para a etapa de super-resfriamento (etapa 1) seria observado no gráfico q(t) versus t.



Figura 5.17: Gráfico fluxo de calor q(t) versus tempo t para etapa de solidificação. Comparação entre os fluxos de calor para convecção (cor preta e linha sólida), radiação (cor azul e linha tracejada) e resfriamento evaporativo (cor vermelha e linha pontilhada). Para R=0.78mm, $T_{\infty}=-19$ °C, Tn=-18.4 °C e v=0.42 m/s.

5.4 Influência do número de Stefan na etapa de solidificação (etapa 3)

O número de Stefan (St) é um parâmetro adimensional muito utilizado na análise de problemas de mudança de fase, sendo usualmente definido como a razão entre o calor sensível e o calor latente de um sistema. Para o problema de Stefan de fase única proposto neste trabalho, o número de Stefan é dado através da expressão abaixo:

$$St = c_q (T_c - T_{\infty})/L \tag{5.12}$$

onde c_g é o calor específico do gelo, T_{∞} é a temperatura do ar, T_c é a temperatura de solidificação, e *L* é o calor latente de solidificação.

Para o presente problema do congelamento de gotículas de água imersas em uma corrente de ar frio, o único parâmetro variável na Equação (5.12) seria a temperatura do ar. Sendo assim, ao analisarmos a influência do número de Stefan na etapa de solidificação, estamos analisando essencialmente a influência da temperatura do ar.

Para analisar a influência do número de Stefan na etapa de solidificação das gotículas, dois casos adicionais foram analisados conforme a tabela abaixo:

Parâmetros	Caso 1(Seção 5.2)	Caso 2	Caso 3
T_{∞} [°C]	-19	-53	-19
St	0.11	0.33	0.11
Bic ₃	0.0347	0.0331	0.2583
Bir ₃	0.0004	0.0002	0.0004
Bim ₃	0.0212	0.0072	0.1560
<i>T_n</i> [°C)]	-18.4	-18.4	-18.4
v [m/s]	0.42	0.42	42
<i>R</i> [<i>mm</i>]	0.78	0.78	0.78

Tabela 5.14 - Parâmetros dos casos estudados na análise da influência do número de Stefan

As equações que determinam os parâmetros Bic_3 , Bim_3 e Bir_3 podem ser vistas abaixo:

$$Bic_3 = \frac{hR}{k_g} \tag{5.13}$$

$$Bim_3 = \frac{h_m L_s R \rho_{\nu,o}}{k_g (T_\infty - T_c)}$$
(5.14)

$$Bir_3 = \frac{\varepsilon \sigma R T_c^3}{k_g} \tag{5.15}$$

onde T_c é a temperatura de equilíbrio para o congelamento, k_g é a condutividade térmica do gelo, T_{∞} é a temperatura do ar, h é a coeficiente de transferência de calor por convecção, h_m é o coeficiente de transferência de massa, $\rho_{v,o}$ é a massa específica do vapor saturado de água na temperatura de 273 K, L_s é o calor latente de sublimação, ε é a emissividade e σ é a constante de Stefan-Boltzmann.

O Caso 1 se resume às condições estudadas na seção 5.2. Para este caso, o número de Stefan é igual 0.11 e o tempo de congelamento é de aproximadamente 23.6 segundos. Nessas condições, podemos observar na Figura 5.18 que a temperatura na superfície da gotícula varia muito pouco durante o tempo em que ela se solidifica. Em 22.5 segundos decorridos do início da etapa de solidificação, a temperatura superfícial da gotícula

diminuiu apenas de 2.5 °C. No início da solidificação existe uma queda rápida de temperatura, que se deve ao fato da superfície da gotícula estar em contato direto com o ar frio, mas depois a queda da temperatura se torna lenta até aproximadamente o fim da solidificação. Com a aproximação do final da etapa de solidificação a temperatura da gotícula começa a cair mais rápido, devido à diminuição de calor latente liberado na frente de solidificação.



Figura 5.18: Gráfico da temperatura na superfície da gotícula T(R,t) versus tempo t durante a etapa de solidificação para o Caso 1.

No Caso 2 o número de Stefan foi triplicado através da alteração da temperatura ambiente de -19 °C para -53 °C. Neste caso o tempo de congelamento é de aproximadamente 12.2 segundos. Como pode ser visto na Tabela 5.14 os valores dos três parâmetros Bic_3 , Bim_3 e Bir_3 diminuiram com a alteração da temperatura ambiente. O parâmetro Bic_3 diminuiu muito pouco em relação a Bim_3 e Bir_3 . A consequência disso foi que a participação do fluxo de calor por convecção saltou de 60% no Caso 1 para cerca de 80% no Caso 2. Quando observamos o gráfico da variação da temperatura na superfície da gotícula com o tempo para o Caso 2, percebe-se um aumento da variação da temperatura na superfície da gotícula durante a etapa de solidificação (etapa 3). Para 12 segundos decorridos do início da etapa de solidificação, a temperatura superficial da gotícula diminuiu mais de 5°C.



Figura 5.19: Gráfico da temperatura na superfície da gotícula T(R,t) versus tempo t durante a etapa de solidificação para o Caso 2.

O aumento do número de Stefan significa um aumento da participação do calor sensível no processo de mudança de fase. Assim, é esperado que sistemas com valores maiores de *St*, apresentem maior variação de temperatura durante a mudança fase. Esse efeito fica demonstrado quando comparamos os gráficos 5.18 e 5.20. A variação da temperatura na fase sólida é importante para processos em que o gradiente de temperatura tem que ser controlado. O gradiente de temperatura pode afetar a constituição do sólido formado em processos utilizados na indústria farmacêutica, alimentícia e metalúrgica.

Como discutido anteriormente, os parâmetros adimensionais ligados à transferência de calor por convecção (Bic_3), por radiação (Bir_3) e por resfriamento evaporativo (Bim_3) também afetam a distribuição de temperatura no gelo. No Caso 3 os valores de Bic_3 , Bim_3 e Bir_3 foram aumentados através do aumento da velocidade da corrente de ar. Alterando a velocidade da corrente de ar, mantemos o número de Stefan constante em relação ao Caso 1. O objetivo da comparação entre os casos 1 e 3 é mostrar que o aumento dos parâmetros Bic_3 , Bim_3 e Bir_3 , aumenta a variação de temperatura na gotícula durante a solidificação, mesmo quando o número de Stefan se mantém constante. O tempo de congelamento para o Caso 3 foi de aproximadamente 4.4 segundos. A Figura 5.20 mostra o gráfico da variação da temperatura na superfície da gotícula com o tempo para o Caso 3. Para 4 segundos decorridos do início da etapa de solidificação, a temperatura superfícial da gotícula diminuiu mais de 8°C, o que significa uma variação de temperatura da superfície muito maior do que a obtida no Caso 1.



Figura 5.20: Gráfico da temperatura na superfície da gotícula T(R,t) versus tempo t durante a etapa de solidificação para o Caso 3.

Em relação à modelagem do problema, processos com baixa variação de temperatura na fase sólida durante a etapa de congelamento podem ser resolvidos considerando-se a temperatura das gotículas uniforme, ou seja, adotando-se modelos de parâmetros concentrados (COTTA & MIKHAILOV, 1997). Essa consideração deixa a modelagem do problema muito mais simples, reduzindo as equações diferenciais parciais a uma única equação diferencial ordinária em cada etapa, e produz bons resultados nestes casos. Isso explica por que o modelo para temperatura uniforme utilizado por HINDMARSH *et al.* (2003) funcionou tão bem quando comparado aos resultados experimentais relativos ao Caso 1, já que este caso apresenta ao mesmo tempo baixos valores para *Bic*₃, *Bim*₃, *Bir*₃ e *St*.

5.5 Influência do tamanho das gotículas

A Figura 5.21 mostra o tempo de congelamento para gotículas de três tamanhos diferentes: I) raio igual à 0.39mm; II) raio igual à 0.78mm; III) raio igual à 1.56mm. Como era de se esperar, quanto maior a gotícula, maior será o tempo de congelamento. Para os dados referentes ao caso 1, para a gotícula de raio igual a 0.39 mm, o tempo total de congelamento é cerca de 18.7 segundos, enquanto que para a gotícula de raio igual a 1.56 mm o tempo de congelamento total é aproximadamente de 183.4 segundos, ou seja, para um aumento de 4 vezes no raio da gotícula, o aumento do tempo de congelamento chegou a cerca de 10 vezes.



Figura 5.21: Gráfico da temperatura no centro da gotícula T(0,t) versus tempo t. Comparação entre gotículas de raio iguais à 0.39 mm (linha sólida na cor preta), 0.78 mm (linha pontilhada na cor vermelha) e 1.56 mm (linha tracejada na cor azul). Solução obtida através da técnica híbrida numérico-analítica GITT. Para T_{∞} =-19 °C, Tn=-18.4 °C e v=0.42 m/s.

Através da solução obtida via GITT, foi possível acompanhar o comportamento dos fluxos de calor, relativos aos mecanismos de troca térmica, atuantes na superficie à medida que o tamanho da gotícula aumenta. Foi observado que, com aumento do tamanho das gotículas, a participação do fluxo que calor devido à radiação em relação ao fluxo de calor total trocado com o ambiente externo aumenta. Isso ocorre para todas as etapas do processo. Para a etapa de super-resfriamento por exemplo, o fluxo de calor devido à radiação saltou de 2% para 2.8% quando dobramos o raio das gotículas de 0.39 mm para 0.78. Quando dobramos o diâmetro novamente, de 0.78 mm para 1.56 mm, a participação do fluxo de vido à radiação saltou de 2.8% para 4.3%. Ao contrário do fluxo devido à radiação, o fluxo de calor devido ao resfriamento evaporativo viu sua participação na troca térmica da gotícula diminuir com o aumento do raio da mesma. O percentual do fluxo devido à convecção em relação à troca total no processo se manteve praticamente constante.

6. Conclusões

Neste trabalho a Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) foi utilizada para analisar o congelamento de gotículas de água super-resfriadas. Esse problema tem importância crucial em fenômenos como a formação de gelo por nuvens convectivas, e em processos utilizados para produção de alimentos e produtos farmacêuticos. O estudo desse fenômeno também é fundamental para análise do revestimento de superfícies para mitigação da formação de gelo.

Um modelo físico-matemático foi estabelecido dividindo-se o congelamento das gotículas em quatro etapas: i) etapa de super-resfriamento (ou resfriamento do líquido); ii) etapa de recalescência (ou nucleação); iii) etapa de solidificação (ou congelamento); iv) etapa de resfriamento (ou resfriamento do sólido). Cada uma dessas etapas recebeu uma modelagem matemática específica. A etapa de super-resfriamento foi modelada como um problema de condução transiente, onde a gotícula líquida se resfria da temperatura inicial até a temperatura de nucleação. Nessa etapa, bem como nas etapas de congelamento e de resfriamento do sólido, três mecanismos de transferência de calor foram considerados atuantes na superfície das gotículas: convecção, radiação e resfriamento evaporativo. A etapa recalescente se caracteriza por uma elevação considerada instantânea da temperatura de nucleação para a temperatura de congelamento, e um balanço de energia foi proposto para se obter o volume de gelo formado. Duas hipóteses foram propostas para localização do gelo formado na etapa recalescente. A primeira considera o gelo formado homogeneamente disperso em meio à gotícula, e a segunda considera a formação de gelo na superfície das gotículas. A etapa de solidificação consiste em um problema de transferência de calor com fronteira móvel, usualmente conhecido como problema de Stefan. Neste caso uma equação adicional relativa à posição da frente de solidificação é adicionada ao sistema de equações do problema convectivo-difusivo tradicional. A etapa de resfriamento do sólido foi modelada da mesma maneira que a etapa de super-resfriamento, com a diferença que a temperatura inicial da gotícula não é uniforme neste caso, mas é igual à distribuição de temperatura encontrada ao final da etapa de congelamento.

Para aplicação da GITT na solução do modelo do congelamento da gotícula, o procedimento demonstrado por COTTA *et al.* (2016) foi utilizado para obter-se uma melhor convergência da solução. Esse procedimento consiste em introduzir as não linearidades das condições de contorno do problema original no problema de autovalor.

Além disso, filtros implícitos foram utilizados para homogeneizar as condições de contorno, diminuindo o custo computacional para obtenção das soluções.

Para verificação do código desenvolvido, os resultados obtidos via GITT foram comparados com resultados numéricos obtidos através da rotina *NDSolve* do *Mathematica* v11.3, e também com resultados analíticos e numéricos presentes na literatura. Os resultados foram analisados para diferentes condições de congelamento, e apresentaram excelente concordância entre si. Depois da verificação, a solução obtida via GITT foi validada através da comparação com resultados experimentais obtidos na literatura. Os resultados obtidos via GITT ficaram bem próximos aos resultados experimentais, mostrando que o modelo adotado representa bem a realidade do experimento.

Com o modelo validado, foram realizadas análises sobre a influência da convecção, da radiação e do resfriamento evaporativo na troca térmica entre as gotículas e o ambiente. Foi observado que a convecção é o principal mecanismo de troca térmica com o ambiente, correspondendo a aproximadamente 60% do calor total trocado nos casos estudados. A transferência de calor por radiação apresentou baixa influência (menor do que 3% do calor trocado) no processo de congelamento das gotículas. Quando a temperatura superficial das gotículas se aproxima da temperatura ambiente, o resfriamento evaporativo passa a ser o principal mecanismo de troca térmica, podendo inclusive fazer com que a temperatura das gotículas fique menor do que a temperatura ambiente.

A influência do número de Stefan no processo de congelamento de gotículas também foi analisada. Foi constatado que valores maiores para o número Stefan ocasionam maior variação de temperatura na fase sólida durante a mudança de fase. Sendo assim o número de Stefan é um parâmetro que pode ser utilizado como referência em processos onde o gradiente de temperatura deve ser controlado para garantir a qualidade dos produtos.

A variação do tempo de congelamento com o tamanho das gotículas também foi considerada neste trabalho. Para os casos estudados, mantendo-se as mesmas condições ambientais (velocidade da corrente de ar, temperatura de nucleação e temperatura do ar externo), ao se dobrar o raio de uma gotícula o tempo total de solidificação aumentou cerca de 3 vezes.

Concluiu-se que a GITT se mostrou um método eficaz e de baixo custo computacional para análise do congelamento de gotículas. Com a aplicação de técnicas de aceleração de convergência, a solução via GITT para o processo de congelamento das gotículas apresentou convergência em pelo menos quatro dígitos significativos para ordens de truncamento sempre inferiores a M = 60. As análises realizadas através das simulações via GITT se mostraram condizentes com a física do problema e os resultados numéricos e experimentais encontrados na literatura. O sucesso da aplicação da GITT neste trabalho, indica a possibilidade da implementação desta técnica em problemas do mesmo tipo que envolvem maior complexidade. Vale ressaltar que uma das características da GITT é a capacidade de extensão da técnica para problemas em duas ou três dimensões, com apenas um moderado aumento do esforço computacional.

Devido ao crescente interesse da comunidade científica e da indústria no uso de revestimentos de superfícies para mitigação da formação de gelo, sugere-se para trabalhos futuros a extensão do modelo para análise do congelamento de gotículas depositadas sobre superfícies sólidas. Para a análise desse tipo de problema, o controle de erro eficiente e o baixo custo computacional proporcionados pela GITT seriam vantajosos em relação aos trabalhos numéricos já encontrados na literatura. O novo modelo deverá solucionar a transferência de calor para duas dimensões, levando em consideração os diferentes valores para o ângulo de contato entre a gotícula e a superfície sólida. A frente de solidificação pode ser considerada plana, partindo da superfície sólida e caminhando da direção normal à esta superfície. Devido à nova configuração da frente de solidificação, é necessário a modelagem do problema como um problema de Stefan de duas fases, já que durante a etapa de solidificação a fase líquida estaria em contato direto com a corrente de ar externo. Além das técnicas de aceleração de convergência já utilizadas neste trabalho (filtros implícitos e problema de autovalor não-linear), o uso de um esquema de reordenamento de autovalores poderia trazer ganhos significativos para a convergência do problema de Stefan de duas fases bidimensional, já que evitaria a possibilidade de ordens de truncamento independentes para cada dimensão e garantiria que os autovalores de maior importância sejam incluídos no somatório.

7. Referências

ALMEIDA, A. P. (2017). "Transformação Integral Baseada em Problemas de Autovalor com Coeficientes Variáveis para Fenômenos de Transporte em Meios Heterogêneos Tridimensionais". Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ.

ALVIM, I. D., SOUZA, F. S., KOURY, I. P., DANTAS, F. B. H., JURT, T. (2013). "Use of the Spray Chilling Method to Deliver Hydrophobic Components: Physical Characterization of Microparticles". Ciência e Tecnologia de Alimentos, v. 33, n. 1, p. 34-39.

ANAL, A. K. (2007). "Controlled-Release Dosage Forms". In: Gad, S., C., Pharmaceutical Manufacturing Handbook: Manufacturing and Processes. New Jersey: John Wiley & Sons, 2007. ch.11, p. 345-392.

ANDERSON, D.N., REICH, A.D. (1997). "Tests of the performance of coatings for low ice adhesion". Proceedings of NASA Tech. Mem. 107399, AIAA 35th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, Jan. Reno, NV.

ANTONINI, C., INNOCENTI, M., HORN, T., MARENGO, M., AMIRFAZLI, A. (2011). "Understanding the effect of superhydrophobic coatings on energy reduction in anti-icing systems". Cold Regions Science and Technology, Volume 67, Issues 1–2, Pages 58-67, ISSN 0165-232X.

BIDGOLI, A.A. (2013). "Thermal analysis of aeronautical Pitot tubes with ice formation". MSc thesis, COPPE-UFRJ.

BIDGOLI A.A., COTTA, R.M., SOUZA, J.R.B., LISBOA, K.M. (2015). "Thermal Analysis of Heated Pitot Probes in Atmospheric Conditions of Ice Accretion", Proc. of the 23rd International Congress of Mechanical Engineering - COBEM 2015, 10p., Rio de Janeiro, RJ, Brazil, December 6th-10th, 2015. ISSN: 2176-5480

BLAKE, J., THOMPSON, D., RAPS, D., STROBL, T. (2015). "Simulating the freezing of supercooled water droplets impacting a cooled substrate". AIAA J. 53 (7) 1725-1739.
BOHREN, C., ALBRECHT, B. (1998). "Atmospheric Thermodynamics". Oxford University Press, New York, USA.

BOINOVICH, L.B., EMELYANENKO, A.M. (2013). "Anti-icing potential of superhydrophobic coatings". Mendeleev Communications 23 3–10.

CAO, Y., TAN, W., WU, Z. (2018). "Aircraft icing: An ongoing threat to aviation safety". Aerospace Science and Technology, Volume 75, Pages 353-385, ISSN 1270-9638.

CHAUDHARY, G., LI, R. (2014). "Freezing of Water Droplets on Solid Surfaces: An Experimental and Numerical Study". Experimental Thermal and Fluid Science. 57. 10.1016/j.expthermflusci.2014.04.007.

COSTA, A., A., FILHO, M., C., C., DOS SANTOS, A., S., DE OLIVEIRA, J., C., P. (2012). "Características de cristais de gelo observados em um sistema de nuvens na Amazônia durante o experimento TRMM-LBA". Rev. bras. meteorol., São Paulo, v. 27, n. 2, p. 139-151, July 2012.

COTTA, R.M. (1986). "Diffusion in Media with Prescribed Moving Boundaries: Application to Metals Oxidation at High Temperatures", Proc. of the II Latin American Congress of Heat & Mass Transfer, V. 1, pp. 502-513, São Paulo, Brasil, May 1986.

COTTA, R. M. (1990). "Hybrid Numerical-Analytical Approach to Nonlinear Diffusion". Numer. Heat Transfer, Part B, 217-226.

COTTA, R. M. (1993). "Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow". Boca Raton, FL.: CRC Press.

COTTA, R. M. (1994). "Benchmark Results in Computational Heat and Fluid Flow: The Integral Transform Method". Int. J. Heat Mass Transfer (Invited Paper), 37(Suppl. 1), 381-394.

COTTA, R. M., E MIKHAILOV, M. D. (1997). "Heat Conduction: Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic" Computation. Chichester, UK: Wiley-Interscience. COTTA, R. M. (1998). "The Integral Transform Method in Thermal and Fluids Sciences and Engineering". New York: Begell House.

COTTA, R. M., E MIKHAILOV, M. D. (2006). "Hybrid Methods and Symbolic Computations". W. Minkowycz, E. M. Sparrow, e J. Y. Murthy, Handbook of Numerical Heat Transfer, 2nd ed. New York: Jonh Wiley.

COTTA, R. M., LISBOA, K. M., SOUZA, J. R. B., BIDGOLI, A. A., LOUREIRO, J. B. R., NAVEIRA-COTTA, C. P., FREIRE, A. P. S. (2015a) "Experimental-Theoretical Analysis of Conjugated Heat Transfer in Aeronautical Sensors and Structures with Anti-Icing Systems". In: 9th Minsk International Seminar 'Heat Pipes, Heat Pumps, Refrigerators, Power Sources', 2015, Minsk, Belarus. Proceedings of the 9th Minsk International Seminar "Heat Pipes, Heat Pumps, Refrigerators, Power Sources', 2015, Minsk, Belarus. Proceedings of the 9th Minsk International Seminar "Heat Pipes, Heat Pumps, Refrigerators, Power Sources", 2015. v. 1. p. 47-68.

COTTA, R.M., NAVEIRA-COTTA, C.P., KNUPP, D.C. (2015b) "Nonlinear Eigenfunction Expansions for the Solution of Nonlinear Diffusion Problems", Proc. of the 1st Thermal and Fluid Engineering Summer Conference, ASTFE Digital Library, Paper no. TFESC-13652, pp.1103-1116, New York, August 9-12, 2015.

COTTA. R.M., NAVEIRA-COTTA, C.P., KNUPP, D.C. (2016). "Nonlinear eigenvalue problem in the integral transforms solution of convection-diffusion with nonlinear boundary conditions". International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow 26(3/4): 767-789.

COTTA, R.M., KNUPP, D.C., QUARESMA, J.N.N. (2017). "Analytical Methods in Heat Transfer". In: Handbook of Thermal Science and Engineering, Chapter 1, Francis A. Kulacki et al., Eds., Springer International Publishing, 2017.

COTTA, R. M., KNUPP, D. C., QUARESMA, J. N. N. (2018) "Analytical Methods in Heat Transfer". In: Kulacki, F. A. (Ed.), Handbook of Thermal Science and Engineering, 1st ed., Springer International Publishing, p. 3054. ISBN: 978-3-319-28573-3. DAVIS, G. B., HILL, J. M. (1982). "A moving boundary problem for the sphere". IMA J. Appl. Math. 29, 99–111. (doi:10.1093/imamat/29.1.99)

DAVIS, S. H. (2001). "Theory of Solidification". Cambridge University Press.

DINIZ, A.J., APARECIDO, J.B., COTTA, R.M. (1990). "Heat Conduction with Ablation in Finite Slab". Int. J. Heat & Technology, V. 8, pp. 30-43.

DINIZ, A.J., CAMPOS SILVA, J.B., APARECIDO, J.B., ZAPAROLI, E.L. (1992). "Heat Shield for Ablation in Finite Sphere". 2º Congresso de Engenharia Mecânica Norte-Nordeste, v.1, pp. 9-16.

DORSEY, E. (1940). "Properties of Ordinary Water-substance". Reinhold Publishing Corporation, New York, USA.

EBERLE, P., TIWARI, M. K., MAITRA, T., POULIKAKOS, D. (2014). "The rational nanostructuring of surfaces for extraordinary icephobicity". 6:4874-4881, Nanoscale, 2014.

FEUILLEBOIS, F., LASEK, A., CREISMEAS, P., PIGEONNEAU, F., SZANIAWSKI, A. (1995). "Freezing of a subcooled liquid droplet". J. Colloid Interface Sci. 169, 90–102. (doi:10.1006/jcis.1995.1010)

GAO, W., SMITH, D., SEGO, D. (2000). "Freezing behavior of freely suspended industrial waste droplets". Cold Regions Sci.Technol. 31 (2000) 13–26.

GENT, R. W., DART, N. P., CANSDALE, J. T. (2000). "Aircraft icing". Philos Trans R Soc Lond A 358:2873–2911.

GUNDERSEN, H., LEINAAS, H., THAULOW, C. (2014). "Surface Structure and Wetting Characteristics of Collembola Cuticles". PloS one. 9. e86783. 10.1371/journal.pone.0086783.

GUPTA, S. C. (2003). "The classical Stefan problem: basic concepts, modelling and analysis". Amsterdam, The Netherlands: Elsevier.

HINDMARSH, J.P., RUSSELL, A.B., CHEN, X.D. (2003). "Experimental and numerical analysis of the temperature transition of a suspended freezing water droplet". Int. J. Heat Mass Transfer 46, 1199–1213.

HINDMARSH, J.P., RUSSELL, A.B., CHEN, X.D. (2004). "Experimental and numerical analysis of the temperature transition of a suspended freezing food solution droplet". Chemical Engineering Science, 59, 2503–2515.

INCROPERA, F., DEWITT, D. (1996). "Fundamentals of heat and mass transfer". Fourth ed., John Wiley and Sons, New York, USA.

JUNG, S., DORRESTIJN, M., RAPS, D., DAS, A., MEGARIDIS, C., POULIKAKOS, D. (2011). "Are Superhydrophobic Surfaces Best for Icephobicity?". Langmuir: the ACS journal of surfaces and colloids.

JUNG, S., TIWARI, M.K., DOAN, N.V., POULIKAKOS, D. (2012). "Mechanism of supercooled droplet freezing on surfaces". Nature Commun. 3 (2012) 615.

JUNIOR, F. E. M. (2013). "Desenvolvimento, caracterização e aplicação de microcápsulas de ácido ascórbico obtidas por spray chilling". Pirassurunga: Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos da Universidade de São Paulo.

KIANI, H., SUN, D. (2011). "Water crystallization and its importance to freezing of foods: A review". Trends in Food Science & Technology, Volume 22, Issue 8, Pages 407-426, ISSN 0924-2244.

KIMURA, S., YAMAGISHI, Y., SAKABE, A., ADACHI, T., SHIMANUKI, M. (2007). "A new surface coating for prevention of icing on airfoils". Proceedings of SAE Aircraft and Engine Icing International Conference, Sep. Seville, Spain. KNUPP, D. C. (2013). "Análise de problemas conjugados em microdissipadores térmicos por transformação integral em domínio único e técnicas ópticas não intrusivas". Rio de Janeiro: Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, COPPE/UFRJ.

LAFORTE, C., LAFORTE, J.L., CARRIER, J.C. (2002). "How a Solid Coating Can Reduce the Adhesion of Ice on a Structure". Vol. 6. IWAIS, Brno, Czech Republic.

LEUENBERGER, H. (2001)." Business briefing: Pharmatech 2001; New technologies for the manufacture of nanostructured drug carriers". Report, World Markets Research Centre (WMRC).

LISBOA, K.M., SOUZA, J.R.B., COTTA, R.M. (2013). "Thermal Analysis of an Aeronautical Pitot Probe with Anti-Icing System: Modeling, Simulation and Parametric Studies", Proc. of the 22nd International Congress of Mechanical Engineering - COBEM 2013, Ribeirão Preto, SP, Brazil, November 3-7, 2013.

LISBOA, K. M. (2015). "Simulação por Transformação Integral de Superfícies Aeronáuticas Aquecidas por Sistemas Antigelo: Problema Conjugado em Domínio Único e Modelo de Messinger Modificado". Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) -Universidade Federal do Rio de Janeiro.

LOUGHBOROUGH, D.L., HAAS, E.G. (1946). "Reduction of the adhesion of ice to deicer surfaces". Journal of the Aeronautical Sciences 13 (3), 126–134.

MAITRA, T., ANTONINI, C., TIWARI, M. K, MULARCZYK, A., IMERI, Z., SCHOCH, P., POULIKAKOS, D. (2014). "On supercooled water drops impacting on superhydrophobic textures," 30 (36): 10855–10861, Langmuir, 2014.

MATT, C.F.T. (2013). "Simulation of the transverse vibrations of a cantilever beam with an eccentric tip mass in the axial direction using integral transforms". Applied Mathematical Modeling, Vol. 37 No. 22, pp. 9338-9354.

MCCUE, S. W., WU, B. E HILL, J. M. (2008). "Classical two-phase Stefan problem for spheres". Proc. R. Soc. A 464, 2055–2076. (doi:10.1098/rspa.2007.0315)

MIKHAILOV, M. D., E OZISIK, M. N. (1984). "Unified Analysis and Solutions of Heat and Mass Diffusion". John Wiley.

MIKHAILOV, M.D. and COTTA, R.M. (1998). "Heat conduction with non-linear boundary conditions via integral transforms and symbolic computation". Proceedings of the 11th International Heat Transfer Conference, Vol. 7, South Korea, August, pp. 77-81.

MISHCHENKO, L., HATTON, B., BAHADUR, V., TAYLOR, J. A., KRUPENKIN, T., AIZENBERG, J. (2010). "Design of ice-free nanostructured surfaces based on repulsion of impacting water droplets". ACS Nano 4, 7699–7707.

MIYAWAKI, O., ABE, T., TANO, T. (1989). "A numerical model to describe freezing of foods when supercooling occurs". J. Food Eng. 9 (1989) 143–151.

MONTEIRO, E.R., QUARESMA, J.N.N., COTTA, R.M. (2011). "Integral Transformation of Multidimensional Phase Change Problems: Computational and Physical Analysis", 21st International Congress of Mechanical Engineering, COBEM-2011, ABCM, Natal, RN, Brazil, October 2011.

MURPHY, D. M., KOOP, T. (2005). "Review of the vapour pressures of ice and supercooled water for atmospheric applications". Q. J. R. Meteorol. Soc., 2005, 131, 1539–1565.

NAVEIRA, C. P., COTTA, R. M., ORLANDE, H. R., E FUDYM, O. (2008). "Generalized Integral Transform Technique for Sturm-Liouville Problems in Heterogeneous Media". 12th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, ENCIT 2008.

OZISIK, M. N. (1993). "Heat Conduction", Second Edition. Wiley-Interscience.

PEDROSO, R. I., DOMOTO, G. A. (1973). "Perturbation solutions for spherical solidification of saturated liquids". J. Heat Transfer 95, 42–46.

POPOV, N., TABAKOVA, S., FEUILLEBOIS, F. (2005). "Numerical modelling of the one-phase Stefan problem by finite volume method". Lect. Notes Comp. Sci. 3401, 456–462.

RANZ, W. E., MARSHALL, W. R. (1952). "Evaporation from drops". Chem. Eng. Prog, 48 (1952), pp. 141- 146.

RILEY, D. S., SMITH, F. T., POOTS, G. (1974). 'The inward solidification of spheres and circular cylinders". Int. J. Heat Mass Transfer 17, 1507–1516. (doi:10.1016/0017-9310(74)90061-1)

RUPERTI JR., N. J., COTTA, R. M., (1991). "Heat Conduction with Ablation in Multilayered Media". In: Proc. of the 11th Brazilian Congress of Mechanical Engineering, COBEM, pp. 413-416, São Paulo.

RUPERTI JR, N. J., ZAPAROLI, E. L., COTTA, R. M. (1992). "Hybrid Solution for Phase Change Problems in Multiregion Media". 30th Eurotherm Seminar - Heat Transfer in Phase-Change Processes, pp. 181-184, Orsay, France, October.

RUPERTI JR., N. J., GOBIN, D., COTTA, R. M. (1998). "Covalidation of Integral Transform and Finite Volume Solutions in Phase-Change Problems". In: Proc. of the 7th National Thermal Sciences Meetig, ENCIT 1998, v.2, pp. 659-668, Rio de Janeiro, Brasil.

SHIRTCLIFFE, N. J., MCHALE, G., ATHERTON, S., NEWTON, M. I. (2010). "An introduction to superhydrophobicity". Advances in Colloid and Interface Science, v. 161, p. 124-138. ISSN 0001-8686.

SIAS, D. F., RUPERTI JR., N. J., COTTA, R. M. (2007) "Enhanced Convergence of Integral Transform Solution of Ablation Problems". Proc. of the 19th Brazilian Congress of Mechanical Engineering, XIX COBEM 2017, ABCM, Brasilia, DF (Brazil).

SIAS, D. F., RUPERTI JR., N. J., COTTA, R. M. (2009) "Integral Transform Solution of Ablation Problems with Pyrolysis". 20th International Congress of Mechanical Engineering, COBEM-2009, ABCM, Gramado, RS, Brazil.

SOUZA, J.R.B., LISBOA, K.M., CERQUEIRA, I.G., NAVEIRA-COTTA, C.P., COTTA, R.M., ZOTIN, J.L.Z. (2012). "Conjugated Heat Transfer Models for Heated Aeronautical Pitot Tubes: Experimental Validation with A4 Skyhawk Flight Tests ". 14th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, ENCIT 2012, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, November, 2012.

SOUZA, J.R.B. (2014). "Theoretical-experimental thermal analysis of aeronautical Pitot probes, wind tunnel experiments, in flight testing and basic design of UFRJ climatic wind tunnel". Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, COPPE-UFRJ.

SOUZA, J.R.B., LISBOA, K.M., CERQUEIRA, I.G., NAVEIRA-COTTA, C.P., COTTA, R.M., ZOTIN, J.L.Z. (2015). "Conjugated heat transfer analysis of heated aeronautical Pitot probes with flight tests experimental validation". Heat Transf Eng 36:991–1000.

SOUZA, J.R.B., LISBOA, K.M., BIGDOLI, A.A., ANDRADE, G.A., LOUREIRO, J.B.R., NAVEIRA-COTTA, C.P., SILVA FREIRE, A.P., ORLANDE, H.R.B., SILVA, G.A.L., COTTA, R.M. (2016) "Thermal Analysis of Anti-Icing Systems in Aeronautical Velocity Sensors and Structures", J. Braz. Society of Mech. Sciences & Eng., Invited Paper, 35th Anniversary Special Issue, V.38, no.5, pp.1489-1509, 2016.

STALLABRASS, J.R., PRICE, R. D. (1962). "On the Adhesion of Ice to Various Materials". National Research Laboratory, Report LR-350.

STEWARTSON, K., WAECHTER, R. T. (1976). "On Stefan's problem for spheres". Proc. R. Soc. A 348, 415–426. (doi:10.1098/rspa.1976.0046)

STRUB, M., JABBOUR, O., STRUB, F., BÉDÉCARRATS, J.P. (2003). "Experimental study and modeling of the crystallization of a water droplet". Int. J. Refrig. 26 (1). 59–68.

SUZUKI, S., NAKAJIMA, A., YOSHIDA, N., SAKAI, M., HASHIMOTO, A., KAMESHIMA, Y., OKADA, K. (2007). "Freezing of water droplets on silicon surfaces coated with various silanes". Chem. Phys. Lett. 445 (1) (2007) 37–41.

TABAKOVA, S., FEUILLEBOIS, F., RADEV, S. (2010). "Freezing of a supercooled spherical droplet with mixed boundary conditions" Proc. R. Soc. A. Math. Phys. Eng. Sci. 466:1117–1134.

TOURKINE, P., MERRER, M. L., QUERE, D. (2009). "Delayed freezing on water repellent materials". Langmuir 25 7214e7216.

WANG, Y. Y., XUE, J., WANG, Q.J., CHEN, Q. M., DING J. F. (2013). "Verification of icephobic/anti-icing properties of a superhydrophobic surface". ACS Appl Mater Interfaces; 5:3370e81.

YANG, J., WANG, Z., HEYMSFIELD, A. J. (2018). "On the freezing time of supercooled drops in developing convective clouds over tropical ocean". Atmos. Res., 211, 30–37. https://doi.org/10.1016/j.atmosres.2018.04.023

YAO, Y., LI, C., ZHANG, H., YANG, R. (2017). "Modelling the impact, spreading and freezing of a water droplet on horizontal and inclined superhydrophobic cooled surfaces". Appl. Surf. Sci. 419 52–62.

ZHANG, H., ZHAO, Y., LV, R., YANG, C. (2016). "Freezing of sessile water droplet for various contact angles". Int. J. Therm. Sci. 101 (2016) 59–67.

ZOTIN, J. L. Z. (2017). "Análise Teórica de Microssistemas de Configurações Complexas por Transformação Integral". Rio de Janeiro: Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, COPPE/UFRJ.