

**MINISTÉRIO DA DEFESA
EXÉRCITO BRASILEIRO
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA
CURSO DE MESTRADO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

BRUNO DOS REIS JACCOUD

**SOLIDIFICAÇÃO DO TNT: SOLUÇÃO NUMÉRICA DO MODELO DE
TRANSFERÊNCIA DE CALOR E PROBLEMA INVERSO
DE ESTIMATIVA DA POROSIDADE**

Rio de Janeiro
2013

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

BRUNO DOS REIS JACCOUD

**SOLIDIFICAÇÃO DO TNT: SOLUÇÃO NUMÉRICA DO MODELO DE
TRANSFERÊNCIA DE CALOR E PROBLEMA INVERSO DE
ESTIMATIVA DA POROSIDADE**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Mestrado em Engenharia Mecânica do Instituto Militar de Engenharia, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Mecânica.

Orientador: Maj. Aldélio Bueno Caldeira - D.C.

Co-orientador: Prof. Rodrigo Otávio de Castro Guedes - Ph.D.

Rio de Janeiro
2013

C2013

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

Praça General Tibúrcio, 80 - Praia Vermelha

Rio de Janeiro-RJ CEP 22290-270

Este exemplar é de propriedade do Instituto Militar de Engenharia, que poderá incluí-lo em base de dados, armazenar em computador, microfilmear ou adotar qualquer forma de arquivamento.

É permitida a menção, reprodução parcial ou integral e a transmissão entre bibliotecas deste trabalho, sem modificação de seu texto, em qualquer meio que esteja ou venha a ser fixado, para pesquisa acadêmica, comentários e citações, desde que sem finalidade comercial e que seja feita a referência bibliográfica completa.

Os conceitos expressos neste trabalho são de responsabilidade do autor e dos orientadores.

620.1 Jaccoud, Bruno dos Reis
J12s Solidificação do TNT: Solução Numérica do Modelo de Transferência de Calor e Problema Inverso de Estimativa da Porosidade/ Bruno dos Reis Jaccoud. – Rio de Janeiro: Instituto Militar de Engenharia, 2013.

74 p.:il, graf., tab.

Dissertação (mestrado) – Instituto Militar de Engenharia – Rio de Janeiro, 2013.

1. Engenharia Mecânica – teses, dissertações. 2. Transferência de Calor. 3. Solidificação. 4. Porosidade. I. Caldeira, Aldélio Bueno. II. Guedes, Rodrigo Otávio de Castro. III. Título. IV. Instituto Militar de Engenharia.

CDD 620.1

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

BRUNO DOS REIS JACCOUD

**SOLIDIFICAÇÃO DO TNT: SOLUÇÃO NUMÉRICA DO MODELO DE
TRANSFERÊNCIA DE CALOR E PROBLEMA INVERSO DE
ESTIMATIVA DA POROSIDADE**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Mestrado em Engenharia Mecânica do Instituto Militar de Engenharia, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Mecânica.

Orientador: Maj. Aldélio Bueno Caldeira - D.C.

Co-Orientador: Prof. Rodrigo Otávio de Castro Guedes - Ph.D.

Aprovada em 08 de abril de 2013 pela seguinte Banca Examinadora:

Maj. Aldélio Bueno Caldeira - D.C. do IME - Presidente

Prof. Rodrigo Otávio de Castro Guedes - Ph.D. do IME

Prof. André Luiz Tenório Rezende - D.C. do IME

Prof. Carlos Frederico Trotta Matt - D.C. da UERJ/CEPEL

Rio de Janeiro

2013

Esta obra é dedicada à aquelas pequenas coisas que nos tornam quem realmente somos. A minha família porque sem eles eu jamais teria chegado onde cheguei.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus, que sem ele nada é possível.

Ao meu orientador Aldélio Bueno Caldeira pelos ensinamentos e pela disposição em ouvir com interesse, paciência todas as questões, dúvidas e, principalmente, pela confiança depositada nos momentos mais críticos da sua execução.

Ao meu co-orientador Rodrigo Otávio de Castro Guedes por suas valiosas contribuições acadêmicas, pelos ensinamentos, observações e orientações precisas ao longo desta jornada.

Aos professores Francesco Scofano Neto e Arnaldo Ferreira pelo apoio, disponibilidade e pelos conhecimentos transmitidos ao longo do curso de Mestrado.

A todos os funcionários do Instituto Militar de Engenharia que de alguma forma colaboraram com esta etapa que se encerra.

Aos meus pais Marcia de Cassia dos Reis Jaccoud e Edson Jaccoud, que nunca mediram quaisquer esforços para que eu pudesse estudar e por haverem transformado esta vida em uma existência digna, próspera e frutífera, preparando-me para o mundo.

Às minhas irmãs Thais e Mariana, pelo carinho e apoio e por me fazerem dar valor as coisas simples da vida.

A Rachel Manhães de Lucena por todo amor, carinho, paciência e compreensão em todos os momentos desta etapa.

Aos meus colegas Bruno Areal, Jheison Lopes, Luiz Aquino e Pedro Cronemberger pelo apoio e pelos momentos de descontração tão necessários.

A CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior), pelo suporte financeiro durante o mestrado.

Agradeço a todas as pessoas que contribuíram com o desenvolvimento desta dissertação, tenha sido por meio de críticas, ideias, apoio, incentivo ou qualquer outra forma de auxílio.

SUMÁRIO

LISTA DE ILUSTRAÇÕES	8
LISTA DE TABELAS	10
LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS	11
1 INTRODUÇÃO	15
1.1 Motivação e objetivos	15
1.2 Estrutura do trabalho	17
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	18
2.1 Problemas de solidificação	18
2.1.1 Soluções para problemas de solidificação	19
2.2 Solidificação de explosivos	23
2.3 Problemas inversos em solidificação	24
3 DESCRIÇÃO DO MODELO FÍSICO-MATEMÁTICO	25
3.1 Granada alto explosiva	25
3.2 Problema físico e formulação matemática	25
3.3 O método da capacidade efetiva	28
4 SOLUÇÃO NUMÉRICA	33
4.1 Método dos volumes finitos aplicados ao problema de solidificação	33
5 VERIFICAÇÃO DA SOLUÇÃO NUMÉRICA	39
5.1 Problema de mudança de fase	39
5.1.1 Solução analítica do problema de mudança de fase	40
5.1.2 Análise de convergência para o problema de mudança de fase	43
6 OTIMIZAÇÃO POR ENXAME DE PARTÍCULAS	50
6.1 Aspectos teóricos	50
6.2 Formulação matemática do PSO	51
6.3 Resultados para a análise do número de partículas	52

7	EFEITO DA POROSIDADE SOBRE O PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO	57
7.1	Propriedades efetivas de porosidade	57
7.2	Discussão dos resultados	58
7.2.1	Solidificação para poros esféricos	58
7.2.2	Estudo da porosidade para o TNT	61
8	ESTIMATIVA DA POROSIDADE	63
9	CONCLUSÃO	68
10	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	70
11	APÊNDICES	73
11.1	APÊNDICE 1: Algoritmo do método do Enxame de Partículas	74

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIG.3.1	Granada de morteiro 120 mm AE CONV, produzidas pela IMBEL	25
FIG.3.2	Modelo geométrico representativo com as condições de contorno nas superfícies inferior, superior e lateral, e no eixo de simetria	27
FIG.3.3	Capacidade efetiva, Caso I	31
FIG.3.4	Capacidade efetiva, Caso II	31
FIG.3.5	Capacidade efetiva, Caso III	31
FIG.3.6	Capacidade efetiva, Caso IV	31
FIG.3.7	Capacidade efetiva, Caso V	32
FIG.3.8	Capacidade efetiva, Caso VI	32
FIG.4.1	Volume de controle e volumes vizinhos (MALISKA, 2004)	34
FIG.5.1	Solidificação em um meio semi-infinito (ÖZİŞIK, 1993)	39
FIG.5.2	Comparação do parâmetro ΔT para uma malha de 160 volumes para diferentes tempos	41
FIG.5.3	Comparação do parâmetro ΔT pela frente de solidificação analítica	42
FIG.5.4	Localização das posições a serem utilizadas para as verificações, malha de 20 volumes	43
FIG.5.5	Perfil de temperatura (malha com 20 volumes)	45
FIG.5.6	Perfil de temperatura (malha com 40 volumes)	45
FIG.5.7	Perfil de temperatura (malha com 80 volumes)	46
FIG.5.8	Perfil de temperatura (malha com 160 volumes)	46
FIG.5.9	Comparação do parâmetro ΔT pela frente de solidificação analítica, Domínio estendido	49
FIG.6.1	Evolução da função objetivo ao longo das iterações (10, 30 e 50 partículas)	54
FIG.6.2	Detalhe da FIG. 6.1	54
FIG.6.3	Evolução da frente de solidificação obtida com o ΔT ótimo	55
FIG.6.4	Perfil de temperatura obtida com o ΔT ótimo	56
FIG.7.1	Evolução da frente de solidificação adimensional ($\beta = 1, Ste = 0,06$)	59
FIG.7.2	Frente de solidificação em função porosidade ($Ste = 0,06, \tau = 1$)	60

FIG.7.3	Evolução da frente de solidificação adimensional no TNT ($Ste = 0,58, \beta = 1$)	62
FIG.7.4	Análise da frente de solidificação pelo valor de porosidade numérica ($Ste = 0,58, \tau = 0,5$)	62
FIG.8.1	Efeito da porosidade sobre a função objetivo das soluções ótimas	65
FIG.8.2	Evolução da frente de solidificação obtida com ε ótimo (sem porosidade)	66
FIG.8.3	Evolução da frente de solidificação obtida com ε ótimo (com porosidade)	67
FIG.11.1	Algoritmo PSO, (COLAÇO et al., 2006).	74

LISTA DE TABELAS

TAB.2.1	Variável dependente (ϕ), Coeficiente de difusão (Γ_ϕ) e Termo fonte (S_ϕ).	22
TAB.3.1	Características Típicas da granada 120 mm AE CONV.	26
TAB.3.2	Propriedades termofísicas do TNT.	27
TAB.3.3	Parâmetros do modelo matemático.	28
TAB.3.4	Determinação da capacidade efetiva	30
TAB.5.1	Análise dos valores do parâmetro ΔT (malha com 160 volumes)	43
TAB.5.2	Resultado dos desvios (%) obtidos para 3 posições em três tempos distintos.	44
TAB.5.3	Análise do desvio (%) entre as soluções analítica e numérica para a frente de solidificação (malha com 20 volumes)	47
TAB.5.4	Análise do desvio (%) entre as soluções analítica e numérica para a frente de solidificação (malha com 40 volumes)	47
TAB.5.5	Análise do desvio (%) entre as soluções analítica e numérica para a frente de solidificação (malha com 80 volumes)	47
TAB.5.6	Análise do desvio (%) entre as soluções analítica e numérica para a frente de solidificação (malha com 160 volumes)	48
TAB.6.1	Efeitos do número de partículas sobre as soluções ótimas	53
TAB.6.2	Desvios entre $S_{\text{analítico}}$ e $S_{\text{numérico}}$ com o ΔT ótimo	55
TAB.8.1	Solução ótima para porosidade $\varepsilon = 0$	64
TAB.8.2	Solução ótima para porosidade $\varepsilon = 0,7$	65
TAB.8.3	Posição da frente de solidificação - solução numérica estimada e solução analítica (sem porosidade)	66
TAB.8.4	Posição da frente de solidificação - solução numérica estimada e solução analítica (com porosidade)	66

LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS

ABREVIATURAS

RDX	-	<i>Ciclo-trimetilenotrinitramina</i>
HMX	-	<i>Ciclotetrametileno-tetranitramina</i>
TNT	-	<i>Trinitrotolueno</i>
ANSYS®	-	<i>Software Comercial</i>
AE CONV	-	<i>Alto Explosivo Convencional</i>
MVF	-	<i>Método dos Volumes Finitos</i>
NAV	-	<i>Número de Auto Valores</i>
GITT	-	<i>Técnica da Transformada Integral Generalizada</i>

SÍMBOLOS

c_p	-	<i>Calor específico (J/kg K)</i>
C	-	<i>Capacidade térmica (J/Km³)</i>
C_{ap}	-	<i>Capacidade aparente de calor (J/Km³)</i>
C_{ef}	-	<i>Capacidade efetiva (J/Km³)</i>
\bar{F}	-	<i>Função objetivo</i>
F	-	<i>Função filtro</i>
g	-	<i>Aceleração da gravidade (m/s²)</i>
h	-	<i>Entalpia (J/kg)</i>
k	-	<i>Condutividade térmica (W/m K)</i>
L	-	<i>Espessura do material (m)</i>
P	-	<i>Tamanho da população</i>
q''	-	<i>Fluxo de calor (W/m²)</i>
Ste	-	<i>Número de Stefan</i>
$S(t)$	-	<i>Posição da interface sólido-líquido</i>
T	-	<i>Temperatura (K)</i>
T_0	-	<i>Temperatura inicial</i>
T_w	-	<i>Temperatura na base do material (K)</i>
t	-	<i>Tempo (s)</i>
V	-	<i>Volume de controle</i>

v	-	<i>Velocidade</i>
x	-	<i>Abscissa do sistema de coordenadas (m)</i>
ΔH	-	<i>Calor latente (J/kg)</i>
α	-	<i>Difusividade térmica (m²/s)</i>
β	-	<i>Fator de forma</i>
ΔT	-	<i>Metade da variação de temperatura na mudança de fase (K)</i>
δx	-	<i>Distância entre as faces do volume de controle</i>
(δx)	-	<i>Distância do centro do volume de controle ao centro do volume adjacente</i>
ε	-	<i>Porosidade</i>
λ	-	<i>Número adimensional da solução para o problema de Neumann</i>
ξ	-	<i>Frente de solidificação adimensional ($\xi=S/L$)</i>
ρ	-	<i>Massa específica (kg/m³)</i>
τ	-	<i>Tempo adimensional ($\tau=(\alpha_{sol}t) / L^2$)</i>

SUBSCRITOS

0	-	<i>condição inicial</i>
ap	-	<i>aparente</i>
d	-	<i>sólido sem poros</i>
ef	-	<i>efetivo</i>
end	-	<i>índice relativo aos instantes finais</i>
liq	-	<i>líquido</i>
ls	-	<i>propriedade na mudança de fase de líquida para sólido</i>
m	-	<i>mudança de fase</i>
n	-	<i>face norte do volume de controle</i>
N	-	<i>centro do volume de controle norte</i>
s	-	<i>face sul do volume de controle</i>
S	-	<i>centro do volume de controle sul</i>
sol	-	<i>sólido</i>

RESUMO

A mudança de fase da matéria passando do estado líquido para o estado sólido recebe o nome de solidificação. Esta transformação está presente na natureza e em muitos processos industriais, onde podemos destacar os processos de fabricação por fundição e soldagem.

O carregamento de munições (ou granadas) alto explosivas pode ser feito vertendo explosivo líquido em seu interior, seguido de um resfriamento que resulta na solidificação do explosivo. Apesar da simplicidade deste processo, problemas indesejáveis como a formação de vazios no interior do explosivo podem ocorrer. Estes vazios tornam o artefato inseguro e ineficiente, pois podem ocasionar explosões prematuras e efeitos terminais deficientes.

O presente trabalho tem por objetivo contribuir com a elaboração de um modelo físico-matemático que possibilite uma avaliação preliminar do processo de solidificação do TNT. Neste modelo, o método da capacidade efetiva, empregado na equação de transferência de calor, é aplicado a um problema unidimensional transiente de solidificação do TNT. O modelo matemático é resolvido numericamente pelo método dos volumes finitos, utilizando um esquema explícito de discretização.

A verificação da solução numérica em regime transiente com mudança de fase foi realizada por meio da comparação com uma solução analítica clássica.

Os efeitos da porosidade são introduzidos no modelo por meio de funções que modificam as propriedades termofísicas. Soluções numéricas para o modelo proposto, abordando sólidos porosos e não porosos, são confrontadas com soluções de referência.

A análise dos resultados proporcionou a identificação do parâmetro associado a variação da temperatura na zona de *mushy* por meio de um método estocástico de otimização (Otimização por Enxame de Partículas - PSO). Posteriormente esta técnica foi empregada na solução do problema inverso de estimativa da porosidade formada durante o processo de solidificação do TNT. Populações com diferentes quantidades de partículas foram avaliadas, visando analisar o desempenho do enxame de partículas.

ABSTRACT

The phase change material passing from the liquid state to the solid state is called solidification. This transformation is present in nature and in many industrial processes, where we highlight the manufacturing processes of casting and welding.

The loading of high explosive ammunitions (or shells) can be done by casting liquid explosive in inside its cavity, followed by a cooling process, which results in the solid explosive. Despite the simplicity of this process, undesirable problems as formation of gaps inside the solid explosive can occur. These gaps make the artifact unsafe and inefficient as they may cause premature explosions and deficient terminals effects .

This paper intends to contribute to the elaboration of a physical-mathematical model that allows a preliminary assessment of the solidification process of TNT. In this model, the method of effective capacity, employed on the heat transfer equation, is applied to a one-dimensional problem of transient solidification of TNT. The mathematical model is solved numerically by the finite volume method, using an explicit discretization scheme.

Verification of the numerical solution for the transient phase change was performed by comparing a classical analytical solution.

The effects of porosity are introduced into the model by function, modifying the thermo-physical properties. Numerical solutions for the proposed model, addressing solid porous and non-porous, are confronted with the reference solutions.

The analysis yielded the parameter identification associated with variation of temperature *mushy* in zone through a stochastic optimization method (Particle Swarm Optimization - PSO). Subsequently, this technique was employed to solve the inverse problem of estimating the porosity formed during solidification of TNT. Populations with different numbers of particles were evaluated in order to analyze the performance of the PSO.

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS

A mudança de fase da matéria passando do estado líquido para o estado sólido recebe o nome de solidificação. Esta transformação está presente na natureza e em muitos processos industriais. Na natureza a solidificação pode ser observada na formação do gelo e na solidificação da lava vulcânica, enquanto na indústria a solidificação se destaca nos processos de fabricação por fundição e soldagem.

Os explosivos são de particular interesse da indústria militar, mas também de alguns setores industriais civis. As aplicações civis dos explosivos se estendem pela indústria petrolífera, de construção civil e de mineração. Na indústria de material bélico, o processo de solidificação de explosivos é utilizado na fabricação de munições alto explosivas.

O carregamento de munições (ou granadas) alto explosivas pode ser feito vertendo explosivo líquido em seu interior, seguido de um resfriamento que resulta na solidificação do explosivo. Apesar da simplicidade deste processo de carregamento, problemas indesejáveis como a formação de vazios no interior da munição podem ocorrer. Os vazios no interior do explosivo comumente se apresentam na forma de bolhas (ou poros) e no descolamento do explosivo da base da estrutura da granada. Estes vazios são decorrentes da contração do material devido às tensões térmicas associadas à abrupta mudança na massa específica do explosivo durante a solidificação. De acordo com ZHANG et al. (2013) esses poros tornam o artefato inseguro e ineficiente, pois podem ocasionar explosões prematuras e efeitos terminais deficientes.

Segundo ANNAPRAGADA et al. (2008) a separação de base pode ser evitada mediante a imposição das mais baixas temperaturas do sistema na superfície inferior da cavidade a ser carregada com explosivo. Desta forma, as tensões térmicas no explosivo impelem o mesmo contra o fundo da cavidade, impedindo a formação de vazios entre o explosivo e a estrutura da base da granada.

Devido a sua grande importância na sociedade, os processos de solidificação têm sido largamente estudados. Técnicas experimentais e modelos matemáticos têm sido desenvolvidos visando aprofundar os conhecimentos associados ao fenômeno em tela.

Dentre as abordagens matemáticas se pode destacar o clássico problema de solidificação

de Stefan, o qual consiste em um problema de fronteira móvel. Contudo, a despeito deste problema ser objeto de estudo desde o século XIX, soluções analíticas foram encontradas apenas para poucas situações particulares. Entretanto, a relevante contribuição destas soluções para a compreensão dos fenômenos de solidificação se revela ainda na atualidade, onde estas soluções analíticas são amplamente empregadas na validação e verificação de soluções numéricas.

O problema de Stefan é baseado na equação do calor, dividindo o domínio em duas regiões: a sólida e a líquida, sendo a interface entre estas regiões uma fronteira móvel. De outra forma, outros modelos matemáticos, como o método da capacidade efetiva, tratam o problema de mudança de fase utilizando um único domínio, introduzindo na variação das propriedades termofísicas as informações pertinentes à solidificação. Portanto, no método da capacidade efetiva a frente de solidificação passa a ser uma consequência da solução do campo de temperaturas, enquanto no problema clássico de Stefan a frente de solidificação corresponde a uma condição de contorno móvel ou a uma condição de salto. Por outro lado, similarmente ao problema clássico de Stefan, o método da capacidade efetiva também se baseia na equação do calor, desconsiderando os efeitos convectivos no processo de solidificação.

O método da capacidade efetiva considera que a mudança de fase ocorre em uma faixa de temperatura, a qual define uma zona de coexistência de sólido e líquido. As propriedades termofísicas efetiva para a zona de *mushy* são obtidas a partir das propriedades termofísicas do sólido, do líquido e da entalpia de mudança de fase, conforme será visto no Capítulo 3. Logo, três regiões estão presentes nesta modelagem matemática: a zona de líquido, a zona de *mushy* e a zona de sólido. Assim, as propriedades termofísicas variam de forma particular em cada uma das referidas zonas.

A pesquisa realizada neste trabalho tem como objetivo contribuir para a elaboração de um modelo que possibilite uma avaliação preliminar do processo de solidificação presente no carregamento de granadas explosivas.

No presente trabalho, o método da capacidade efetiva é utilizado em um problema unidimensional transiente de solidificação do TNT. Uma solução numérica pelo método dos volumes finitos, empregando um esquema explícito, é proposta, sendo a mesma confrontada com soluções analíticas. Além disso, o parâmetro associado à variação da temperatura na zona de *mushy* é identificado via a técnica de otimização do enxame de partículas. Esta mesma técnica é empregada na solução do problema inverso de estimativa da porosidade formada durante o processo de solidificação do TNT.

1.2 ESTRUTURA DO TRABALHO

Esta seção descreve a organização do presente trabalho.

O Capítulo 1 se destina a introdução, sendo o tema do presente trabalho apresentado, assim como a motivação, os objetivos e a organização do texto em tela.

O Capítulo 2 apresenta a revisão da bibliográfica dos modelos e soluções matemáticas de problemas de solidificação. Uma seção é especialmente dedicada à revisão bibliográfica de problemas de solidificação de explosivos e uma outra a problemas inversos em solidificação.

No Capítulo 3 descreve-se o modelo físico-matemático utilizado, apresentando a equação da solidificação, suas características e aplicações. Neste capítulo também são apresentados e discutidos os parâmetros físicos (propriedades termofísicas do TNT, condições de contorno e iniciais) necessários ao modelo.

O Capítulo 4 é dedicado a solução numérica do problema em estudo, descrevendo o procedimento de discretização das equações pelo Método dos Volumes Finitos.

No Capítulo 5 são discutidos os resultados relativos a verificação da solução numérica, sendo investigado um problema clássico de mudança de fase. A verificação do código computacional é realizada mediante a comparação com solução analítica disponível na literatura.

O Capítulo 6 expõe a teoria que fundamenta a técnica envolvida na estimativa de parâmetros. São reportados os resultados provenientes da otimização para o parâmetro que delimita o tamanho da zona de *mushy*. Além disso, o método é avaliado quanto ao seu desempenho, tanto no número de partículas, quanto ao tempo computacional.

O Capítulo 7 apresenta a adaptação realizada no modelo, a fim de introduzir o efeito da porosidade. Ademais, o modelo é confrontado com a solução de ZHANG et al. (2009), apresentando resultados consistentes. Simulações da solidificação do TNT, com valores distintos de porosidade são apresentadas. Assim, é possível avaliar a influência da porosidade no processo de solidificação.

O Capítulo 8 se dedica a estimativa da porosidade formada durante a solidificação do TNT.

O Capítulo 9 apresenta as conclusões do trabalho.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo apresenta a revisão bibliográfica que norteou o presente trabalho. A mesma se dedica aos problemas de solidificação, a solidificação de explosivos e a problemas inversos em solidificação.

2.1 PROBLEMAS DE SOLIDIFICAÇÃO

Desde o século XIX estão presentes na literatura estudos de soluções para problemas de solidificação, como é o caso dos chamados problemas de Stefan, que consistem em problemas dependentes do tempo onde a posição do contorno deve ser determinada como uma função do tempo e do espaço. Conhecidos também por problemas de movimento de fronteira, estes começaram a ser estudados em 1831 por Lamé e Clapeyron. No entanto, em 1889 e 1891, Stefan, deu sequência a esse trabalho, dando seu nome a esta família de problemas, resultado de seu estudo sobre o derretimento da calota de gelo polar por volta de 1890 (HU & ARGYROPOULOS, 1996).

Em problemas práticos de solidificação, as propriedades termofísicas podem variar de acordo com as fases, temperatura e concentração, e mecanismos de transporte diferentes (por exemplo, convecção, condução e radiação) podem acontecer simultaneamente. A modelagem matemática e as simulações computacionais, muitas vezes, tornam as soluções mais econômicas, posto que os recursos necessários para empreendê-las são baixos, quando comparadas com as técnicas experimentais, favorecendo a compreensão dos processos práticos que envolvem os problemas de fronteira móvel. Atualmente, na maioria das aplicações de engenharia, a resolução de problemas de fronteira móvel tem sido feitas por análises numéricas que utilizam diferenças finitas, elementos finitos, ou elementos de contorno (HU & ARGYROPOULOS, 1996).

Soluções analíticas são importantes para a investigação precisa do comportamento da solidificação, uma vez que as técnicas experimentais são frequentemente mais dispendiosas. Além disso, estas soluções podem nos fornecer uma visão física mais profunda para o problema em questão. Embora os métodos analíticos possam nos oferecer uma solução exata e matematicamente mais elegantes, devido às suas limitações, esses tipos de soluções abordam, principalmente, os casos unidimensionais de uma região infinita ou semi-infinita, com condições iniciais

e de contorno simples e propriedades térmicas constantes.

2.1.1 SOLUÇÕES PARA PROBLEMAS DE SOLIDIFICAÇÃO

Segundo HU & ARGYROPOULOS (1996) o problema mais simples de mudança de fase é o problema de Stefan, primeiramente resolvido analiticamente em 1889. Neste problema apenas uma fase é resolvida, a outra fase é mantida em sua temperatura de solidificação. A solução de Stefan com propriedades termofísicas constantes mostra que a taxa de solidificação de uma região semi-infinita é regida por um número adimensional, conhecido como o número de Stefan (Ste),

$$\text{Ste} = \frac{[c_p(T_{liq} - T_m)]}{\Delta H} \quad (2.1)$$

onde c_p é o calor específico a pressão constante, ΔH é o calor latente, e T_{liq} e T_m são as temperaturas do líquido e de mudança de fase, respectivamente.

HU & ARGYROPOULOS (1996) descrevem em seu trabalho os detalhes da solução de Neumann, onde o autor, em 1912 estendia a solução de Stefan, originalmente de um problema com uma única fase, para um problema com duas fases. Neste cenário mais realista, o estado inicial do material é assumido como líquido, sofrendo um processo de solidificação. Sua temperatura inicial difere da temperatura de mudança de fase, e a sua temperatura durante o processo não é mantida a um valor constante.

A maioria das soluções analíticas existentes se destinam apenas aos problemas de meios semi-infinitos com parâmetros constantes em cada fase e com as temperaturas iniciais constantes (HU & ARGYROPOULOS, 1996). Assim, para casos mais complexos, necessitamos buscar soluções aproximadas.

Com base no método integral da equação da quantidade de movimento da teoria da camada limite de Karman-Pohlhausen (1921), Goodman, em 1958, desenvolve uma equação integral que expressa o equilíbrio térmico global do sistema através da integração da equação unidimensional de condução de calor em relação à variável espacial x (SADOUN et al., 2009).

ÖZİŞİK (1993) apresenta algumas soluções analíticas para problemas envolvendo a mudança de fase. Segundo ÖZİŞİK (1993), a formulação matemática que governa os problemas de mudança de fase são do tipo de equações diferenciais parciais parabólicas. Contudo, a localização da interface móvel sólido-líquido não é conhecida inicialmente, sendo a sua solução determinada à parte da solução do problema. Portanto, os problemas de mudança de fase na

fronteira são não lineares e de solução analítica muito difícil. Números limitados de soluções analíticas exatas podem ser encontrados, como em CARSLAW & JAEGER (1959).

A aplicação dos métodos numéricos em problemas de solidificação tem proporcionado a avaliação de situações físicas mais complexas que as estudadas por Stefan e Neumann.

Os métodos numéricos usados em problemas de solidificação podem ser classificados como de soluções fortes e de soluções fracas. As soluções fortes resolvem diretamente o problema de fronteira móvel, sendo a frente de solidificação parte fundamental na solução do problema. Por outro lado, as soluções fracas incorporam os efeitos de mudança de fase nas propriedades termofísicas. Portanto, a posição da frente de solidificação não é parte da solução, mas uma consequência da solução do campo de temperaturas.

Segundo HU & ARGYROPOULOS (1996) os métodos de soluções numéricas fortes são aplicáveis aos problemas unidimensionais envolvendo uma ou duas fases. Porém estes métodos são demasiadamente custosos computacionalmente ao serem empregados em problemas multidimensionais.

Nestes casos, a alternativa encontrada é a reformulação do problema de tal modo que a condição de salto que relaciona a transferência de calor da fase líquida para a fase sólida, conhecida como condição de Stefan, seja implicitamente incorporada em uma nova forma de equações. Estas equações são aplicadas em todo o domínio fixo, originando as soluções numéricas fracas. Nesta abordagem, a atenção explícita à natureza da fronteira móvel é evitada. Estes métodos são: o método da capacidade aparente, o método da capacidade efetiva, o método de integração de calor, o método baseado em fonte e o método da entalpia (HU & ARGYROPOULOS, 1996).

No método da capacidade aparente de calor, o calor latente é contabilizado, aumentando a capacidade térmica do material na região de *mushy*. A região de *mushy* se caracteriza pela propriedades termofísicas serem dependentes das propriedades do sólido, do líquido e da entalpia de mudança de fase. Por exemplo, se o calor latente é transferido de modo uniforme no intervalo de temperatura de mudança de fase, a capacidade aparente de calor pode ser definida como

$$C_{ap} = \begin{cases} C_{sol} & T < T_{sol} & \text{região sólida} \\ C_{ls} & T_{sol} < T < T_{liq} & \text{região de } mushy \\ C_{liq} & T > T_{liq} & \text{região líquida} \end{cases} \quad (2.2)$$

onde,

$$C_{ls} = \frac{\left\{ \int_{T_{sol}}^{T_{liq}} \rho c_p(T) dT + \Delta H \right\}}{(T_{liq} - T_{sol})} \quad (2.3)$$

Em termos da definição da capacidade de calor aparente, a equação da energia em uma dimensão torna-se

$$C_{ap} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (2.4)$$

A EQ. (2.4) pode ser facilmente discretizada e resolvida numericamente.

Segundo (HU & ARGYROPOULOS, 1996) o método de capacidade aparente de calor foi apresentado pela primeira vez por Hashemi e Sliepceвич, em 1967, utilizando uma solução por diferenças finitas baseado no esquema de Crank-Nicolson.

O método da capacidade efetiva foi proposto por POIRIER & SALCUDEAN (1988). Este método é baseado na proposição de um perfil de temperatura entre dois pontos discretizados do domínio. Este procedimento aliado ao método dos volumes finitos permite a integração de funções da temperatura em cada volume discretizado do domínio. Portanto, o método da capacidade efetiva possibilita a determinação de uma capacidade efetiva para cada volume finito, diferindo do método da capacidade aparente que se limita a considerar a capacidade térmica em cada ponto discretizado do domínio. Logo, a capacidade efetiva é definida como:

$$C_{ef} = \frac{(\int C_{ap} dV)}{V} \quad (2.5)$$

onde C_{ef} , C_{ap} e V são a capacidade efetiva de calor, capacidade aparente de calor e volume finito, respectivamente.

A característica essencial dos métodos de entalpia é a evolução do calor latente ser explicada pelo termo de entalpia, bem como a relação entre a entalpia e a temperatura. O método pode ser ilustrado considerando um problema unidimensional de condução de calor. A equação para tal caso pode ser expressa como

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (2.6)$$

Segundo HU & ARGYROPOULOS (1996) a abordagem de entalpia foi proposta por EYRES et al. (1946) para evitar a não-linearidade em um problema de condução de calor,

tendo ROSE (1960), aplicado pela primeira vez uma formulação de entalpia para um esquema de diferenças finitas.

Alguns autores questionam que o fluxo de convecção tem recebido menos atenção do que o de condução, entretanto, o fluxo de convecção pode ter uma influência muito significativa sobre o processo de mudança de fase. SPARROW et al. (1977) relatam que a convecção não afeta apenas a taxa de fusão ou de solidificação, mas também a estrutura resultante e distribuição dos solutos na fase líquida de um sistema multicomponente.

Segundo HU & ARGYROPOULOS (1996) uma outra alternativa disponível para a resolução das equações de Navier-Stokes na forma de variável primitiva é o método de volume de controle.

Nesta técnica, as equações da conservação de massa, quantidade de movimento, energia e conservação das espécies são expressas em uma equação diferencial geral da forma

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla(\rho u\phi) = \nabla \cdot [\Gamma_\phi \nabla \phi] + S_\phi \quad (2.7)$$

onde ϕ é uma variável geral, Γ_ϕ é o coeficiente de difusão e S_ϕ é o termo fonte. Os quatro termos da EQ. (2.7) representam o termo transiente, o termo de convecção, o termo de difusão e o termo fonte. A variável dependente ϕ pode denotar variáveis diferentes, tais como a fração mássica de uma espécie química, a entalpia, a temperatura, ou uma componente de velocidade. Deste modo, para cada uma destas variáveis, ϕ , um significado apropriado deve ser dado para o coeficiente de difusão e o termo fonte, Γ_ϕ e S_ϕ para diferentes equações são listados na TAB. 2.1.

TAB. 2.1: Variável dependente (ϕ), Coeficiente de difusão (Γ_ϕ) e Termo fonte (S_ϕ).

Equação	ϕ	Γ_ϕ	S_ϕ
Massa	1	0	0
Quantidade de movimento	v_j	μ	$\nabla_P + S^\nu$
Energia Térmica	$h(T)$	$kc_p(k)$	S_h
Espécie Química	C_A	D	S_C

Fonte: HU & ARGYROPOULOS (1996)

No decorrer dos últimos anos esta técnica tem se tornado cada vez mais popular. Dentre

os trabalhos desenvolvidos podemos citar NEILSON & INCROPERA (1990) que investigaram a solidificação de uma solução binária em um anel horizontal cilíndrico usando a técnica de volume de controle com um esquema de diferenças finitas.

ZHANG et al. (2009) explicam que a solidificação com formação de poros gasosos no interior do material solidificado é encontrada durante a fabricação de espumas de alumínio. Estes poros influenciam as propriedades mecânicas, térmicas e acústicas do material, bem como aumentam o tempo total do processo de solidificação.

2.2 SOLIDIFICAÇÃO DE EXPLOSIVOS

CHEN & SHIUAN (1992) utilizam o método de entalpia para estudar a fusão de explosivos, particularmente do TNT, em uma granada. Embora desconsiderassem os efeitos de convecção os resultados numéricos apresentados estavam razoavelmente de acordo com os dados experimentais. Isto se deve à natureza altamente viscosa do TNT fundido que resulta em velocidades muito baixas do líquido. Entretanto, JI & LIN (1998) consideraram os efeitos convectivos no processo de solidificação do TNT. A solução numérica JI & LIN (1998) utilizou uma malha pouco refinada (10 x 20) que segundo SUN et al. (2005) não é capaz de representar corretamente os efeitos convectivos.

SUN et al. (2005) propõem um modelo numérico abrangente desenvolvido para simular com precisão os fenômenos de transporte, como também, tensões térmicas induzidas encontradas no processo de solidificação de explosivos. O explosivo estudado foi o RDX. Os cálculos de tensões térmicas foram realizados utilizando o pacote comercial ANSYS. O modelo desenvolvido foi validado contra experimentos realizados e com os resultados numéricos de CHEN & SHIUAN (1992). Distribuições de temperatura, formas de interface e tensões térmicas são computados nesse trabalho.

A formação de poros no interior de explosivos tem um efeito significativo sobre a sensibilidade das ondas de choque. ZHANG et al. (2013) elaboram um modelo numérico visando investigar como a porosidade pode interferir sobre a sensibilidade ao impacto do explosivo em queda. Os autores observam que a porosidade interfere sobre os locais originais e os tempos de iniciação de explosão. O tempo original inicial da explosão diminui à medida que há um aumento de tamanho dos poros.

2.3 PROBLEMAS INVERSOS EM SOLIDIFICAÇÃO

SLODICKA & DE SCHEPPER (2005) utilizam uma técnica de problema inverso para um problema de Stefan com três regiões: uma fase líquida, fase sólida e uma zona de *mushy*, onde a evolução das fases são previamente conhecidas. O problema inverso concebido tem por objetivo reconstruir a função que descreve o coeficiente de transferência de calor desconhecido a partir das posições dos deslocamentos das interfaces de mudança de fase.

GRZYMKOWSKI & SLOTA (2006) apresenta um modelo multifásico para problemas inversos de Stefan. A solução é determinada em uma forma de combinação linear das funções que satisfazem a equação de condução de calor. Os coeficientes da combinação são determinados pelo método dos mínimos quadrados para minimizar o valor da função objetivo que é definida com a norma de uma diferença entre a posição determinada pela interface de mudança de fase e uma posição reconstruída a partir da função selecionada que descreve o coeficiente de transferência de calor.

SLOTA (2008) apresenta uma aplicação de um algoritmo genético em problemas inversos de Stefan. O problema consiste na reconstrução da função que descreve o coeficiente de transferência de calor, sendo as posições de interfaces de mudança de fase conhecidas. Os resultados apresentados mostram que o uso do algoritmo genético aumenta a precisão dos resultados obtidos, em relação ao método Nelder-Mead utilizado em GRZYMKOWSKI & SLOTA (2006).

NEJAD et al. (2010) formulam um problema para o controle da solidificação do material de uma liga como um problema inverso de transferência de calor não-linear. Ao invés de considerar a solução para as fases sólida e líquida separadamente, foi proposta uma formulação envolvendo entalpia permitindo a simplificação do processo de resolução para apenas um único domínio espacial e temporal. Esse ajuste ajuda a superar as dificuldades de ligação das soluções separadas sólidos e líquidos na interface. O problema de minimização resultante foi eficientemente resolvido utilizando o método do gradiente conjugado com equação adjunta. Os autores controlam as zonas de sólido, de líquido, a frente de solidificação e a espessura da zona mushy para alcançar a qualidade do material desejado.

3 DESCRIÇÃO DO MODELO FÍSICO-MATEMÁTICO

O presente capítulo apresenta a descrição do problema físico, bem como a formulação matemática adotada para o mesmo. São estabelecidas hipóteses e apresentadas as condições de contorno e inicial do problema em estudo.

3.1 GRANADA ALTO EXPLOSIVA

Atualmente uma das granadas de morteiro mais utilizadas pelo exército brasileiro é a granada 120 mm AE CONV. As características típicas de uma granada de morteiro, representada na FIG. 3.1, estão descritas na TAB. 3.1.

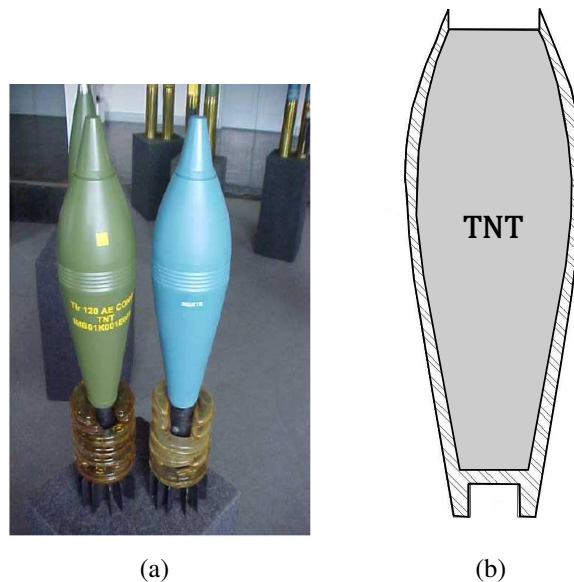


FIG. 3.1: Granada de morteiro 120 mm AE CONV, produzidas pela IMBEL

Este tipo de projétil contém no seu interior uma carga de alto explosivo, onde o Trinitrotolueno (TNT) fundido é o mais utilizado.

3.2 PROBLEMA FÍSICO E FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

No modelo matemático proposto para descrição do processo de solidificação no interior da granada considera-se que a cavidade interior da granada é um cilindro com altura L . A base

TAB. 3.1: Características Típicas da granada 120 mm AE CONV.

Região	Valor	Unidade
Massa Metálica	8,550	kg
Massa de TNT Fundido	2,064	kg
Massa total carregada	10,620	kg
Peso do Explosivo	2,1	kg
Altura	0,3419	m
Espessura da parede na região próxima a espoleta	0,02266	m
Espessura da parede na região próxima ao centro de massa	0,01	m
Espessura da parede na região próxima da carga de projeção	0,019	m
Raio principal	0,12	m
Raio superior	0,06182	m
Raio inferior	0,04625	m

Fonte: IMBEL (2010); SUN & GARIMELLA (2007); ISMAIL et al. (2001)

desse cilindro está à temperatura ambiente. O fluxo de calor é nulo no eixo de simetria, assim como na superfície lateral e superior do cilindro. Desta forma, o problema físico considerado envolve um processo de condução unidimensional, transiente, cujo domínio é ilustrado pela FIG. 3.2. Considera-se que a temperatura inicial T_0 e a temperatura da base T_w , são constantes.

As propriedades termofísicas para o TNT estão presentes em diversas referências (SUN & GARIMELLA, 2007; IMBEL, 2010), e os valores relevantes estão listados na TAB. 3.2. A massa específica do TNT depende da temperatura, e pode ser dada como se segue:

$$\rho(T) = \begin{cases} 1648\text{kg/m}^3 & T < T_m \\ 1544,6\text{kg/m}^3 & T \geq T_m \end{cases} \quad (3.1)$$

a capacidade térmica é expressa por:

$$C_{ap}(T) = \begin{cases} C_{sol}(T); & T \leq T_m - \Delta T & \text{— região sólida} \\ C_{ls}(T); & T_m - \Delta T < T < T_m + \Delta T & \text{— região de } \textit{mushy} \\ C_{liq}(T); & T \geq T_m + \Delta T & \text{— região líquida} \end{cases} \quad (3.2)$$

onde,

$$C_{sol} = \rho_{sol}c_p; \quad C_{liq} = \rho_{liq}c_p; \quad C_{ls} = \frac{\rho_{sol}\Delta H}{\Delta T} + \frac{C_{liq}(T)+C_{sol}(T)}{2}.$$

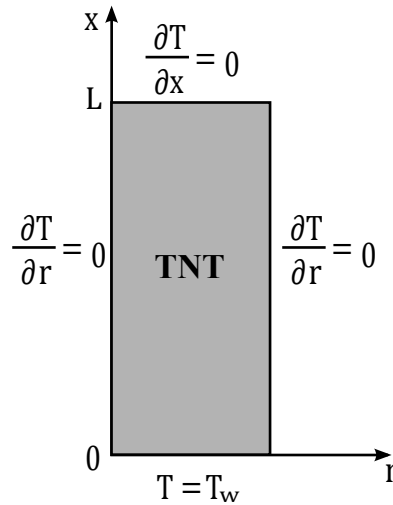


FIG. 3.2: Modelo geométrico representativo com as condições de contorno nas superfícies inferior, superior e lateral, e no eixo de simetria

TAB. 3.2: Propriedades termofísicas do TNT.

Propriedades	Representação	Unidade	Valor
Massa específica	ρ	kg/m ³	EQ. (3.1)
Calor específico	c_p	J/kg K	1062,2
Condutividade térmica	k	W/m K	0,26
Função capacidade aparente	C_{ap}	J/K m ³	EQ. (3.2)
Ponto de fusão	T_m	K	354,05
Calor latente	ΔH	KJ/kg	98,4

Fonte: (SUN & GARIMELLA, 2007; ISMAIL et al., 2001)

As propriedades termofísicas descritas na TAB. 3.2 referem-se ao líquido, sólido e sólido sem porosidade.

ISMAIL et al. (2001) sugerem que a condutividade térmica seja tratada de forma a computar os valores para as três regiões distintas. Desta forma, propõem-se que o tratamento da condutividade, seja descrito da seguinte forma:

$$\tilde{k}(T) = \begin{cases} k_{sol}(T); & T \leq T_m - \Delta T & - \text{ região s\u00f3lida} \\ k_{ls}(T) = k_{sol}(T); & T_m - \Delta T < T < T_m + \Delta T & - \text{ regi\u00e3o de } mushy \\ k_{liq}(T); & T \geq T_m + \Delta T & - \text{ regi\u00e3o l\u00edquida} \end{cases} \quad (3.3)$$

O modelo \u00e9 formulado de tal modo que a condi\u00e7\u00e3o de Stefan seja incorporada ao problema, empregando o m\u00e9todo da capacidade aparente de calor.

De acordo com o mencionado acima, o processo de solidifica\u00e7\u00e3o pode ser caracterizado pela condu\u00e7\u00e3o de calor unidimensional, em regime transiente. Logo, o processo f\u00edsico \u00e9 modelado pelo seguinte problema de valor de contorno e inicial, apresentado na forma dimensional.

$$C_{ap}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\tilde{k} \frac{\partial T}{\partial x} \right] \quad 0 < x < L \quad t > 0 \quad (3.4)$$

$$T = T_0 \quad 0 \leq x \leq L \quad t = 0 \quad (3.5)$$

$$T = T_w \quad x = 0 \quad t > 0 \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad x = L \quad t > 0 \quad (3.7)$$

As EQs.(3.4) a (3.7) apresentadas acima s\u00e3o resolvidas utilizando a t\u00e9cnica empregada no m\u00e9todo da capacidade aparente de calor.

Os par\u00e2metros adotados neste modelo est\u00e3o presentes na TAB. 3.3.

TAB. 3.3: Par\u00e2metros do modelo matem\u00e1tico.

Par\u00e2metro	Representa\u00e7\u00e3o	Unidade	Valor
Temperatura na base	T_w	K	300
Temperatura inicial	T_0	K	360
Espessura do material	L	m	0,3419

Fonte: (IMBEL, 2010; SUN et al., 2005)

3.3 O M\u00c9TODO DA CAPACIDADE EFETIVA

Proposto inicialmente por POIRIER & SALCUDEAN (1988) como um esfor\u00e7o para melhorar o m\u00e9todo de capacidade aparente, esta t\u00e9cnica assume um perfil de temperatura entre os

nós. A capacidade efetiva é calculada com base na integração através do volume de controle, onde a integração necessária é:

$$C_{ef} = \frac{\left(\int C_{ap} dV \right)}{V} \quad (3.8)$$

onde C_{ef} , C_{ap} e V são a capacidade efetiva de calor, capacidade aparente de calor e volume de controle, respectivamente.

Este método tem sido aplicado a problemas uni e bidimensionais, utilizando tanto a discretização explícita como a implícita. Alguns autores concordam que o método tem desempenho significativamente melhor do que o método da capacidade aparente (HU & ARGYROPOULOS, 1996).

Na TAB. 3.4 observa-se a descrição das integrações que determinam a capacidade térmica efetiva em cada volume. Os limites de integração presentes na TAB. 3.4 correspondem a temperatura na face norte (n) e na face sul (s) do volume de controle.

Assim, neste trabalho a capacidade térmica efetiva é redefinida como:

$$C_{ef} = \frac{\left(\int_{T_s}^{T_n} C_{ap} T dT \right)}{T_n - T_s} \quad (3.9)$$

Visualmente podemos conferir as condições impostas e adotadas para a determinação da capacidade térmica efetiva nas FIGs. 3.3- 3.8.

Desta forma, ao se aplicar o método da capacidade efetiva sobre o problema descrito pelas EQs. (3.4) a (3.7), estas são reescritas como:

$$C_{ef}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\tilde{k} \frac{\partial T}{\partial x} \right] \quad 0 < x < L \quad t > 0 \quad (3.10)$$

$$T = T_0 \quad 0 \leq x \leq L \quad t = 0 \quad (3.11)$$

$$T = T_w \quad x = 0 \quad t > 0 \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad x = L \quad t > 0 \quad (3.13)$$

TAB. 3.4: Determinação da capacidade efetiva .

Casos	Condições	C_{ef}
I	$T_s < T_m - \Delta T e T_n > T_m - \Delta T$	$\left\{ \frac{1}{T_n - T_s} \right\} \left\{ \int_{T_s}^{T_n} C_s dT \right\}$
II	$T_s < T_m - \Delta T e T_m - \Delta T < T_n < T_m + \Delta T$	$\left\{ \frac{1}{T_n - T_s} \right\} \left\{ \int_{T_s}^{T_m - \Delta T} C_s dT + \int_{T_m - \Delta T}^{T_n} C_{ls} dT \right\}$
III	$T_s < T_m - \Delta T e T_n > T_m + \Delta T$	$\left\{ \frac{1}{T_n - T_s} \right\} \left\{ \int_{T_s}^{T_m - \Delta T} C_s dT + \int_{T_m - \Delta T}^{T_m + \Delta T} C_{ls} dT + \int_{T_m + \Delta T}^{T_n} C_l dT \right\}$
IV	$T_m - \Delta T < T_s < T_m + \Delta T e T_n > T_m + \Delta T$	$\left\{ \frac{1}{T_n - T_s} \right\} \left\{ \int_{T_s}^{T_m + \Delta T} C_{ls} dT + \int_{T_m + \Delta T}^{T_n} C_l dT \right\}$
V	$T_s > T_m + \Delta T e T_n > T_m + \Delta T$	$\left\{ \frac{1}{T_n - T_s} \right\} \left\{ \int_{T_s}^{T_n} C_l dT \right\}$
VI	$T_m - \Delta T < T_s < T_m + \Delta T e T_m - \Delta T < T_n < T_m + \Delta T$	$\left\{ \frac{1}{T_n - T_s} \right\} \left\{ \int_{T_s}^{T_n} C_{ls} dT \right\}$

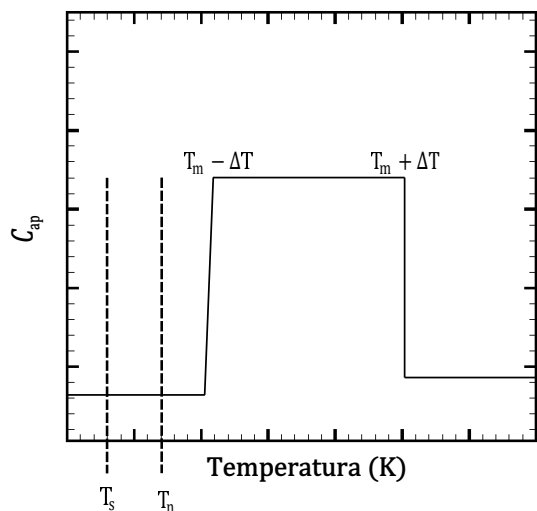


FIG. 3.3: Capacidade efetiva, Caso I

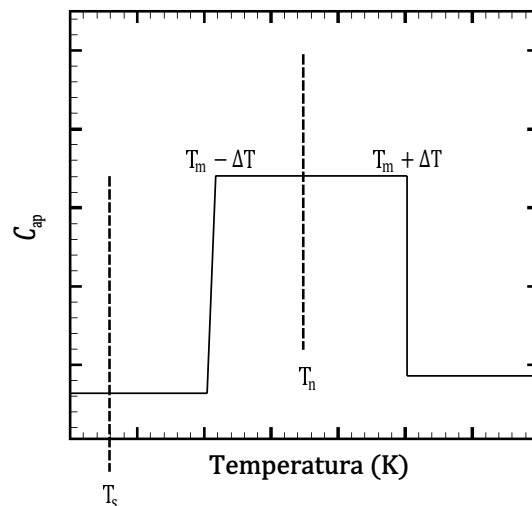


FIG. 3.4: Capacidade efetiva, Caso II

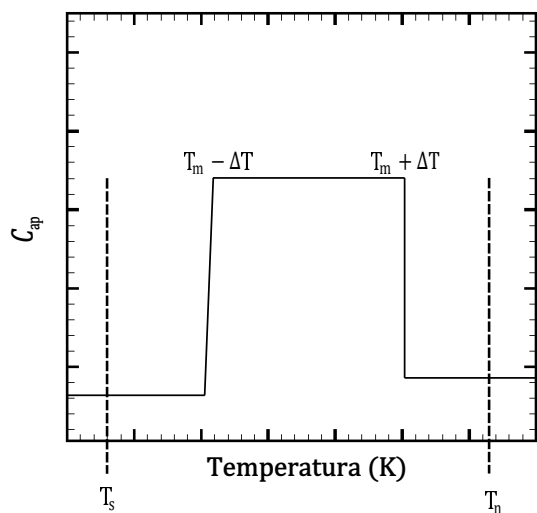


FIG. 3.5: Capacidade efetiva, Caso III

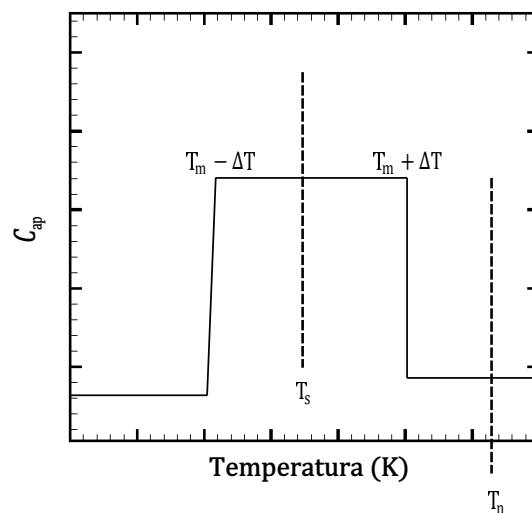


FIG. 3.6: Capacidade efetiva, Caso IV

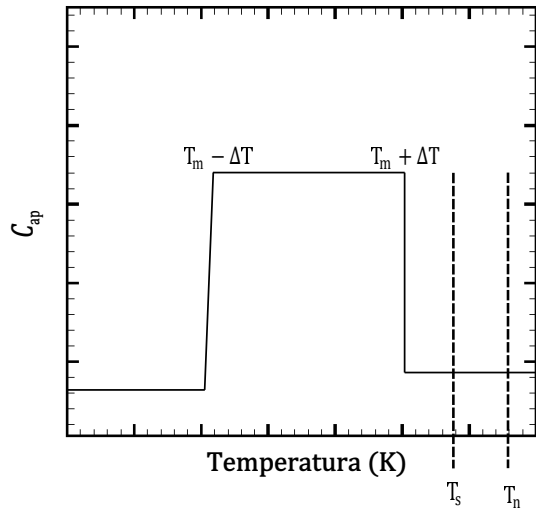


FIG. 3.7: Capacidade efetiva, Caso V

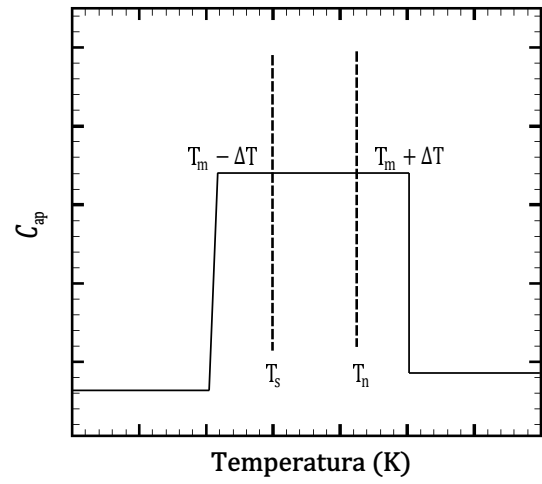


FIG. 3.8: Capacidade efetiva, Caso VI

4 SOLUÇÃO NUMÉRICA

O presente capítulo tem por objetivo descrever o Método dos Volumes Finitos e deduzir a discretização do problema proposto. Em outras palavras, representar as equações diferenciais parciais por um sistema de equações algébricas.

4.1 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS APLICADOS AO PROBLEMA DE SOLIDIFICAÇÃO

Conforme apresentado no Capítulo 3, tem-se a formulação matemática do problema proposto.

$$C_{ef}(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\tilde{k} \frac{\partial T}{\partial x} \right] \quad 0 < x < L \quad t > 0 \quad (4.1)$$

$$T = T_w \quad x = 0 \quad t > 0 \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad x = L \quad t > 0 \quad (4.3)$$

$$T = T_0 \quad 0 \leq x \leq L \quad t = 0 \quad (4.4)$$

onde a massa específica, a condutividade térmica e a capacidade térmica são representados por:

$$\rho = \begin{cases} 1648 \text{kg/m}^3 & T < T_m \\ 1544,6 \text{kg/m}^3 & T \geq T_m \end{cases} \quad (4.5)$$

$$\tilde{k}(T) = \begin{cases} k_{sol}(T); & T \leq T_m - \Delta T & \text{-- região sólida} \\ k_{ls}(T) = k_{sol}(T); & T_m - \Delta T < T < T_m + \Delta T & \text{-- região de } \textit{mushy} \\ k_{liq}(T); & T \geq T_m + \Delta T & \text{-- região líquida} \end{cases} \quad (4.6)$$

$$C_{ef} = \frac{\left(\int_{T_s}^{T_n} C_{ap} dT \right)}{T_n - T_s} \quad (4.7)$$

Na discretização das EQs. (4.1) - (4.4) empregou-se o Método de Volumes Finitos (MVF)

(ou Volumes de Controle). Este método consiste na integração das equações diferenciais sobre um certo número de volumes de controle originários da discretização do domínio. Uma vez que as equações diferenciais são obtidas originalmente através de balanços sobre volumes de controle, a massa, a energia e a quantidade de movimento são conservadas.

Para a interpolação da temperatura no espaço utilizou-se diferenças centradas entre os pontos nodais e na determinação do comportamento da temperatura no tempo escolheu-se o esquema explícito. Esta abordagem resulta em uma aproximação de 2ª ordem no espaço e de 1ª ordem no tempo.

Antes de proceder com a integração é preciso reescrever as equações na forma conservativa. Na integração são revelados os fluxos nas fronteiras do volume finito, procedimento que equivale ao balanço da grandeza no volume de controle.

Na FIG. 4.1(a) as linhas tracejadas delimitam as interfaces de cada volume. Já na FIG. 4.1(b) é representado um volume cujo ponto P está no centro do volume e as distâncias de P ao centro de cada volume vizinho (pontos N e S).

Na FIG. 4.1(b) é apresentada uma ilustração de três volumes do domínio, onde o volume de controle (entre linhas horizontais tracejadas) de centro P é o volume onde as equações algébricas são obtidas. Os volumes adjacentes são nomeados segundo os pontos cardeais norte (N) e sul (S), que são empregados nas funções de interpolação propostas para aproximar os fluxos convectivos e difusivos. As letras minúsculas **n** e **s** representam, respectivamente, as faces norte e sul de cada volume de controle. Além disso, δx é o comprimento do volume P e a distância entre o centro do volume P ao centro dos volumes adjacentes são simbolizadas por $(\delta x)_n$ e $(\delta x)_s$.

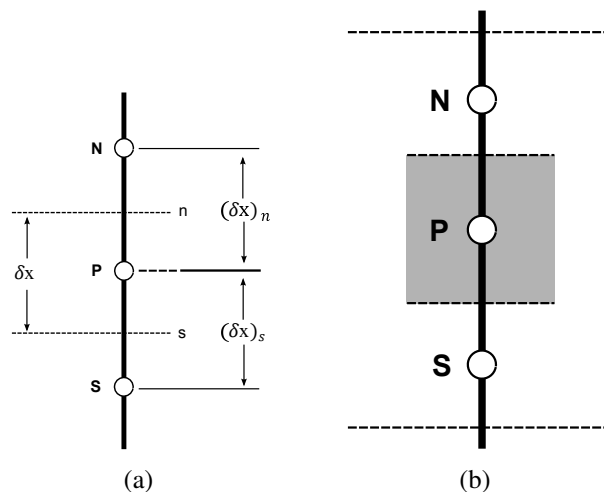


FIG. 4.1: Volume de controle e volumes vizinhos (MALISKA, 2004)

Integrando a EQ. (4.1), na forma conservativa, no tempo e espaço, obtém-se

$$C_{ef} (T_P^n) \frac{(T_P^{n+1} - T_P^n)}{\delta t} \delta x = \tilde{k} (T_n^n) \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_n - \tilde{k} (T_s^n) \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_s \quad (4.8)$$

tal que, os índices **n** e **s** indicam que o fluxo de calor é avaliado sobre as faces do volume P. As aproximações para os fluxos nas interfaces são dadas da seguinte forma:

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_n \approx \frac{T_N^n - T_P^n}{(\delta x)_n} \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_s \approx \frac{T_P^n - T_S^n}{(\delta x)_s} \quad (4.10)$$

onde, os índices N e S mostram que a temperatura é avaliada nos centros dos volumes norte e sul, respectivamente.

Substituindo a EQ. (4.9) e a EQ. (4.10) na EQ. (4.8), tem-se

$$C_{ef} (T_P^n) \frac{(T_P^{n+1} - T_P^n)}{\delta t} \delta x = \tilde{k} (T_n^n) \frac{T_N^n - T_P^n}{(\delta x)_n} - \tilde{k} (T_s^n) \frac{T_P^n - T_S^n}{(\delta x)_s} \quad (4.11)$$

Reescrevendo-se a EQ. (4.11) obtêm-se as equações para cada volume do domínio, as quais são do tipo:

$$A_P T_P^{n+1} = A_n T_N^n + A_s T_S^n + B_P \quad (4.12)$$

onde,

$$A_P = C_{ef} \frac{\delta x}{\delta t} \quad (4.13)$$

$$A_n = \frac{\tilde{k}}{(\delta x)_n} \quad (4.14)$$

$$A_s = \frac{\tilde{k}}{(\delta x)_s} \quad (4.15)$$

$$B_P = C_{ef} \frac{\delta x}{\delta t} T_P^n - \frac{\tilde{k}}{(\delta x)_n} - \frac{\tilde{k}}{(\delta x)_s} \quad (4.16)$$

As aproximações para as derivadas referentes aos volumes próximos aos contornos N e S são obtidas por meio da integração sobre o volume de controle, no tempo e no espaço, da equação na forma conservativa.

As aproximações para as derivadas utilizadas nos fluxos em cada contorno são apresentadas a seguir.

Contorno norte, onde $x = L$ (fluxo nulo):

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_n = 0 \quad (4.17)$$

Assim, para obter a aproximação do fluxo para o contorno norte (N) substitui-se a EQ. (4.17) na EQ. (4.8),

$$C_{ef} (T_P^n) \frac{(T_P^{n+1} - T_P^n)}{\delta t} \delta x = -\tilde{k} (T_s^n) \frac{T_P^n - T_S^n}{(\delta x)_s} \quad (4.18)$$

Reescrevendo-se a EQ. (4.18) obtêm-se

$$A_P T_P^{n+1} = A_S T_S^n + B_P \quad (4.19)$$

onde,

$$A_P = C_{ef} \frac{\delta x}{\delta t} \quad (4.20)$$

$$A_n = 0 \quad (4.21)$$

$$A_s = \frac{\tilde{k}}{(\delta x)_s} \quad (4.22)$$

$$B_P = C_{ef} \frac{\delta x}{\delta t} T_P^n - \frac{\tilde{k}}{(\delta x)_s} \quad (4.23)$$

No contorno sul, onde $x = 0$ (temperatura prescrita), temos:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_s = \frac{T_P^n - T_w}{\frac{(\delta x)_s}{2}} \quad (4.24)$$

onde T_w é o valor da temperatura no contorno $x = 0$.

Da mesma forma, substitui-se a EQ. (4.24) na EQ. (4.8),

$$C_{ef} (T_P^n) \frac{(T_P^{n+1} - T_P^n)}{\delta t} \delta x = \tilde{k} (T_n^n) \frac{T_N^n - T_P^n}{(\delta x)_n} - \tilde{k} (T_s^n) \frac{T_P^n - T_w}{\frac{(\delta x)_s}{2}} \quad (4.25)$$

Reescrevendo-se a EQ. (4.25) obtêm-se as equações para cada volume do domínio

$$A_P T_P^{n+1} = A_n T_N^n + B_P \quad (4.26)$$

onde,

$$A_P = C_{ef} \frac{\delta x}{\delta t} \quad (4.27)$$

$$A_n = \frac{\tilde{k}_n}{(\delta x)_n} \quad (4.28)$$

$$A_s = 0 \quad (4.29)$$

$$B_P = C_{ef} \frac{\delta x}{\delta t} T_P^n + 2 \frac{\tilde{k}_s}{(\delta x)_s} T_w - \frac{\tilde{k}_n}{(\delta x)_n} - 2 \frac{\tilde{k}_s}{(\delta x)_s} \quad (4.30)$$

Como temos uma equação para cada volume finito e em cada uma dessas equações as temperaturas vizinhas são sempre do instante anterior, o esquema explícito dá origem a um conjunto de equações algébricas que podem ser resolvidas uma a uma, obtendo-se a temperatura em cada volume para o novo tempo. Sendo assim, não existe a necessidade de resolver um sistema linear.

Devemos ressaltar que a formulação explícita possui uma limitação importante com relação ao tamanho do intervalo de tempo que pode ser adotado para avançar na solução. O critério de estabilidade a ser satisfeito é:

$$\frac{\tilde{k}}{C_{ef}} \frac{\delta t}{\delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad (4.31)$$

Utilizando a análise de von Neumann (MILIOLI et al., 1985) observamos que esse critério permite que o coeficiente de T_p^n seja sempre positivo. De forma geral, podemos dizer que o intervalo de tempo em formulações explícitas é limitado pelo critério estabilidade. Vale ressaltar que quando se faz necessário um refino na malha utilizada, o δt deve ser reduzido a fim de respeitar (4.31) (MALISKA, 2004).

5 VERIFICAÇÃO DA SOLUÇÃO NUMÉRICA

Neste capítulo são apresentados os resultados para a verificação decorrente do confronto entre os resultados numéricos obtidos, com solução analítica para o problema de duas fases, com a finalidade de corroborar o bom funcionamento do código computacional. Desta forma, o problema aborda a condução em regime transiente para o problema de mudança de fase.

A fim de avaliar a robustez, taxa de convergência e esforço computacional exigido, é conduzido um estudo acerca da malha e do intervalo de tempo a serem empregados.

5.1 PROBLEMA DE MUDANÇA DE FASE

Nesta seção o modelo desenvolvido é verificado frente a um problema de solidificação em um meio semi-infinito (Problema de duas fases), para o qual uma solução analítica está presente em ÖZİŞIK (1993). Um líquido a uma temperatura uniforme T_0 , que é mais alta do que a temperatura de solidificação T_m , constitui um meio semi-infinito $x > 0$. Em $t = 0$, o contorno em $x = 0$ está a uma temperatura T_w , inferior a T_m , é mantido a essa temperatura ao longo do tempo $t > 0$. Como resultado, a solidificação começa na superfície $x = 0$ e os movimentos da interface sólido-líquido acontecem na direção positiva de x . Este problema é conhecido como um problema de duas fases porque as temperaturas são desconhecidas em ambas as fases, sólida e líquida (ÖZİŞIK, 1993). Esta solução é conhecida como solução de Neumann.

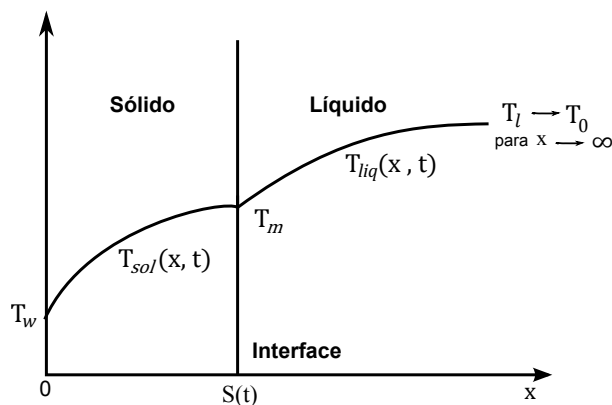


FIG. 5.1: Solidificação em um meio semi-infinito (ÖZİŞIK, 1993)

5.1.1 SOLUÇÃO ANALÍTICA DO PROBLEMA DE MUDANÇA DE FASE

De acordo com ÖZİŞİK (1993) a solução analítica para a distribuição de temperatura na região do sólido e do líquido é dada por:

$$T_{sol}(x,t) = T_w + (T_m - T_w) \left(\frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_{sol}t}}\right)}{\operatorname{erf}(\lambda)} \right) \quad (5.1)$$

$$T_{liq}(x,t) = T_0 + (T_m - T_0) \left(\frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_{liq}t}}\right)}{\operatorname{erfc}\left(\lambda\sqrt{\frac{\alpha_{sol}}{\alpha_{liq}}}\right)} \right) \quad (5.2)$$

onde, λ é um valor constante a ser determinado através da EQ. (5.3)

$$\frac{e^{-\lambda^2}}{\operatorname{erf}(\lambda)} + \frac{k_{liq}}{k_{sol}} \sqrt{\frac{\alpha_{sol}}{\alpha_{liq}}} \frac{T_m - T_0}{T_m - T_w} \frac{e^{-\lambda^2(\alpha_{sol}/\alpha_{liq})}}{\operatorname{erfc}\left[\lambda\sqrt{(\alpha_{sol}/\alpha_{liq})}\right]} = \frac{\lambda\Delta H\sqrt{\pi}}{c_{psol}(T_m - T_w)} \quad (5.3)$$

A frente de solidificação $S(t)$ é expressa por:

$$S(t) = 2\lambda\sqrt{(\alpha_{sol}t)} \quad (5.4)$$

Embora estejamos em um meio semi-infinito, iremos considerar uma placa com dimensão $L = 0.3419$ m. As temperaturas e as propriedades termofísicas do TNT estão listadas nas TABs. 3.3 e 3.2, respectivamente. Para a determinação do parâmetro constante λ , é utilizado o Método da Bisseção na EQ. (5.3).

No que concerne à zona de mudança de fase, alguns testes foram realizados a respeito do valor do parâmetro que delimita o tamanho da zona de *mushy*. O parâmetro ΔT é assim estipulado de forma que o desvio relativo da solução numérica confrontando a solução de Neumann para este problema se aproxime de um valor mínimo desejado de 1%.

Neste contexto, após a realização de algumas simulações para diversos valores de ΔT optamos por avaliar a evolução do transiente de temperatura para valores do parâmetro equivalentes a 2K e 5K.

Na FIG. 5.2 podemos observar que através do estudo do parâmetro ΔT , no perfil de temperatura o melhor valor encontrado e que mais se aproxima da curva de temperatura analítica, obtida através das EQs. (5.1) e (5.2), é $\Delta T = 2K$, pois para $\Delta T = 5K$, há uma mudança menos acentuada na curva de solidificação, principalmente na mudança de fase. Isso ocorre pelo fato de haver uma mudança mais brusca na derivada para valores menores de ΔT .

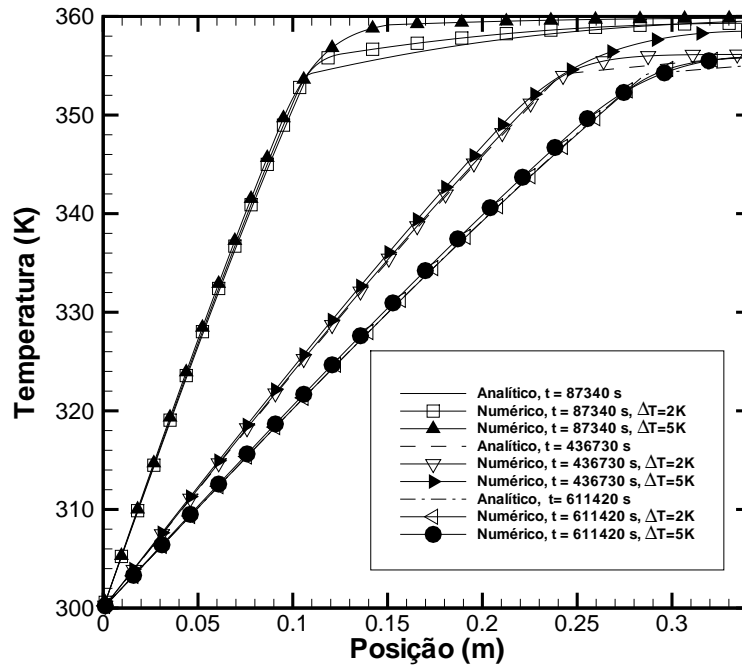


FIG. 5.2: Comparação do parâmetro ΔT para uma malha de 160 volumes para diferentes tempos

A FIG. 5.3 apresenta a evolução da solidificação ao longo do tempo com o objetivo de realizar uma segunda análise a respeito do valor do parâmetro ΔT a ser adotado. Desta forma, neste gráfico apresentamos a comparação da solução analítica para a frente de solidificação $S(t)$, EQ. (5.4), e as frentes de solidificação obtidas para os valores de $\Delta T = 2K$ e $5K$. Podemos notar que as curvas de solidificação têm o mesmo comportamento não linear. Porém, no destaque da FIG. 5.3 observamos que as curvas se cruzam, levando a crer que para a frente de solidificação o melhor valor de ΔT a ser adotado deverá ser de $5K$. Valores diferentes para ΔT fazem como que a região de *mushy* cresça ou diminua, com isso o fluxo de calor na região varia a medida que valores diferentes de ΔT são empregados, retardando ou acelerando a solidificação.

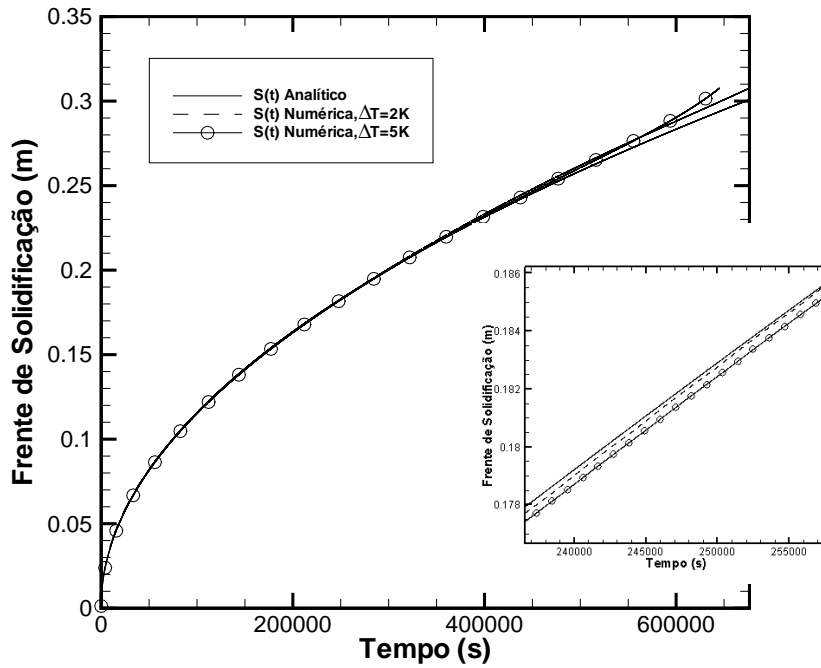


FIG. 5.3: Comparação do parâmetro ΔT pela frente de solidificação analítica

Desta forma, podemos exprimir que caso seja de nosso interesse somente avaliar a frente de solidificação o valor de $\Delta T = 5K$ atende a nosso objetivo, porém se for de nosso intuito analisar o perfil de temperatura, o valor adotado deverá ser de $\Delta T = 2K$. Entretanto uma diferenciação nestas avaliações tornaria o processo de verificação mais custoso, sendo assim, observando a TAB. 5.1, chegamos à conclusão que se avaliarmos para tempos específicos a adoção do parâmetro $\Delta T = 2K$ é justificada, conforme podemos notar nos desvios relativos inferiores a 1%.

Para as verificações que se seguem foram escolhidos os instantes de tempo correspondentes a 10%, 50% e 70% do tempo total (t_{end}), previsto para o processo de solidificação, fornecido pela EQ. (5.5).

$$t_{end} = \frac{L^2}{4\lambda^2\alpha_{sol}} \quad (5.5)$$

onde, $\alpha_{sol} = \frac{k_{sol}}{C_{sol}}$, que pode ser obtido através das EQs. (3.1) e (3.2).

Uma observação importante diz respeito aos valores encontrados para os tempos requeri-

dos. Os valores encontrados sugerem que o processo de solidificação dá-se ao longo de 7 dias aproximadamente, o que não condiz com a realidade. Porém, os valores encontrados referem-se sobretudo a característica do material em estudo que se comporta como um isolante térmico com difusividade térmica da ordem de $10^{(-7)}\text{m}^2/\text{s}$. Um outro motivo para que este tempo seja elevado consiste no modelo proposto onde temos uma superfície isolada e outra com temperatura prescrita. Assim, o calor necessita atravessar o sólido isolante para sair do domínio do problema físico.

TAB. 5.1: Análise dos valores do parâmetro ΔT (malha com 160 volumes)

Tempo, (s)	Frente de solidificação (S(t))		
	$\Delta T = 2\text{K}$	$\Delta T = 5\text{K}$	Desvio Relativo(%)
87340	0,1079	0,1077	0,0020
436730	0,2441	0,2427	0,0057
611420	0,2910	0,2942	0,0109

5.1.2 ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA PARA O PROBLEMA DE MUDANÇA DE FASE

Fazendo uso da solução analítica, pode-se realizar também a análise de convergência da solução numérica. Nesta etapa, a quantidade de volumes necessária para a convergência da solução numérica será investigada. As análises foram feitas em 3 posições distintas, sempre no início, meio e fim do domínio, conforme exemplificado pela FIG.5.4, para os 3 instantes de tempo descritos anteriormente.

A TAB.5.2 apresenta os valores obtidos de temperatura para 4 quantidades de volumes na malha para a análise de convergência. Os valores obtidos apresentam desvios relativos inferiores a 1%.

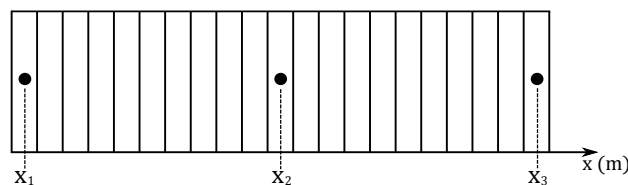


FIG. 5.4: Localização das posições a serem utilizadas para as verificações, malha de 20 volumes

TAB. 5.2: Resultado dos desvios (%) obtidos para 3 posições em três tempos distintos.

Quantidade de volumes na malha	t = 87340 s		
	$x_1 = 0,0085475 \text{ m}$	$x_2 = 0,1624025 \text{ m}$	$x_2 = 0,3333525 \text{ m}$
20	0,0595	0,17760	0,0747
40	0,1379	0,23032	0,0623
80	0,1849	0,25925	0,0531
160	0,2045	0,27122	0,0489

Quantidade de volumes na malha	t = 436730 s		
	$x_1 = 0,0085475 \text{ m}$	$x_2 = 0,1624025 \text{ m}$	$x_2 = 0,3333525 \text{ m}$
20	0,0602	0,3460	0,0973
40	0,0790	0,0386	0,1006
80	0,0868	0,0837	0,1013
160	0,0894	0,1253	0,10148

Quantidade de volumes na malha	t = 611420 s		
	$x_1 = 0,0085475 \text{ m}$	$x_2 = 0,1624025 \text{ m}$	$x_2 = 0,3333525 \text{ m}$
20	0,0518	0,2766	0,1471
40	0,0653	0,0574	0,2136
80	0,0705	0,0269	0,2310
160	0,0722	0,0549	0,2353

Observe que para os instantes iniciais o maior desvio apresentado é obtido no primeiro ponto do domínio. Ao decorrer do tempo esse desvio se torna maior no meio do domínio pois a influência da zona de *mushy* é maior nesse ponto e, desta forma, um número maior de volumes nesta região se faz necessário para melhor representar a mudança de fase.

As FIGs. 5.5, 5.6, 5.7 e 5.8 mostram que, a despeito dos baixos desvios reportados na TAB. 5.2, a solução numérica com 160 volumes apresenta melhor concordância com a solução analítica.

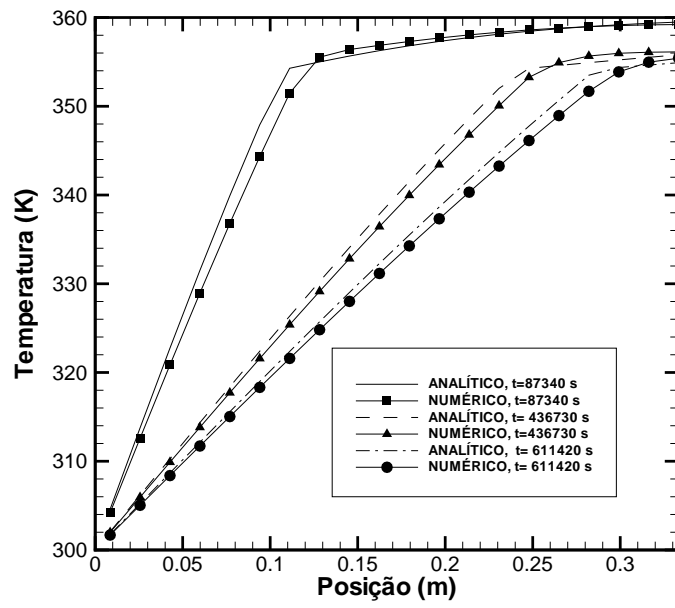


FIG. 5.5: Perfil de temperatura (malha com 20 volumes)

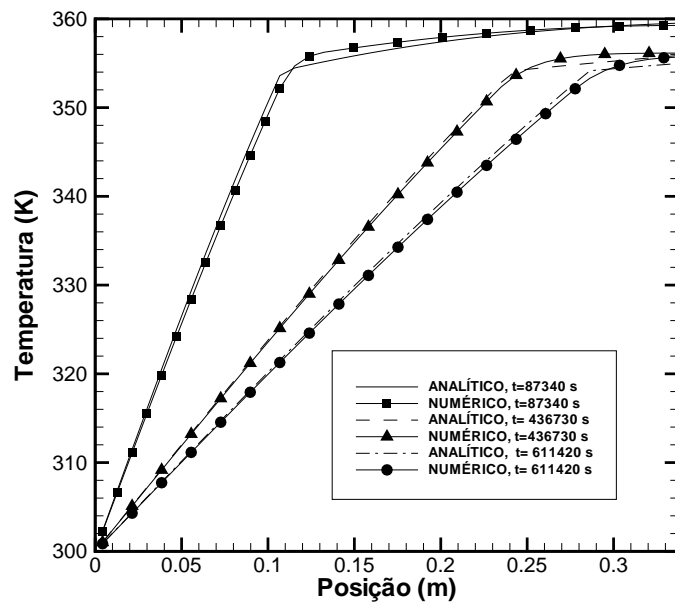


FIG. 5.6: Perfil de temperatura (malha com 40 volumes)

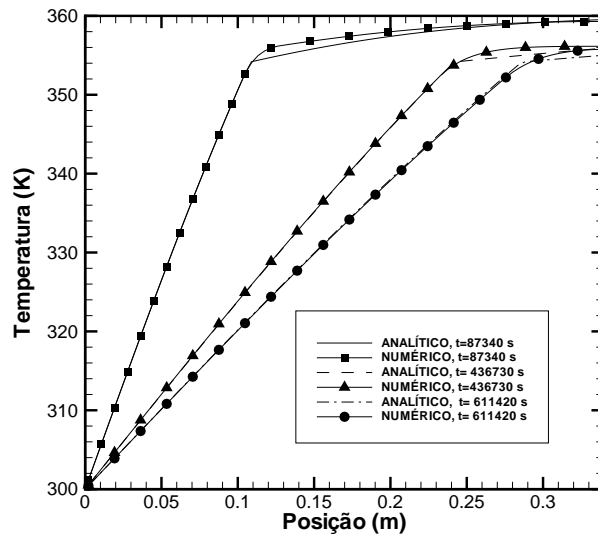


FIG. 5.7: Perfil de temperatura (malha com 80 volumes)

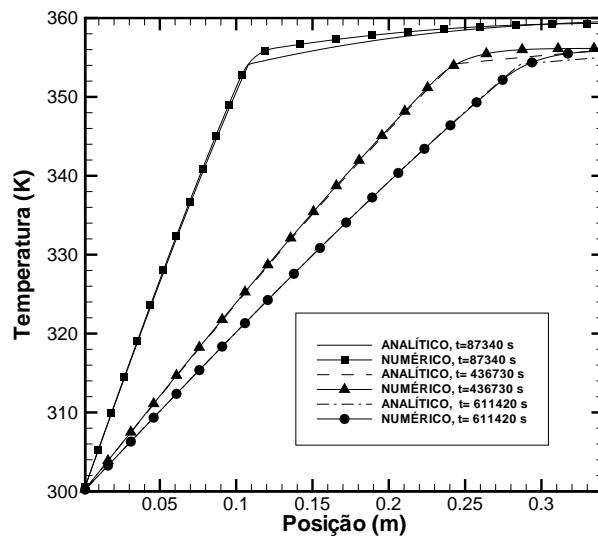


FIG. 5.8: Perfil de temperatura (malha com 160 volumes)

Nas TABs. 5.3, 5.4, 5.5 e 5.6 encontramos a relação dos desvios obtidos na comparação da frente de solidificação analítica com a numérica para os 3 tempos distintos, analisados para as diferentes quantidades de volumes na malha. O critério adotado para esta análise segue o mesmo critério adotado, para a análise do transiente de temperatura.

TAB. 5.3: Análise do desvio (%) entre as soluções analítica e numérica para a frente de solidificação (malha com 20 volumes)

Tempo, (s)	Frente de solidificação (S(t))		
	Numérica	Analítica	Desvio Relativo
87340	0,1223	0,1081	13,1969
436730	0,2570	0,2417	6,30957
611420	0,3034	0,2860	6,08907

TAB. 5.4: Análise do desvio (%) entre as soluções analítica e numérica para a frente de solidificação (malha com 40 volumes)

Tempo, (s)	Frente de solidificação (S(t))		
	Numérica	Analítica	Desvio Relativo
87340	0,1135	0,1081	5,0419
436730	0,2483	0,2417	2,7348
611420	0,2947	0,2860	3,0393

TAB. 5.5: Análise do desvio (%) entre as soluções analítica e numérica para a frente de solidificação (malha com 80 volumes)

Tempo, (s)	Frente de solidificação (S(t))		
	Numérica	Analítica	Desvio Relativo
87340	0,1094	0,1081	1,2346
436730	0,2451	0,2417	1,3902
611420	0,2919	0,2860	2,0774

TAB. 5.6: Análise do desvio (%) entre as soluções analítica e numérica para a frente de solidificação (malha com 160 volumes)

Tempo, (s)	Frente de solidificação (S(t))		
	Numérica	Analítica	Desvio Relativo
87340	0,1079	0,1081	0,1697
436730	0,2441	0,2417	0,9702
611420	0,2910	0,2860	1,7448

Note que, conforme aumentamos o número de volumes na malha, a solução numérica para a frente de solidificação se aproxima da analítica.

Observa-se que quanto menor é a quantidade de volumes utilizados, maior é o desvio apresentado para os instantes iniciais. Com poucos volumes há uma descontinuidade entre a temperatura inicial do contorno e a temperatura inicial do domínio. À medida que se insere mais volumes, esse desvio, passa a ser maior para os instantes finais. Repare que com 160 volumes na malha, o maior desvio apresentado acontece quando atingimos os 70% do tempo total, o que já era esperado. Isto se deve ao domínio finito empregado na solução numérica em oposição ao domínio semi-infinito da solução analítica. Ou seja, para tempos elevados, as perturbações na solução numérica impostas pela presença do contorno na região líquida tornam-se relevantes, devido ao truncamento empregado no domínio.

O efeito da posição de truncamento do domínio sobre a solução numérica pode ser avaliado a partir dos resultados apresentados na FIG. 5.9. Nesta figura são reportadas as curvas da evolução da frente de solidificação provenientes de soluções numéricas com o comprimento do domínio igual a 0,3419 m e a 3,419 m, bem como da solução analítica com o domínio semi-infinito. Como esperado, para o intervalo de tempo analisado, observa-se uma maior concordância entre as soluções numéricas obtidas com maiores comprimentos do domínio com a solução analítica. Portanto, ao se comparar a solução analítica com domínio semi-infinito com a solução numérica com domínio finito, é relevante analisar a influência da posição de truncamento do domínio, assim como o intervalo de tempo de interesse. Desta forma, as divergências entre as soluções constatadas na FIG. 5.3 são decorrentes do truncamento do domínio e do tempo de observação da evolução da frente de solidificação.

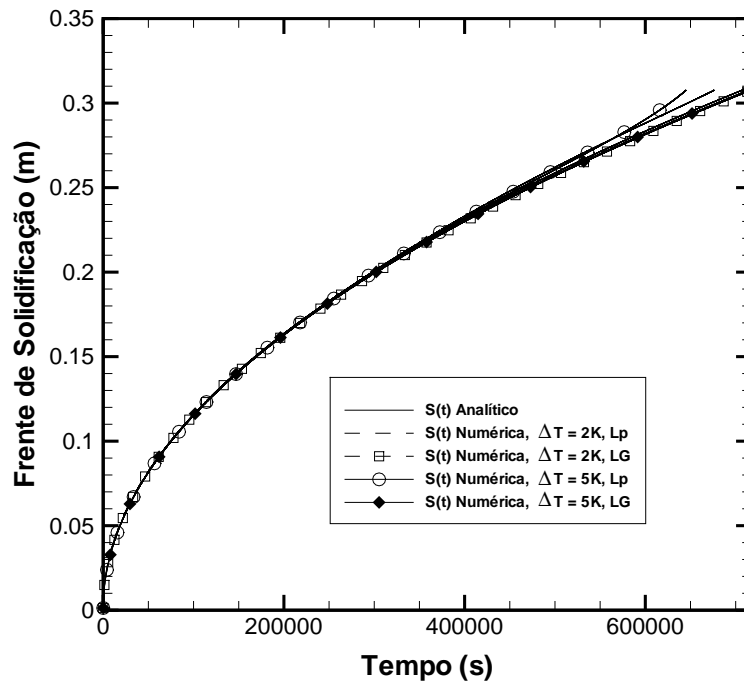


FIG. 5.9: Comparação do parâmetro ΔT pela frente de solidificação analítica, Domínio estendido

De acordo com a TAB. 5.6, a solução numérica com 160 volumes apresentou os menores desvios relativos em relação a solução analítica, sendo estes inferiores a 2% .

6 OTIMIZAÇÃO POR ENXAME DE PARTÍCULAS

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos para a estimativa do parâmetro ΔT (metade da variação da temperatura na zona de *mushy*). A otimização deste parâmetro é importante, pois ele é necessário ao modelo matemático e uma vez desconhecido, sua estimativa é importante para a prescrição do modelo. Fisicamente a identificação deste parâmetro auxilia no acompanhamento da mudança de fase, pois para materiais derivados de misturas, esse processo ocorre em uma faixa de temperatura e não em um ponto específico. Para este parâmetro, a procura de uma solução ótima decorre da aplicação de um método heurístico de otimização, o Enxame de Partículas. Além disso, apresentamos a fundamentação teórica e o algoritmo a que se propõe a resolução deste método.

6.1 ASPECTOS TEÓRICOS

Com a evolução tecnológica dos computadores está sendo possível realizar estudos que necessitam de uma grande quantidade de variáveis, amostras e testes. Frente a isso, pesquisadores começaram a ter interesse em encontrar uma nova forma de inteligência artificial, a inteligência coletiva (*swarm intelligence*). Desenvolvida inicialmente por EBERHART & KENNEDY (1995) como uma alternativa para o Método Algoritmo Genético, a Otimização por Enxame de Partículas (*Particle Swarm Optimization* - PSO) é uma técnica estocástica de otimização, onde as restrições ou os parâmetros dependem de variáveis aleatórias (LANDIM, 1991). O PSO representa uma analogia ao de aprendizado social, que leva em conta que o indivíduo pode obter vantagem tanto de sua própria experiência quanto a partir do conhecimento adquirido por outro elemento de seu grupo. É um método que pode ser facilmente implementado, além de usar operadores aritméticos simples, o que mostra ser eficiente em vários problemas de otimização (COLAÇO et al., 2006).

Modelos que simulassem comportamentos sociais, como o de um bando de pássaros ou o de um cardume de peixes, estavam sendo estudados em torno de 1990 e serviram como fonte de inspiração para a elaboração do PSO (KENNEDY & EBERHART, 2001). O interesse desses pesquisadores girava em torno da descoberta de leis que descrevessem a dinâmica do movimento coletivo daqueles animais.

Os primeiros modelos de simulação da época traziam processos locais como base para o

movimento coletivo. Através deles, cada componente conseguiria ajustar suas condições de posição e velocidade em relação aos outros do grupo. Isto proporcionou um grande campo para a proposição do modelo de otimização utilizando um enxame de partículas.

EBERHART & KENNEDY (1995) propuseram no início da década de 90 um novo modelo com base no aprendizado coletivo, que apesar de similar com os já apresentados, possuía o detalhe inovador de os pássaros desta modelagem serem atraídos para um ponto específico. Esta técnica seria possível quando uma tendência fosse programada para que os pássaros pousem ao invés de permanecer em vôo, ou seja, quando um determinado pássaro sobrevoasse uma determinada área, seria atraído, e os demais, com o aprendizado coletivo, se movimentariam, com o intuito de aterrissar.

O tratamento de cada indivíduo como pássaro ou peixe, de acordo com as analogias utilizadas é inadequado, podendo sugerir que cada “indivíduo” seria capaz de tirar suas próprias conclusões. Desta forma, o termo *partícula* passou a ser utilizado para caracterizar os membros de uma determinada população que procura por soluções.

6.2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO PSO

No PSO cada partícula ou indivíduo é dotado de uma capacidade de aprendizado individual e de uma capacidade de aprendizado baseado na experiência da população.

Cada partícula i de uma determinada população P em um espaço n -dimensional tem uma velocidade v_i^k e uma posição x_i^k , atualizadas de acordo com as EQs. (6.1) e (6.2).

$$v_i^{k+1} = \omega v_i^k + c_1 r_{1i} (p_i - x_i^k) + c_2 r_{2i} (p_g - x_i^k) \quad (6.1)$$

$$x_i^{k+1} = x_i^k + v_i^{k+1} \quad (6.2)$$

onde

$$i = 1, 2, \dots, P$$

x_i é i -ésimo vetor de parâmetros individuais

$$v_i = 0, \text{ para } k = 0$$

r_{1i} e r_{2i} são números randômicos entre 0 e 1

p_i é o melhor valor encontrado para o vetor x_i
 p_g é o melhor valor encontrado para toda a população
 $0 < \omega < 1$ constante inercial
 $1 < c_1, c_2 < 2$ constantes

Na EQ. (6.1), o segundo termo do lado direito representa a individualidade e o terceiro termo a sociabilidade. O primeiro termo do lado direito representa a inércia das partículas e, em geral, tem de ser diminuída à medida que o processo iterativo se desenvolve. Nesta equação, o vetor p_i representa o melhor valor já encontrado para o vetor de parâmetros x_i durante o processo iterativo. Assim, o termo individualidade envolve a comparação entre o valor atual do indivíduo com seu melhor valor da iteração anterior. O vetor p_g é o melhor valor já encontrado para toda a população de parâmetros (e não apenas o indivíduo da iteração atual). Logo, o termo sociabilidade compara x_i com o melhor valor de toda a população da iteração anterior (COLAÇO et al., 2006). O Apêndice 1 apresenta o algoritmo do método do Enxame de Partículas.

6.3 RESULTADOS PARA A ANÁLISE DO NÚMERO DE PARTÍCULAS

O procedimento de otimização do parâmetro ΔT consiste na minimização da diferença existente entre a posição da frente de solidificação obtida pela solução analítica de Neumann e pela solução numérica proposta.

A EQ. (6.3) apresenta a solução analítica para a posição da frente de solidificação, enquanto a EQ. (6.4) define a função objetivo para o problema de otimização.

$$S(t)_{analítica} = 2\lambda\sqrt{(\alpha_{sol}t)} \quad (6.3)$$

A fim de aferir a qualidade deste ajuste, no presente estudo, utilizamos o cálculo da soma dos quadrados das distâncias entre a frente de solidificação calculada a partir da solução analítica e da solução numérica, de maneira que essas diferenças sejam mínimas, conforme a EQ. (6.4)

$$\bar{F} = \sum_1^n [S(t)_{analítica} - S(t)_{numérica}]^2 \quad (6.4)$$

onde n equivale ao número de pontos no tempo.

A posição da frente de solidificação foi escolhida por se tratar de uma grandeza dependente somente do tempo, diferente do perfil de temperatura que depende do tempo e do espaço. Esta característica facilita a implementação numérica. O tempo de avaliação é truncado em 70% do tempo total estimado para a solidificação. O tempo total estimado é obtido pela EQ. (5.5). Os valores adotados para os parâmetros α_{sol} e λ , da EQ.(6.3), são os mesmos adotados na Seção 5.1.

Valores aleatórios entre 1K e 10K são gerados para o parâmetro ΔT , correspondendo ao estado inicial de cada partícula. Foram avaliadas populações com 10, 30 e 50 partículas.

A TAB. 6.1 apresenta os valores ótimos obtidos para o ΔT , para três quantidades distintas de partículas. A quantidade de indivíduos na população é indicada entre parênteses abaixo da sigla do método. Com 50 partículas, como esperado, o método minimizou mais a função objetivo ao perfazer 121 iterações, porém o tempo computacional gasto foi o mais elevado. Esta observação é confirmada pela análise da FIG. 6.1, onde a função objetivo é mais minimizada para este caso. Na FIG. 6.2 as diferenças existentes são mais claramente perceptíveis em relação ao valor da função objetivo para diferentes tamanhos de população.

TAB. 6.1: Efeitos do número de partículas sobre as soluções ótimas

Número de Partículas	tempo CPU(s)	ΔT (K)	Função Objetivo	Iterações
PSO ₍₁₀₎	10705,52	3,55996119	0,13403172	168
PSO ₍₃₀₎	37277,47	3,55993432	0,13403156	195
PSO ₍₅₀₎	38629,23	3,55448620	0,13403026	121

Na TAB. 6.2 estão apresentados os resultados para a frente de solidificação em três tempos distintos. Observe que, para a avaliação da posição da frente de solidificação, o ΔT obtido com o PSO₍₁₀₎ apresenta resultados satisfatórios. Logo, o PSO₍₁₀₎ pode ser utilizado em estudos futuros que visem avaliar a frente de solidificação.

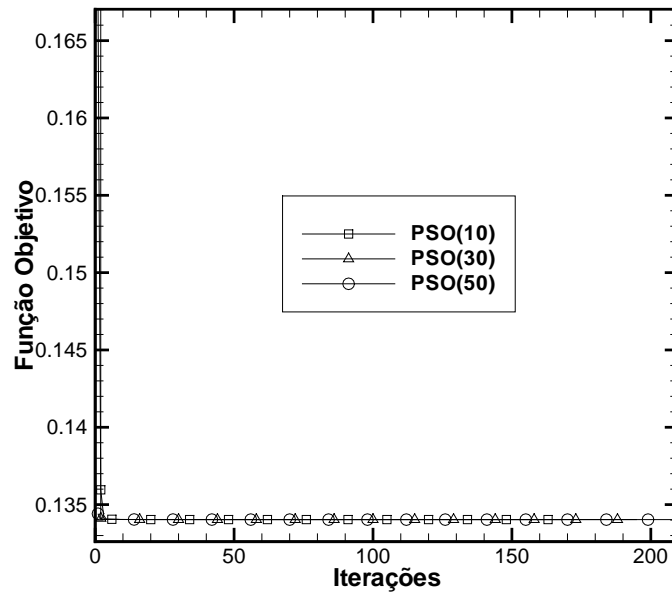


FIG. 6.1: Evolução da função objetivo ao longo das iterações (10, 30 e 50 partículas)

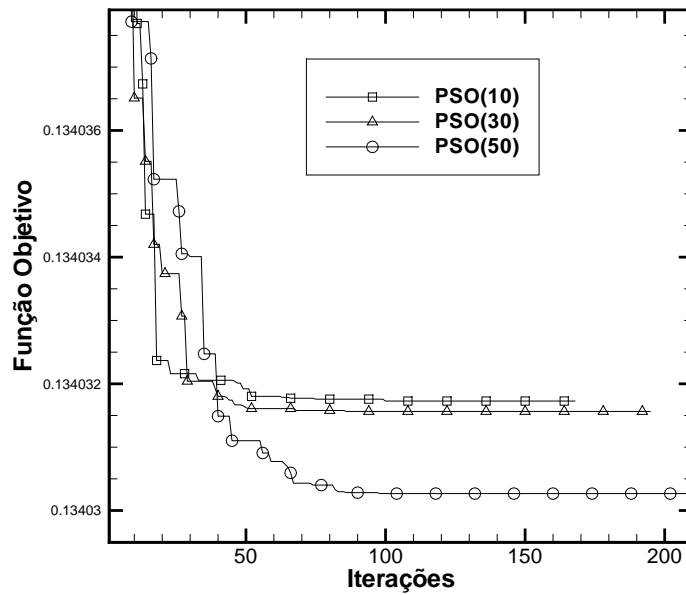


FIG. 6.2: Detalhe da FIG. 6.1

TAB. 6.2: Desvios entre $S_{\text{analítico}}$ e $S_{\text{numérico}}$ com o ΔT ótimo

Número de Partículas	tempo(s)	Numérica	Analítica	Desvio Relativo (%)
PSO ₍₁₀₎	87340	0,107297	0,108114	0,755026
	436730	0,242574	0,241785	0,337337
	611420	0,290639	0,286052	1,603686
PSO ₍₃₀₎	87340	0,107297	0,108114	0,755080
	436730	0,242574	0,241785	0,337328
	611420	0,290639	0,286052	1,603664
PSO ₍₅₀₎	87340	0,107298	0,108114	0,754284
	436730	0,242577	0,241785	0,338563
	611420	0,290634	0,286052	1,601887

As curvas mostradas nas FIGs. 6.3 e 6.4 referem-se ao método PSO₍₁₀₎. Na FIG. 6.3 podemos observar a evolução da posição da frente de solidificação ao longo do tempo até 70% do tempo total de solidificação.

A FIG. 6.4 exhibe o perfil de temperatura para alguns instantes de tempo em comparação com as curvas de temperatura analíticas para os mesmos instantes de tempo. Podemos observar que para, o campo de temperatura, os resultados para a zona de *mushy* apresentam um desvio pois a solução analítica utilizada para a comparação não possui esta zona.

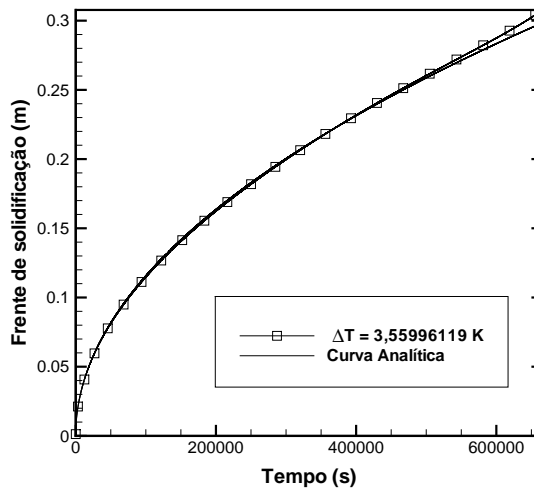


FIG. 6.3: Evolução da frente de solidificação obtida com o ΔT ótimo

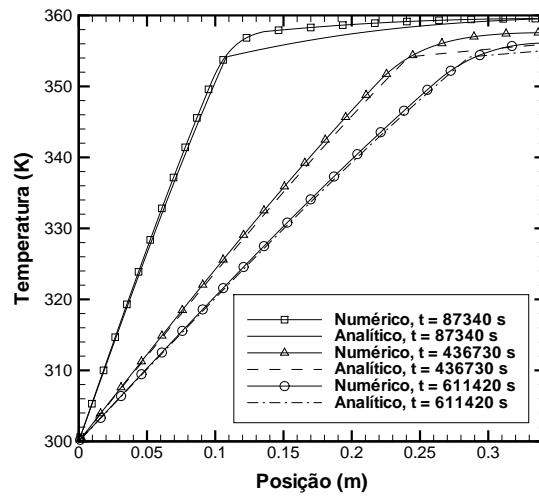


FIG. 6.4: Perfil de temperatura obtida com o ΔT ótimo

7 EFEITO DA POROSIDADE SOBRE O PROCESSO DE SOLIDIFICAÇÃO

Neste capítulo apresentaremos a adaptação sugerida para o modelo proposto a fim de avaliarmos os efeitos da porosidade formada no sólido durante o processo de solidificação.

ZHANG et al. (2009) exemplificam que a solidificação com formação de poros no interior do material fundido é encontrada durante a fabricação de espumas de alumínio com porosidade fechada, o que influencia a qualidade da estrutura celular e, portanto, as propriedades mecânicas, térmicas, acústicas dos produtos finais do material. Os autores ainda afirmam que o tratamento dos poros durante a solidificação é um desafio, pois os poros podem se mover, crescer e podem até mesmo desaparecer, devido à instabilidade do produto solidificado.

Em seu trabalho, ZHANG et al. (2009) destacam que, em espumas de alumínio, a porosidade é relativamente baixa ($\varepsilon < 0,7$). Nestes casos, os poros são da forma esférica. Quando essa porosidade é aumentada para além de 0,8, os poros tendem a se tornar poligonais. Neste trabalho os poros serão considerados esféricos quando a porosidade for menor ou igual a 0,7. Quando não há porosidade, isto é, $\varepsilon = 0,0$, o material é considerado denso.

É importante destacar que a solução analítica de ZHANG et al. (2009) se aplica a um domínio semi-infinito, enquanto a solução numérica proposta se dedica a um domínio finito.

7.1 PROPRIEDADES EFETIVAS DE POROSIDADE

A condutividade térmica é um parâmetro fundamental para qualquer problema de condução de calor. A literatura atual apresenta vários modelos analíticos para o cálculo da condutividade térmica efetiva para um meio poroso em regime permanente (ZHANG et al., 2009; BAUER, 1993; WANG et al., 2006; YANG et al., 2013).

De acordo com BAUER (1993), a relação entre a condutividade térmica efetiva k_{ef} de um meio poroso e suas composições pode ser expressa como:

$$\frac{k_{ef} - k_d}{k_{sol} - k_d} \left(\frac{k_{sol}}{k_{ef}} \right)^{1-(2/3\beta)} = 1 - \varepsilon \quad (7.1)$$

onde k_{sol} e k_d são as condutividades térmicas para a fase sólida e para a fase discreta (poros), ε é a porosidade e β é o fator de forma. O fator de forma β é igual a 1 para a poro esférico.

A EQ. (7.1) indica a dependência da condutividade térmica efetiva tanto no fator de forma dos poros quanto na porosidade. Considerando que, para a condução de calor no meio poroso, $k_{sol} \gg k_d$, desta forma, a EQ. (7.1) é reduzida para,

$$k_{ef} = k_{sol} (1 - \varepsilon)^{\frac{3\beta}{2}} \quad (7.2)$$

De acordo com a GIBSON & ASHBY (1997), o calor específico, calor latente e a temperatura de fusão de um material poroso são equivalentes as de um material sem poros, enquanto a sua massa específica ρ_{ef} efetiva pode ser escrita como:

$$\rho_{ef} = \rho_{sol} (1 - \varepsilon) \quad (7.3)$$

onde ρ_{sol} é a massa específica para o material denso.

7.2 DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

7.2.1 SOLIDIFICAÇÃO PARA POROS ESFÉRICOS

Em primeiro lugar considera-se um material sem poros ($\varepsilon = 0$), inicialmente em estado líquido a uma temperatura T_m . Em $t = 0$, a temperatura da parede em $x = 0$ cai instantaneamente para uma temperatura constante $T_w < T_m$. Como resultado, inicia a solidificação a partir de uma região na vizinhança do contorno $x = 0$.

No processo de solidificação em tela o número de Stefan é definido por

$$\text{Ste} = \frac{[C_{psol}(T_m - T_w)]}{\Delta H} \quad (7.4)$$

Neste número adimensional, C_{psol} , T_m e ΔH são propriedades termofísicas do material e apenas T_w pode ser controlável, por ser a temperatura da parede do molde.

A FIG. 7.1 mostra a evolução da frente de solidificação para um número de Stefan igual a 0,06. Este valor para o número de Stefan foi escolhido de forma a facilitar a comparação com os resultados de ZHANG et al. (2009). Outra adaptação para esta verificação se dará na adimensionalização das variáveis t (tempo) e $S(t)$ (posição da frente de solidificação).

As variáveis adimensionais adotadas são:

$$\tau = \frac{\alpha_{sol} t}{L^2} \quad (7.5)$$

$$\xi = \frac{S(t)}{L} = 2\lambda\sqrt{\tau} \quad (7.6)$$

A tendência não linear apresentada na FIG.7.1 é atribuída ao fato de que a frente de solidificação se move mais lentamente a medida que se afasta do contorno, $x = 0$. Isto se deve ao aumento do material solidificado que aumenta a resistência térmica do meio, dificultando a perda de calor, ou seja, o fluxo de calor em $x = 0$ cai ao longo do tempo, reduzindo a velocidade da frente de solidificação.

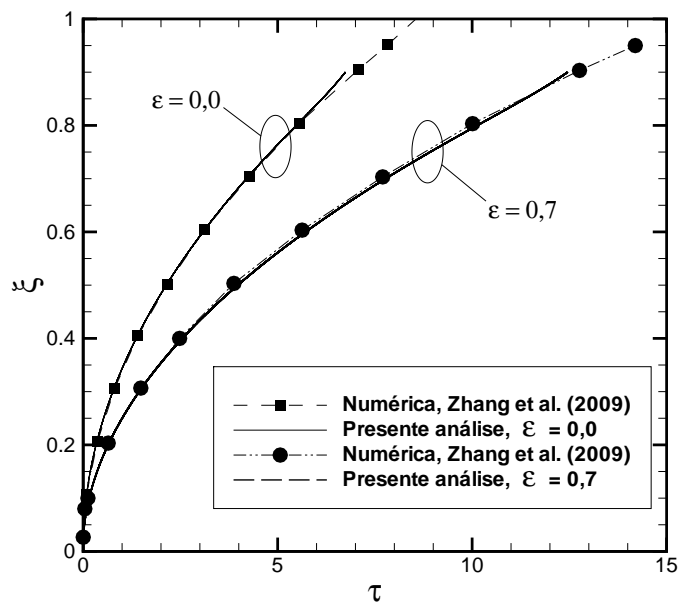


FIG. 7.1: Evolução da frente de solidificação adimensional ($\beta = 1$, $Ste = 0,06$)

Para verificar os efeitos da inclusão de poros esféricos no material solidificado sobre o comportamento da solidificação, foi considerada uma porosidade de $\varepsilon = 0,7$. Os resultados das simulações numéricas e os resultados de ZHANG et al. (2009) são apresentados na FIG. 7.1. Seguindo a mesma tendência que o material sem porosidade $\varepsilon = 0,0$ o comportamento não linear da frente de solidificação se faz presente quando $\varepsilon = 0,7$. Embora a inserção de poros

retarde significativamente o processo de solidificação, este retardamento pode ser explicado pela redução da condutividade térmica e difusividade efetiva devido à inclusão dos poros. Segundo ZHANG et al. (2009), com a presença de poros, a baixa condutividade térmica do meio gasoso que preenche os poros atua para reduzir a condutividade térmica efetiva do material solidificado. Por exemplo, a condutividade térmica efetiva cai 83.6% do quando $\varepsilon = 0,7$. Os resultados da FIG. 7.1 demonstram que há uma boa coerência entre os valores da referência com o obtido pela solução numérica, dentro de um desvio de aproximadamente 1%. A diferença demonstrada para os instantes finais de solidificação pode ser explicada pelo fato de estarmos limitando a nossa análise a 70% do tempo total para a solidificação, onde os efeitos do domínio finito são perceptíveis.

Considerando alguns valores para a porosidade, podemos observar na FIG.7.2 que o atraso da solidificação é gradual para um intervalo com baixa porosidade, isto é, $\varepsilon < 0,7$, enquanto que para valores maiores que 0,7 esse processo torna-se mais acentuado.

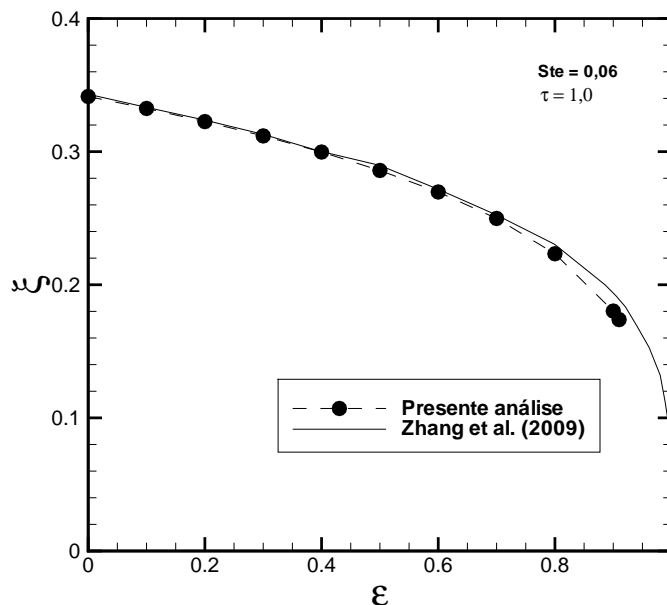


FIG. 7.2: Frente de solidificação em função porosidade ($Ste = 0,06, \tau = 1$)

Após um determinado valor para a porosidade ($\varepsilon = 0,7$), podemos notar um desvio maior entre a solução obtida através do modelo proposto em relação ao de referência. Como utilizaremos um valor fixo para a porosidade, $\varepsilon = 0,7$, quando abordarmos a questão do TNT, podemos dizer que o modelo apresenta resultados consistentes com relação à solução de referência.

Observe que há uma discrepância entre os resultados da solução numérica com as de ZHANG et al. (2009), pois os resultados em estudo tratam de uma solução numérica finita e de uma solução analítica semi-infinita. Note também que a solução numérica falha a medida que ε tende a 1, situação na qual não existe sólido, ou seja há apenas vazio. Desta forma, os erros numéricos são crescentes quando a porosidade se aproxima de 1, conforme reportado na FIG. 7.2

7.2.2 ESTUDO DA POROSIDADE PARA O TNT

A formação de poros no interior de explosivos tem um efeito significativo sobre a sensibilidade das ondas de choque. Estes defeitos são denominados “pontos quentes”, por causa da reação química formada quando uma onda de choque os percorre e interage fortemente com eles. Tamanhos diferentes de poros podem impactar em tempo de detonação diferentes, decorrentes dos efeitos de pressão no interior destes (ZHANG et al., 2013).

Nesta seção apresentaremos os resultados e discussões para as soluções encontradas para os dados do TNT, sendo o número de Stefan igual a 0,58. Serão avaliadas as soluções considerando $\varepsilon = 0$ e $\varepsilon = 0,7$, já utilizados anteriormente na verificação da solução, com porosidade esférica.

A FIG. 7.3 apresenta a evolução da frente de solidificação com os dados do TNT. Observe, através das FIGs. 7.1 e 7.3, que para materiais porosos, a solidificação completa, leva 2 vezes (para $\varepsilon = 0,7$) mais tempo do que o necessário para os materiais sem porosidade.

Uma diminuição no número de Stefan leva há uma maior transferência de calor na zona de mudança de fase, aumentando significativamente o tempo de solidificação, como podemos observar através das FIGs. 7.1 e 7.3.

Na FIG. 7.4, o efeito da porosidade no TNT solidificado sobre a posição da frente de solidificação em um tempo adimensional $\tau = 0,5$ é apresentado. Neste gráfico, uma variação mais abrupta na posição da frente de solidificação em função da porosidade ocorre para $\varepsilon > 0,8$. Este resultado é consistente com o reportado na FIG. 7.2.

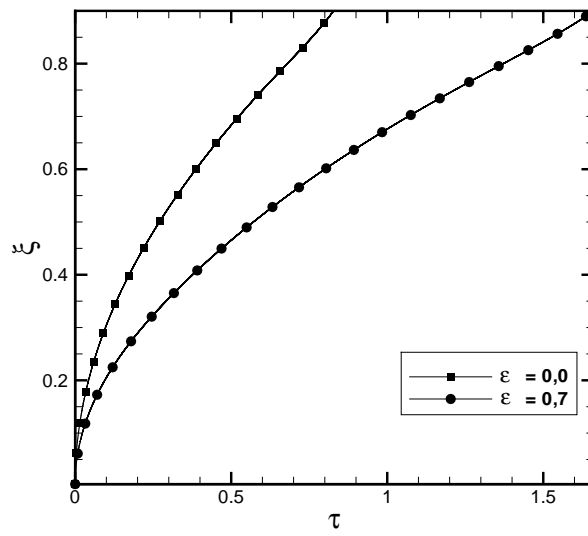


FIG. 7.3: Evolução da frente de solidificação adimensional no TNT ($Ste = 0,58, \beta = 1$)

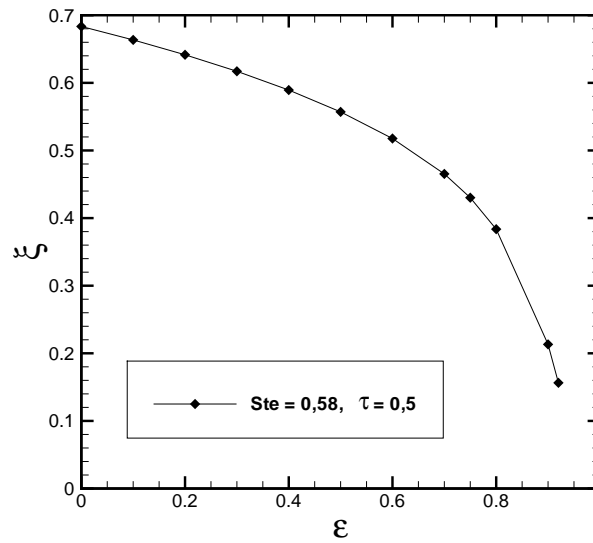


FIG. 7.4: Análise da frente de solidificação pelo valor de porosidade numérica ($Ste = 0,58, \tau = 0,5$)

8 ESTIMATIVA DA POROSIDADE

Neste capítulo iremos apresentar os resultados para o problema inverso de estimativa da porosidade. O método empregado para a estimativa deste parâmetro será o Enxame de partículas, descrito no Capítulo 6.

A frente de solidificação nem sempre é de fácil acesso em um experimento, sendo assim, uma grandeza importante a ser estudada é a análise pelo fluxo de calor, que é regido pela lei de Fourier. A EQ.(8.1) apresenta a aproximação para o fluxo de calor na parede.

$$q'' = k_{ef} \frac{T_m - T_w}{S(t)} \quad (8.1)$$

De forma a eliminar a singularidade em $x = 0$ consideremos o inverso do fluxo de calor, ou seja, $1/q''$. Note que na verdade, o que estamos fazendo é um algebrismo, onde:

$$\frac{1}{q''} = \frac{S(t)}{k_{ef} (T_m - T_w)} \quad (8.2)$$

$$\frac{1}{q''} = \frac{L\xi}{k_{ef} (T_m - T_w)} \quad (8.3)$$

$$\xi = k_{ef} \frac{T_m - T_w}{q''L} \quad (8.4)$$

Em síntese, a EQ.(8.4) revela que a posição adimensional da frente de solidificação é proporcional ao inverso do fluxo de calor adimensional no sólido.

Com a inserção do termo de porosidade notou-se a necessidade de selecionar novos valores para a constante λ . Assim, com base no método da integral, descrito em ÖZİŞİK (1993), a constante será obtida pela EQ. (8.5).

$$\frac{e^{-\lambda^2}}{\operatorname{erf}(\lambda)} + \frac{k_{liq}}{k_{ef}} \sqrt{\frac{\alpha_{ef}}{\alpha_{liq}}} \frac{T_m - T_i}{T_m - T_w} \frac{1}{Z_\eta} = \frac{\lambda \Delta H \sqrt{\pi}}{c_{psol}(T_m - T_w)} \quad (8.5)$$

onde,

$$Z_\eta = \frac{\eta + 1}{\eta \sqrt{\pi}} \left[-\gamma + \sqrt{\gamma^2 + \frac{2\eta}{\eta + 1}} \right]; \quad (8.6)$$

$$\gamma = \lambda \sqrt{\frac{\alpha_{ef}}{\alpha_{liq}}} \quad (8.7)$$

onde $\eta \geq 2$.

Dados pseudo-experimentais são gerados a partir da solução analítica apresentada na EQ. (6.3). Estes dados são fundamentais para a definição da função objetivo no problema inverso de estimativa da porosidade.

Desta forma, seguindo as EQs. (8.2) a (8.4), o problema inverso de estimativa da porosidade é análogo ao problema de otimização do parâmetro ΔT descrito no Capítulo 6, sendo inclusive empregadas as EQs. (6.3) e (6.4), respectivamente, para a solução analítica da posição da frente de solidificação e para a função objetivo. Além disso, o critério de parada é o mesmo utilizado no Capítulo 6.

Valores aleatórios entre 0 e 1 são gerados para a porosidade, correspondendo ao estado inicial de cada partícula. Além disso, com base no Capítulo 6 foi adotada uma população com 10 partículas.

As TABs. 8.1 e 8.2 apresentam os valores ótimos obtidos para a porosidade. Observe que o PSO₍₁₀₎ obteve uma solução satisfatória. A função objetivo foi obtida de forma que os valores encontrados como solução ótima apresentassem um desvio absoluto de $10^{(-2)}$ em relação aos valores exatos. Na FIG. 8.1 podemos visualizar a evolução da função objetivo através das iterações.

TAB. 8.1: Solução ótima para porosidade $\varepsilon = 0$

Número de Partículas	tempo CPU(s)	Porosidade (ε)	Função Objetivo	Iterações
PSO ₍₁₀₎	6386,974	0,00000076	2,59619770	54

TAB. 8.2: Solução ótima para porosidade $\varepsilon = 0,7$

Número de Partículas	tempo CPU(s)	Porosidade (ε)	Função Objetivo	Iterações
PSO ₍₁₀₎	30533,21	0,71169390	7,58834662	137

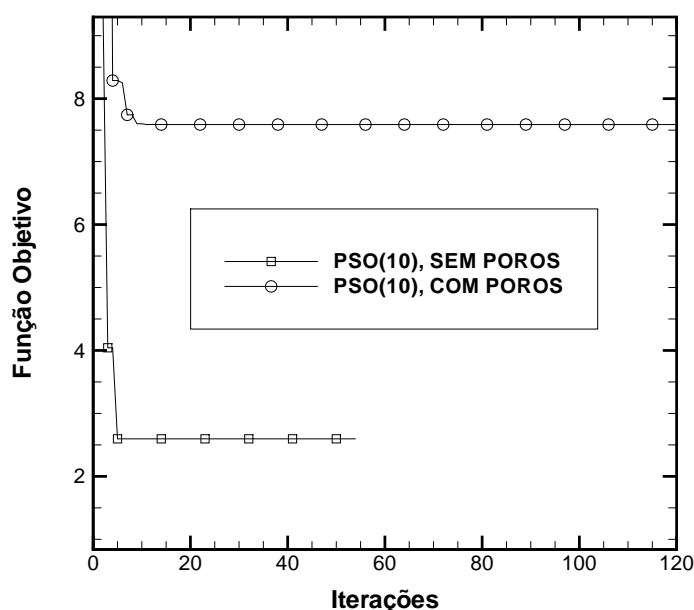


FIG. 8.1: Efeito da porosidade sobre a função objetivo das soluções ótimas

Observe que com a inserção da porosidade a solução numérica apresenta um desvio superior a 1% com relação à solução analítica, motivo pelo qual o PSO não conseguiu obter um valor ótimo com desvio menor que 1%.

As TABs. 8.3 e 8.4 apresentam os resultados numéricos para a posição da frente de solidificação obtidos com os valores estimados da porosidade. Estes resultados são confrontados com a solução analítica de referência avaliadas com o valor exato da porosidade. Os desvios relativos revelam que os mesmos não são regulares ao longo do tempo. Ademais, desvios da ordem de $10^{(-2)}$ no parâmetro de porosidade podem ocasionar desvios relativos maiores que 4% na avaliação da posição da frente de solidificação.

TAB. 8.3: Posição da frente de solidificação - solução numérica estimada e solução analítica (sem porosidade)

Número de Partículas	tempo	Numérica	Analítica	Desvio Relativo (%)
PSO ₍₁₀₎	0,11097449	0,32057127	0,31980375	0,23999719
	0,55491059	0,72065899	0,71512749	0,77349844
	0,77687524	0,86210923	0,84614887	1,88623546

TAB. 8.4: Posição da frente de solidificação - solução numérica estimada e solução analítica (com porosidade)

Número de Partículas	tempo	Numérica	Analítica	Desvio Relativo (%)
PSO ₍₁₀₎	0,12345293	0,30152860	0,3162227	4,64677194
	0,61727857	0,70915353	0,7071035	0,28991937
	0,86419139	0,85224399	0,8366568	1,86302542

As curvas apresentadas nas FIGs. 8.2 e 8.3 referem-se ao método PSO₍₁₀₎ para a solução ótima. Esses gráficos representam a evolução da curva de solidificação ao longo do tempo estipulado para 70% do tempo total de solidificação, com e sem porosidade.

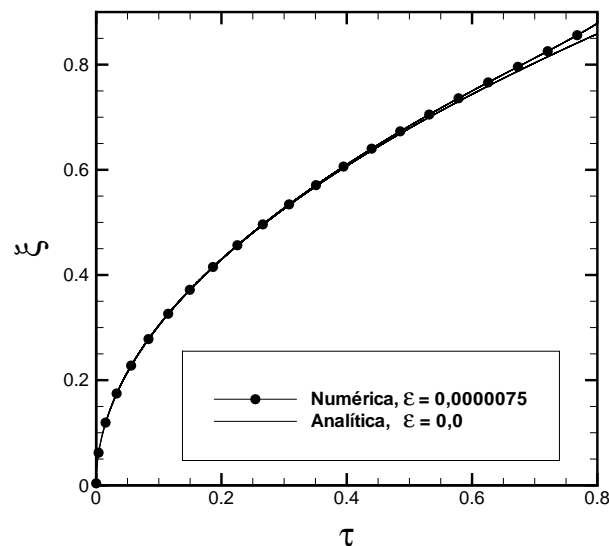


FIG. 8.2: Evolução da frente de solidificação obtida com ε ótimo (sem porosidade)

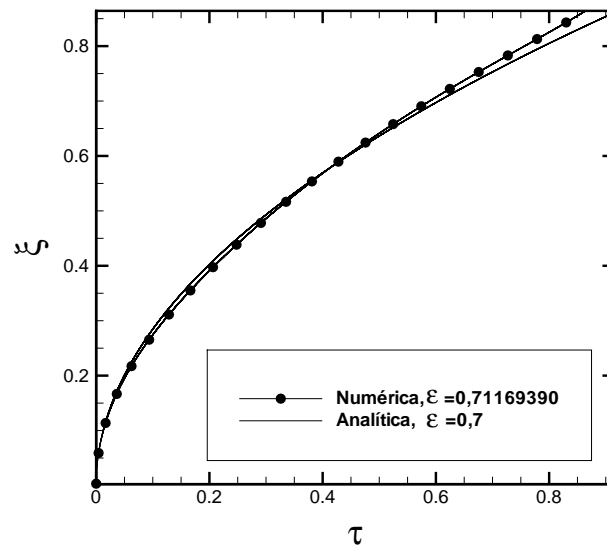


FIG. 8.3: Evolução da frente de solidificação obtida com ε ótimo (com porosidade)

9 CONCLUSÃO

O presente trabalho tem como objetivo contribuir na elaboração de um modelo que possibilite uma avaliação preliminar do processo de solidificação do TNT.

Os trabalhos apresentados na revisão bibliográfica demonstraram a existência de uma grande variedade de abordagens matemáticas aplicáveis ao tema proposto, dando embasamento teórico para a modelagem do processo de solidificação.

A metodologia empreendida baseou-se, a princípio, na validação do código computacional, referente à solução analítica do problema proposto. No que se refere a solução numérica, foi utilizado o Método dos Volumes Finitos, com formulação explícita, juntamente com uma dissertação a cerca do mesmo a fim de elucidar este procedimento numérico.

No processo de identificação do parâmetro ΔT , essencial para a prescrição do tamanho da zona de mudança de fase, optou-se pelo uso de um método heurístico (Enxame de Partículas - PSO). Foram realizadas simulações sobre o número de partículas necessárias para uma melhor otimização do parâmetro.

De posse dos resultados para a estimativa do parâmetro ΔT , verificou-se que com uma quantidade baixa de partículas, 10 partículas - PSO₍₁₀₎, os resultados obtidos foram satisfatórios. O desvio médio obtido na análise da frente de solidificação para o valor ΔT obtido pelo PSO₍₁₀₎ apresentou um valor inferior a 1%.

A estimativa do ΔT permitiu que o mesmo fosse prescrito de maneira a avaliar satisfatoriamente o processo de mudança de fase. Assim, este parâmetro poderá ser utilizado para a determinação do tamanho da zona de *mushy* em trabalhos futuros voltados para geometrias mais complexas.

Funções que modificam as propriedades termofísicas foram introduzidas no modelo original a fim de avaliar o efeito da porosidade no processo de solidificação. O modelo resultante foi verificado utilizando soluções de referência, com e sem poros, onde mostrou uma boa aproximação, dentro de um desvio tolerável. Os resultados mostram que a porosidade desempenha um papel importante na solidificação. Para um número de Stefan constante, um aumento na porosidade faz com que o tempo de solidificação aumente. Conseqüentemente, a porosidade diminui a velocidade de propagação da frente de solidificação.

Em posse dos resultados foi analisado o efeito da porosidade no TNT, sendo o fluxo de

calor relacionado a posição da frente de solidificação. Esse procedimento foi necessário para uma posterior estimativa do valor de porosidade do TNT via Problema Inverso.

Em uma situação real, o acompanhamento da frente de solidificação é algo difícil de se realizar, desta forma medidas indiretas do fluxo de calor podem ser realizadas, sendo este, inversamente proporcional a frente de solidificação, que corresponde a dimensão do material solidificado. Assim, o fluxo de calor pode ser medido na base do corpo de prova a fim de monitorar a formação de poros no TNT solidificado.

Com os resultados para a estimativa da porosidade constatou-se que para o problema sem porosidade o PSO conseguiu obter um valor ótimo da ordem de $10^{(-6)}$. Os resultados obtidos conseguiram representar bem os instantes iniciais de solidificação. Para o problema com porosidade o enxame de partículas conseguiu obter um valor ótimo com uma precisão de $10^{(-2)}$, quando avaliado em comparação com a solução analítica com o valor exato da porosidade. Os desvios relativos encontrados para o problema com porosidade sugerem que um desvio relativo da ordem de $10^{(-2)}$, no parâmetro porosidade, podem ocasionar desvios relativos maiores que 4% na avaliação da frente de solidificação. Ademais, tais desvios não são regulares ao longo do tempo.

Como sugestão para a continuação deste trabalho, dentre outras possibilidades, sugere-se:

1. Aplicar o modelo desenvolvido à geometrias axissimétricas bidimensionais, visando investigar diferentes condições de contorno, assim, aperfeiçoando o modelo de tal maneira que possibilite a investigação dos efeitos da solidificação em uma geometria mais próxima do corpo em estudo.
2. Estender o problema estudado para o caso com propriedades termofísicas variáveis com a temperatura em cada fase.
3. Analisar o desempenho de outros métodos de otimização como o método do gradiente conjugado e o método de Levenberg-Marquardt, visando a redução do custo computacional.
4. Aplicação do Problema Inverso para identificar a localização dos vazios no material solidificado.
5. Utilizar GITT para resolver o problema de mudança de fase com o método da capacidade aparente. Desta forma uma solução de referência para um meio finito seria obtida.

10 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANNAPRAGADA, S. R., SUN, D. e GARIMELLA, S. **Analysis and Suppression of Base Separation in the Casting of a Cylindrical Ingot.** Heat Transfer Engineering, 29(4):385–394, 2008.
- BAUER, T. **A general analytical approach toward the thermal conductivity of porous media.** Int. J. Heat and Mass Transf., 36(17):4181–4191, 1993.
- CARSLAW, H. e JAEGER, J. **Conduction of Heat in Solids.** Oxford University Press, Oxford, 1959.
- CHEN, C. e SHIUAN, J. **Numerical Simulation of Casting Explosives in Shell.** Propellants, Explosives, Pyrotech, 17:20–26, Fevereiro 1992.
- COLAÇO, M., ORLANDE, H. e DULIKRAVICH, G. **Inverse and Optimization Problems in Heat Transfer.** J. Braz. Soc. Mech. Sci. & Eng, 28, 2006.
- EBERHART, R. C. e KENNEDY, J. **A new optimizer using particles swarm theory.** Em Proceedings of Sixth International Symposium on Micro Machine and Human Science, págs. pp.39–43, Nagoya, Japan, 1995.
- EYRES, N. R., HARTREE, N. R., INGHAM, J., JACKSON, R., SARJANT, R. J. e WAGSTAFF, J. B. **The Calculation of Variable Heat Flow in Solids.** Phil. Trans. R. Soc. Lond. A, 240: 1–57, 1946.
- GIBSON, L. e ASHBY, M. **Cellular Solids: Structure and Properties.** Cambridge University Press, 1997.
- GRZYMKOWSKI, R. e SLOTA, D. **Numerical method for multi-phase inverse Stefan design problems.** Archives of Metallurgy and Materials, 51:161 – 172, 2006.
- HU, H. e ARGYROPOULOS, S. **Mathematical modelling of solidification and melting: A review.** Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 4(4):371–396, Julho 1996.
- IMBEL. **Ficha de Informações de Segurança de Produtos Químicos (FISPQ).** Technical Report FISPQ N° 03, IMBEL - Indústria de Material Bélico do Brasil, 2010.
- ISMAIL, K., ALVES, C. e MODESTO, M. **Numerical and experimental study on the solidification of PCM around a vertical axially finned isothermal cylinder.** Applied Thermal Engineering, 21:53–77, 2001.
- JI, C. e LIN, C. **The Solidification Process of Melt Casting Explosives in Shell.** Propellants, Explosives, Pyrotech, 23:137–141, Junho 1998.

- KENNEDY, J. e EBERHART, R. C. **Swarm Intelligence**. Morgan Kaufmann Publishers, EUA, 2001.
- LANDIM, C. **Otimização Estocástica**. Instituto de Matemática Pura e Aplicada, Rio de Janeiro, 1991.
- MALISKA, C. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. LTC, Rio de Janeiro, 2 edition, 2004.
- MILIOLI, C., MALISKA, C. e SILVA, A. **Convecção Natural Laminar em Cavidades Arbitrárias Simplesmente Conexas**. Em VIII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, págs. pp.85–88, São José dos Campos, Brasil, 1985.
- NEILSON, D. e INCROPERA, F. **Numerical simulation of solidification in a horizontal cylindrical annulus charged with an aqueous salt solution**. International Journal Heat Mass Transfer, 33:367–380, 1990.
- NEJAD, A., MAGHREBI, M., TABRIZI, H., HENG, Y., MHAMDI, A. e MARQUARDT, W. **Optimal operation of alloy material in solidification processes with inverse heat transfer**. International Communications in Heat and Mass Transfer, 37:711 – 716, 2010.
- ÖZİŞİK, M. N. **Heat conduction**. John Wiley & Sons, Nova York, 2 edition, 1993.
- POIRIER, D. e SALCUDEAN, M. **On numerical methods used in mathematical modeling of phase change in liquid metals**. Journal of Heat Transfer, 110:562–570, 1988.
- ROSE, M. **A method for calculating solutions of parabolic equations with a free boundary**. Mathematics of Computation, 14:249–256, 1960.
- SADOON, N., SI-AHMED, E., COLINET, P. e LEGRAND, J. **On The Goodman Heat-Balance Integral Method for Stefan like-problems**. Thermal Science, 13(2):81–96, 2009.
- SLODICKA, M. e DE SCHEPPER, H. **Determination of the heat-transfer coefficient during solidification of alloys**. Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 194:491 – 498, 2005.
- SLOTA, D. **Using genetic algorithms for the determination of an heat transfer coefficient in three-phase inverse Stefan problem**. International Communication of Heat and Mass Transfer, 35:149 – 156, 2008.
- SPARROW, E., PATANKAR, S. e RAMADHYANI, S. **An analysis of melting in the presence of natural convection in the melt region**. Journal of Heat Transfer, 99:520–526, 1977.
- SUN, D. e GARIMELLA, S. **Numerical and Experimental Investigation of Solidification Shrinkage**. Numerical Heat Transfer, Part A: Applications, 52:145–162, Junho 2007.
- SUN, D., GARIMELLA, S., SINGH, S. e NAIK, N. **Numerical and Experimental Investigation of the Melt Casting of Explosives**. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 30:369–380, Outubro 2005.

WANG, J., CARSON, J., NORTH, M. e CLELAND, D. **A new approach to modelling the effective thermal conductivity of heterogeneous materials.** Int. J. Heat and Mass Transf., 49(17-18):3075–3083, 2006.

YANG, X., LU, T. e KIMC, T. **Influence of non-conducting pore inclusions on phase change behavior of porous media with constant heat flux boundary.** International Journal of Thermal Sciences, 64:137–144, 2013.

ZHANG, B., KIM, T. e LU, T. **Analytical solution for solidification of close-celled metal foams.** Int. J. Heat and Mass Transf., 52:133–141, 2009.

ZHANG, Q., HU, S. e LIANG, H. **Effect of Pore in Composition-B Explosive on Sensitivity under Impact of Drop Weight.** Defence Science Journal, 63(1):108–113, January 2013.

11 APÊNDICES

11.1 APÊNDICE 1: ALGORITMO DO MÉTODO DO ENXAME DE PARTÍCULAS

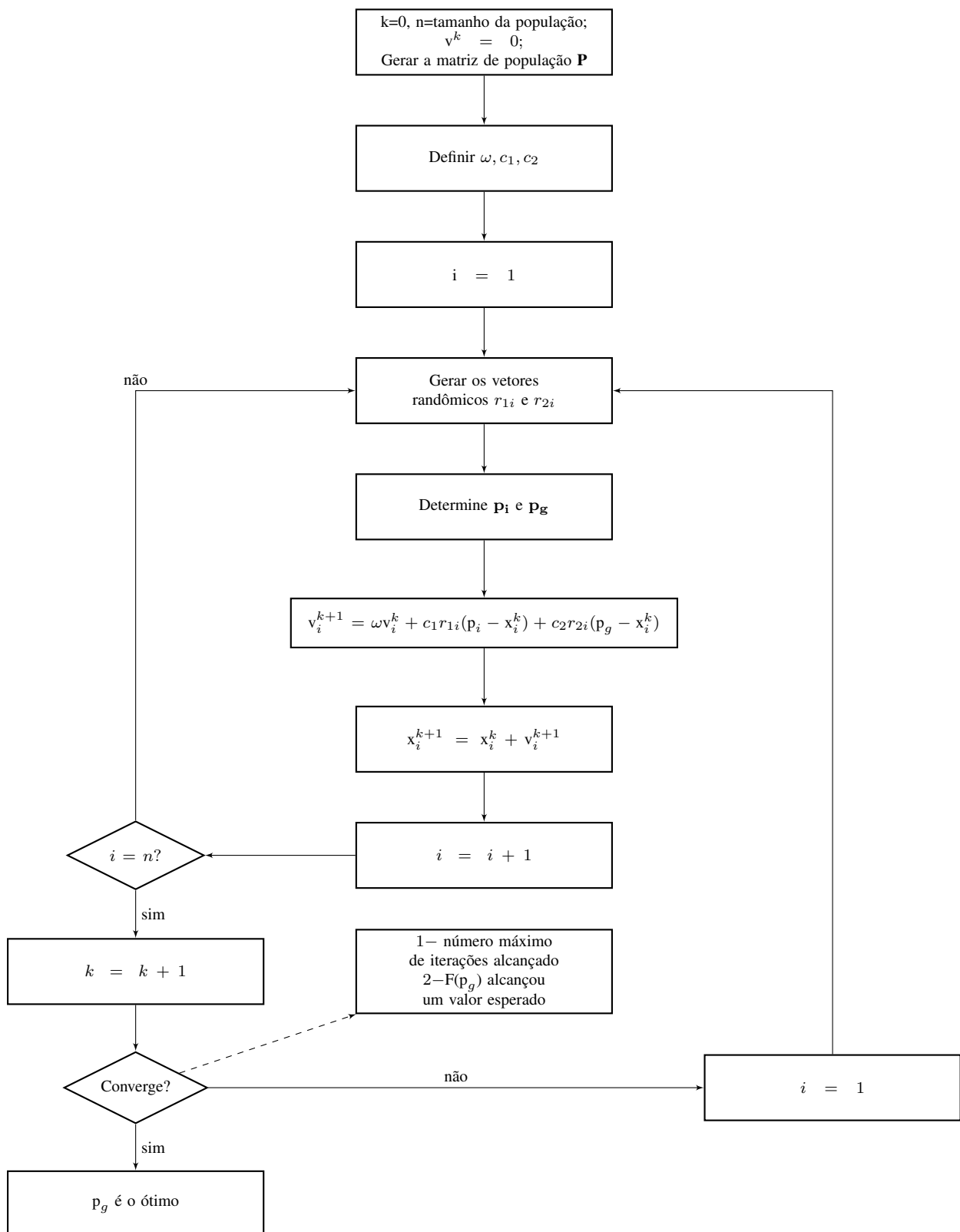


FIG. 11.1: Algoritmo PSO, (COLAÇO et al., 2006).