

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

RAFAELA PEDROSO CATUREBA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE
SOLIDIFICAÇÃO DO TNT UTILIZANDO O MÉTODO DA
ENTALPIA**

Rio de Janeiro

2018

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

RAFAELA PEDROSO CATUREBA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE
SOLIDIFICAÇÃO DO TNT UTILIZANDO O MÉTODO DA
ENTALPIA**

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

Orientadores:

Prof. Aldélio Bueno Caldeira – D.C.

Prof. Rodrigo Otávio de Castro Guedes – Ph. D.

Rio de Janeiro

2018

C2018

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.

16108

Catureba, Rafaela Pedroso

Simulação numérica do processo de solidificação do TNT utilizando o Método da Entalpia / Rafaela Pedroso Catureba; orientado por Aldélio Bueno Caldeira e Rodrigo Otávio de Castro Guedes– Rio de Janeiro: Instituto Militar de Engenharia, 2018.

79p. : il.

Dissertação de Mestrado – Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 2018.

1. Curso de Engenharia Mecânica – teses, dissertações. I. Caldeira, Aldélio Bueno & Guedes, Rodrigo Otávio de Castro II. Título. III. Instituto Militar de Engenharia.

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

RAFAELA PEDROSO CATUREBA

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE
SOLIDIFICAÇÃO DO TNT UTILIZANDO O MÉTODO
DE ENTALPIA**

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

Orientadores: Prof. Aldélio Bueno Caldeira - D.C.

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

Aprovada em 17 de dezembro de 2018 pela seguinte Banca examinadora:

Prof. Rodrigo Otávio de Castro Guedes – Ph. D. do IME – Presidente

Prof. Aldélio Bueno Caldeira – D. C. do IME

Prof. Albino José Kalab Leiroz – Ph. D. da UFRJ

Rio de Janeiro

2018

Dedico esse trabalho aos meus pais, pelo amor,
incentivo e apoio em todas as minhas escolhas.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, pois sem ele não estaria aqui.

Aos meus orientadores Aldélio Bueno Caldeira e Rodrigo Otávio de Castro Guedes, pela paciência, disponibilidade, contribuições acadêmicas, ensinamentos, apoio e orientações durante todo o desenvolvimento desse trabalho.

Aos meus pais, Cida e Jorge, pelo apoio incondicional e por estarem sempre presentes e dispostos a escutar minhas angústias, por serem meu maior incentivo para seguir em frente e nunca medirem esforços para que eu pudesse alcançar meus objetivos.

Ao meu irmão Igor, pelo carinho, confiança e sábias palavras, quando eu mais precisei.

Às minhas amigas, Bruna e Jennifer, que, apesar da distância, sempre estiveram ao meu lado, aconselhando-me e acreditando sempre em mim.

Aos meus colegas do IME, pelo companheirismo mútuo ao longo desses dois anos.

A EMGEPRON, por deixar-me visitar suas instalações, permitindo-me conhecer melhor o processo industrial abordado nessa dissertação, e pelas pessoas disponíveis a esclarecer-me eventuais dúvidas.

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

Agradeço a todos que contribuíram direta ou indiretamente para o desenvolvimento e conclusão desta dissertação, tenha sido por meio de críticas, ideias, apoio, incentivo ou qualquer outra forma de auxílio.

“Não sabendo que era impossível, foi lá e fez.”

Jean Cocteau

SUMÁRIO

LISTA DE ILUSTRAÇÕES	9	
LISTA DE TABELAS	11	
LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS	12	
1	INTRODUÇÃO	18
1.1	Objetivo e Escopo do Trabalho	20
1.2	Organização do Trabalho	21
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	22
2.1	Problemas de Solidificação	22
2.1.1	Solução dos Problemas de Solidificação	23
2.2	Solidificação de Explosivos	26
2.3	Problema Conjugado	28
2.4	Problema Inverso	29
3	DESCRIÇÃO DO PROBLEMA FÍSICO-MATEMÁTICO	31
3.1	Granada Alto Explosiva	31
3.2	Problema Físico e Modelagem Matemática	32
3.3	Formulação do Problema Conjugado	35
4	MÉTODO NUMÉRICO	38
4.1	Método dos Volumes Finitos	38
4.2	Condições de Contorno	41
4.3	Aspectos Numéricos do Problema Conjugado	43

5	RESULTADOS.....	45
5.1	Verificação do Modelo.....	45
5.2	Simulação da Solidificação do TNT	47
5.3	Resultados do Problema Conjugado	53
5.4	Simulações de Calibres Padrão do Exército Brasileiro.....	64
6	TÉCNICA LEVENBERG-MARQUARDT	67
6.1	Aspectos Teóricos	67
6.2	Matriz de Sensibilidade	68
6.3	Formulação Matemática da Técnica Levenberg-Marquardt	70
6.4	Resultados do Problema Inverso	71
7	CONCLUSÃO	73
8	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	75

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIG. 3.1	Granada de morteiro 120mm AE CONV, produzida pela IMBEL.....	31
FIG. 3.2	Modelo geométrico representativo com as condições de contorno nas superfícies inferior, superior e lateral, e no eixo de simetria.....	33
FIG. 3.3	Representação esquemática do problema conjugado.....	35
FIG. 4.1	Malha para o problema de volumes finitos.....	39
FIG. 4.2	Discretização do volume de fronteira.....	41
FIG. 4.3	Discretização da malha do problema conjugado e localização da interface explosivo-molde.....	44
FIG. 5.1	Análise da malha para solidificação. (a) 20x20; (b) 40x40; (c) 60x60.....	47
FIG. 5.2	Evolução da frente de solidificação do TNT para os casos unidimensional e bidimensional.....	49
FIG. 5.3	Evolução da frente de solidificação do TNT na direção axial, em $r = 0$	50
FIG. 5.4	Evolução da frente de solidificação do TNT na direção radial, em $y = L$	51
FIG. 5.5	Evolução da frente de solidificação bidimensional do TNT para diferentes instantes de tempo.....	51
FIG. 5.6	Evolução da temperatura em quatro pontos internos do explosivo.....	52
FIG. 5.7	Efeito do raio interno do molde sobre evolução da frente de solidificação do TNT na direção axial, em $r = 0$	53
FIG. 5.8	Evolução da frente de solidificação do TNT no problema conjugado na direção axial, em $r = 0$	54
FIG. 5.9	Distribuição de temperatura em (a) $t = 3600s$; (b) $t = 10800s$; (c) $t = 21600s$, quando (1) não é considerada a espessura do molde e (2) para $e = 0,01m$	55

FIG. 5.10	Distribuição de temperatura para molde com espessura $e = 0,01\text{m}$, quando: (a) $t = 60\text{s}$; (b) $t = 120\text{s}$; (c) $t = 240\text{s}$	56
FIG. 5.11	Perfil de temperatura ao longo da espessura da parede de material condutivo, com $e = 0,01\text{m}$	57
FIG. 5.12	Influência do raio interno do molde na evolução da frente de solidificação na direção axial, em $r = 0$	57
FIG. 5.13	Influência do raio interno do molde na evolução da frente de solidificação na direção radial, em $y = L$	58
FIG. 5.14	Adimensionalização da influência do raio interno do molde na evolução da frente de solidificação do TNT na direção radial, em $y = L$	58
FIG. 5.15	Influência da convecção natural e forçada na evolução da frente de solidificação do TNT na direção axial, em $r = 0$	59
FIG. 5.16	Distribuição de temperatura em (a) $t = 10800\text{s}$; (b) $t = 21600\text{s}$; (c) $t = 32400\text{s}$, para (1) convecção forçada e (2) convecção natural.....	60
FIG. 5.17	Evolução da frente de solidificação do TNT na direção axial, em $r = 0$, com parede de Teflon.....	61
FIG. 5.18	Distribuição de temperatura em (a) $t = 3600\text{s}$; (b) $t = 10800\text{s}$; (c) $t = 21600\text{s}$, para (1) molde de material metálico e (2) molde de Teflon.....	62
FIG. 5.19	Perfil de temperatura ao longo da espessura da parede de Teflon, com $e = 0,01\text{m}$	63
FIG. 5.20	Evolução da frente de solidificação na direção axial para as munições calibre 60, 81 e 120mm, em $r = 0$	65
FIG. 5.21	Evolução da frente de solidificação na direção axial para as calibre 60, 81 e 120mm, em $y = L$	66

FIG. 5.22 Evolução da frente de solidificação na direção axial para as calibre 60, 81 e 120mm, em $y = L$, na forma adimensional.....66

FIG. 6.1 Localização dos sensores de temperatura para aplicação do problema inverso.....71

LISTA DE TABELAS

TAB. 3.1	Características adotadas para uma granada hipotética calibre 240mm.	32
TAB. 3.2	Propriedades termofísicas do TNT	33
TAB. 3.3	Paramêtros do modelo matemático.	34
TAB. 3.4	Propriedades termofísicas do molde	35
TAB. 3.5	Coefficientes de convecção adotados.	37
TAB. 4.1	Equações discretizadas para cálculo da entalpia.	42
TAB. 4.2	Malhas adotadas.	44
TAB. 5.1	Propriedades termofísicas do material e parâmetro do modelo para verificação do código implementado.	45
TAB. 5.2	Tempo total de solidificação para diferentes espessuras do molde.	54
TAB. 5.3	Propriedades termofísicas do molde de Teflon.	61
TAB. 6.1	Coefficientes convectivos estimados pela técnica Levenberg-Marquardt	72

LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS

SÍMBOLOS

Bi	- Biot
c_p	- Calor específico (J/kg K)
C	- Capacidade térmica (J/K m ³)
C_{ap}	- Capacidade térmica aparente (J/K m ³)
C_{ef}	- Capacidade térmica efetiva (J/K m ³)
e	- Espessura da parede do molde (m)
H	- Entalpia por unidade de volume (J/m ³)
h_{conv}	- Coeficiente convectivo (W/m ² K)
k	- Condutividade térmica (W/m K)
L	- Altura (m)
R	- Raio (m)
r	- Abscissa do sistema de coordenadas
S	- Função objetivo
T	- Temperatura (K)
T_i	- Temperatura inicial (K)
T_{wall}	- Temperatura prescrita (K)
t	- Tempo (s)

V	-	Volume de controle
$x(t)$	-	Posição da interface sólido-líquido
z	-	Ordenada do sistema de coordenadas
Δh	-	Calor latente (kJ/kg)
δ	-	Distância entre as faces do volume de controle
ξ	-	Frente de solidificação adimensional na direção axial
ρ	-	Massa específica (kg/m ³)
τ	-	Tempo adimensional para a direção axial
ζ	-	Frente de solidificação adimensional na direção radial
η	-	Tempo adimensional para a direção radial
∇	-	Operador gradiente

SUBSCRITOS

∞	-	Meio externo
ef	-	Propriedade efetiva
exp	-	Dado experimental
l	-	Face leste do volume de controle
liq	-	Líquido
ls	-	Propriedade de mudança de fase sólido-líquido

<i>n</i>	-	Face norte do volume de controle
<i>num</i>	-	Dado numérico
<i>o</i>	-	Face oeste do volume de controle
<i>parede</i>	-	Referente a parede do molde
<i>s</i>	-	Face sul do volume de controle
<i>sol</i>	-	Sólido

ABREVIATURAS

CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior
IMBEL	Indústria de Material Bélico do Brasil
MVF	Método dos volumes finitos
TNT	Trinitrotolueno

RESUMO

Solidificação é a transformação da matéria do estado líquido para o estado sólido. Presente em diversos processos da natureza e industriais, destaca-se a solidificação para a fabricação de formas complexas sem a necessidade de aplicar grandes forças, sendo particularmente útil no processamento de materiais energéticos que não toleraram altas forças.

O processo de verter o explosivo líquido no interior de uma granada, seguido de sua posterior solidificação, recebe o nome de carregamento. Apesar de simples, as condições de resfriamento, durante e após o carregamento, podem afetar a qualidade da munição, acarretando defeitos. Os defeitos mais frequentes são a formação de vazios no interior da granada e o descolamento do explosivo das paredes internas da granada. Na fundição de materiais energéticos, esses defeitos implicam em alterações na velocidade de detonação, causando detonações prematuras e explosões acidentais. Neste sentido, as simulações computacionais do processo de transferência de calor durante o carregamento e o resfriamento de granadas alto explosivas são ferramentas relevantes para planejar o processo de fabricação e evitar defeitos de fabricação.

Esse trabalho objetiva avaliar a influência do diâmetro interno do molde, do material e espessura do molde e das condições de resfriamento no processo de solidificação, além de estimar o coeficiente de transferência de calor por convecção entre o molde e o meio externo. O problema bidimensional transiente de solidificação do TNT em moldes cilíndricos é resolvido usando o Método da Entalpia, o qual reescreve a equação governante em termos dessa variável. A equação parabólica transiente-difusiva é numericamente resolvida pela aplicação do Método dos volumes finitos, empregando um esquema explícito. Para solução do problema inverso de estimativa de parâmetro do coeficiente de transferência de calor por convecção foi utilizada a técnica determinística de Levenberg-Marquardt. Os resultados iniciais foram comparados com dados disponíveis na literatura, de modo a verificar o código computacional implementado.

ABSTRACT

Solidification is the transformation of matter from the liquid state to the solid state. It is present in many processes of nature and industrial, mainly in the casting process for manufacturing complex shapes without the necessity of applying large forces, being particularly useful in processing energetic materials.

The process of pouring the liquid explosive into the ammunition is called loading. Although it is a simple procedure, the cooling conditions applied in the casting process can affect the quality of the final product in terms of void formation, residual stress distributions, and mold separation. In the casting of energetic materials all these defects can significantly alter the detonation velocity, causing premature detonations and leading to catastrophic accidents in handling explosives. In this sense, computational simulations of the heat transfer process during loading and cooling of high explosive grenades are relevant tools to plan the manufacturing process and to avoid manufacturing defects.

The present study aims to evaluate the influence of the shell inner diameter, of the material and thickness of the mold and the cooling conditions in the solidification process, and also estimate the convective heat transfer coefficient between the mold and the external environment. The transient two-dimensional TNT solidification problem in cylindrical coordinates is solved by using the enthalpy method, which rewrites the governing equation in terms of this variable. The parabolic transient-diffusive equation is numerically solved by the Method of Finite Volumes, employing an explicit scheme. For the solution of the parameter estimation inverse problem of the convective heat transfer coefficient, the Levenberg-Marquardt deterministic technique is used. The initial results were compared with data available in the literature, in order to verify the implemented computational code.

1 INTRODUÇÃO

O estudo do fenômeno de solidificação desperta grande interesse da comunidade científica. Esta transformação de fase da matéria, passando do estado líquido para o estado sólido, está presente em diversos processos da natureza e industriais, como na formação de geleiras e nos processos de fabricação por fundição ou soldagem. Logo, cada vez mais se desenvolvem estudos para melhor compreender a evolução dos processos de solidificação.

Destaca-se a solidificação para a fabricação de formas complexas sem a necessidade de aplicar grandes forças, sendo particularmente útil no processamento de materiais energéticos que não podem ser submetidos a grandes forças. Contudo, as condições de resfriamento implicam diretamente na qualidade final do produto (Annapragada, Sun & Garimella, 2008).

São inúmeros os usos para os explosivos, tanto na indústria militar, quanto em setores industriais civis. Na indústria de defesa, o processo de solidificação de explosivos é utilizado na fabricação de munições alto explosivas. As duas principais técnicas para manufatura dessas munições são fundição e prensagem. O carregamento de explosivos fundidos em moldes é mais econômico e adequado para produção em grande escala (Jin & Li, 1998). O processo de verter o explosivo líquido no interior da munição recebe o nome de carregamento.

O trinitro-tolueno, comercialmente conhecido como TNT, é o explosivo de mais amplo emprego como carga principal, seja em alta pureza ou como parte de composições. Bombas com grandes calibres e ogivas, por exemplo, são geralmente preenchidas por TNT, utilizando o método de fundição (Kumar & Rao, 2014).

Apesar do carregamento de munições ser um procedimento relativamente simples, as condições de resfriamento aplicadas no processo de fundição podem afetar a qualidade do produto final em termos de formação de vazios, tensões residuais no explosivo e separação entre o explosivo e o molde. Decorrentes da contração do material devido a tensões térmicas ou ao aprisionamento de gases no interior do explosivo, a ocorrência de vazios implica em alterações na velocidade de detonação, causando detonações prematuras e explosões acidentais (Mudryy et al., 2014).

Quando os vazios no interior da fase sólida são decorrentes do aprisionamento de gás, estes podem ser removidos por meios mecânicos, como a vibração da mesa onde as munições alto explosivas são carregadas. Entretanto, isso não compensa a contração do material. Além disso, o controle inadequado dos mecanismos de transporte causa rachaduras devido a tensões

térmicas excessivas (Kumar & Rao, 2014).

Segundo Annapragada, Sun & Garimella (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. Dessa forma, as tensões térmicas no explosivo impõem o mesmo contra o fundo da cavidade, impedindo a formação de vazios entre o explosivo e a estrutura da base da granada.

O matemático Josef Stefan foi o primeiro a documentar a formulação relacionada à transição de fase entre os estados sólido e líquido, no século XIX. Os denominados problemas de Stefan apresentam uma abordagem matemática clássica para problemas de fronteira móvel. Entretanto, as soluções analíticas encontradas abrangem uma pequena seleção de situações particulares. Por isso, surgiram outros modelos matemáticos para tratar os problemas de solidificação.

Enquanto que o problema de Stefan divide o domínio em duas regiões, a sólida e a líquida, outros modelos matemáticos, como o Método da Entalpia, tratam o problema como tendo um único domínio, introduzindo os efeitos de mudança de fase às propriedades termofísicas do material, sendo a posição da frente de solidificação consequência da solução do campo de temperaturas.

O movimento da interface sólido-líquido e as propriedades variáveis do material induzidas pela evolução térmica são as principais dificuldades encontradas na modelagem de problemas de solidificação (Bourdillon, Verdin & Thompson, 2015). Nesse sentido, as técnicas de malha fixa são abordagens numéricas mais práticas para problemas de solidificação, cuja principal característica é explicar a evolução do calor latente pela definição de entalpia (Swaminathan & Voller, 1992).

O Método da Entalpia é amplamente utilizado para obter soluções numéricas de problemas que envolvem mudança de fase sólido-líquido. Classificado como uma solução fraca de malha fixa, o método reformula a equação de transferência de calor em termos da entalpia. A maior vantagem dessa adaptação é que a entalpia pode ser separada em duas parcelas. A primeira parcela corresponde ao calor sensível e a segunda ao calor latente (Voller et al., 1987).

A transferência de calor entre diferentes meios é o que caracteriza o problema de transferência de calor conjugado. A transferência de calor conjugado tem inúmeras aplicações de engenharia, como o resfriamento de dispositivos eletrônicos, o transporte de calor em microcélulas a combustível e microcanais.

Até o momento, várias abordagens têm sido propostas para simular problemas conjugados de transferência de calor. Entre os métodos numéricos convencionais, Método dos volumes finitos, método de diferenças finitas e método de elementos finitos têm sido aplicados com sucesso para simular problemas de transferência de calor conjugado (Lu, Lei & Dai, 2018).

O presente trabalho aborda a modelagem físico-matemática e a simulação numérico-computacional do processo de solidificação do TNT em uma cavidade cilíndrica, constituindo um modelo inspirado no processo de carregamento e de resfriamento de uma munição alto explosiva.

1.1 Objetivo e Escopo do Trabalho

Este trabalho tem como principal objetivo simular numericamente um modelo físico-matemático que possibilite uma avaliação preliminar do processo de solidificação do TNT. Dessa forma, pode-se melhor compreender o processo de solidificação presente no processo de carregamento e de resfriamento de munições explosivas. Além disso, objetiva-se avaliar a influência do material e da espessura do molde e das condições do processo de resfriamento e, aplicando a técnica de problema inverso, estimar o coeficiente de transferência de calor por convecção entre o molde e o meio externo.

Para a análise computacional, foi utilizado o Método da Entalpia (Eyres et al., 1945), uma modelagem amplamente empregada em problemas de solidificação. No presente trabalho, o problema bidimensional transiente de solidificação do TNT em moldes cilíndricos é resolvido numericamente pelo Método dos volumes finitos. Para solução do problema inverso será utilizada a técnica determinística de Levenberg-Marquardt.

Enfatiza-se que o modelo proposto adota hipóteses simplificadoras, afastando o problema investigado das reais condições de fabricação de uma granada alto explosiva. Portanto, o presente trabalho tem por objetivo principal simular a solidificação do TNT e investigar os efeitos da parede do molde, do diâmetro interno do molde, bem como estimar o coeficiente de transferência de calor por convecção. Busca-se, portanto, aumentar o conhecimento acerca do grau de influência de alguns parâmetros sobre o processo de solidificação do TNT.

1.2 Organização do Trabalho

O Capítulo 1 destina-se a introdução, apresentando o tema do presente trabalho, bem como a motivação, o objetivo, o escopo e a organização do texto.

O Capítulo 2 apresenta a revisão bibliográfica dos modelos e das soluções numéricas para problemas de solidificação. Adicionalmente, alguns trabalhos recentes sobre problema conjugado e problema inverso são abordados.

No Capítulo 3, o modelo físico-matemático utilizado é descrito, apresentando a equação da solidificação, juntamente com as condições de contorno do problema. Neste capítulo, também são apresentadas e discutidas as propriedades termofísicas do TNT e as condições de iniciais do modelo.

O Capítulo 4 apresenta a solução numérica utilizada na resolução do problema abordado no presente estudo. O Método dos volumes finitos é utilizado na discretização da equação governante, utilizando o esquema de interpolação CDS (*Central Difference Scheme*).

No Capítulo 5 é realizada a verificação do código computacional e convergência de malha, ao comparar a solução numérica de um problema clássico de mudança de fase com a solução analítica, disponível na literatura de referência. Além disso, o capítulo apresenta simulações, que buscam avaliar a influência da parede do molde e da condição de contorno de convecção no perfil de transferência de calor.

O Capítulo 6 expõe a teoria que fundamenta a técnica envolvida na estimativa de parâmetros. São apresentados os resultados obtidos na estimativa do coeficiente de transferência de calor entre o molde e o ambiente externo.

No Capítulo 7 são apresentadas as conclusões do trabalho

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo apresenta a revisão bibliográfica que fundamenta o trabalho desenvolvido. Esta se refere a problemas de solidificação, a solidificação de explosivos e a problemas inversos em solidificação.

2.1 PROBLEMAS DE SOLIDIFICAÇÃO

O início do estudo sobre mudança de fase ocorreu entre os anos de 1758 e 1762, pelo médico, físico e químico escocês Joseph Black. Este realizou uma série de experimentos com água e gelo na Universidade de Glasgow, demonstrando que os processos de mudança de fase não poderiam ser completamente explicados pela definição de calor sensível. Como consequência, ele introduziu o termo e o conceito de calor latente (Ayasoufi, 2004).

Em sua publicação de 1822, o matemático e físico francês Jean Baptiste Joseph Fourier forneceu a física e a matemática necessárias para resolver os problemas de solidificação. A ideia de como incorporar analiticamente o calor latente nas equações de condução de calor foi primeiramente abordada no trabalho do físico Gabriel Lamé e do engenheiro mecânico Emile Clapeyron em 1831 (Ayasoufi, 2004).

Entre os anos de 1889 e 1891, Joseph Stefan publicou seus estudos á respeito da mudança de fase sólido-líquido. Em sua homenagem, os problemas de fronteira móvel são comumente denominados problemas de Stefan (Ayasoufi, 2004).

Durante o processo de solidificação, uma fronteira móvel separa as duas fases existentes. Propriedades de transporte variam consideravelmente entre as fases, o que resulta em taxas diferentes de transferência de energia, massa e momento. Nesses problemas, a posição da fronteira móvel não pode ser previamente identificada, mas é uma parte importante da solução que deve ser determinada. O termo “problemas de fronteira móvel” é associado a problemas dependentes do tempo onde a posição do contorno deve ser determinada como uma função do tempo e do espaço (Hu & Argyropoulos, 1996).

A maioria das soluções analíticas existentes se destina apenas aos problemas unidimensionais em meios semi-infinitos com parâmetros constantes em cada fase e com as temperaturas iniciais constantes. Assim, para casos mais complexos, recorre-se a modelagens

matemáticas e soluções aproximadas. Ainda, simulações computacionais são mais econômicas, visto que são baixos os recursos necessários, quando comparadas com técnicas experimentais. Atualmente, a solução de problemas de fronteiras móveis tem sido feitas por análises numéricas utilizando diferenças finitas, elementos finitos ou elementos de contorno (Hu & Argyropoulos, 1996).

Embora métodos analíticos nos forneçam a solução exata, simulações computacionais dos problemas de solidificação tornam as soluções mais rápidas, além de serem importantes para estudo do comportamento do processo de solidificação.

2.1.1 SOLUÇÃO PARA PROBLEMAS DE SOLIDIFICAÇÃO

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, enquanto a outra fase é mantida em sua temperatura de solidificação. Em 1912, Neumann estendeu a solução de Stefan para um problema de duas fases. Neste cenário mais realista, para um processo de fusão, assume-se o estado inicial do material como sólido. Entretanto, sua temperatura inicial difere da temperatura de mudança de fase e, durante o processo, a temperatura do material não é mantida a um valor constante (Hu & Argyropoulos, 1996).

Ozisk (1993) apresentou algumas soluções analíticas para problemas de mudança de fase. Segundo o autor, essa classe de problemas é governada por equações diferenciais parciais parabólicas. Entretanto, inicialmente, a localização da interface móvel não é conhecida, o que dificulta a obtenção de uma solução analítica.

Uma vez que soluções analíticas só existem para um número restrito de situações, buscam-se soluções aproximadas. Os métodos numéricos usados em problemas de solidificação são classificados em soluções fortes e soluções fracas. O primeiro grupo resolve diretamente o problema de fronteira móvel, enquanto que o segundo conjunto de soluções incorporam os efeitos de mudança de fase nas propriedades termofísicas, sendo a posição da frente de solidificação consequência da solução do campo de temperaturas. As soluções numéricas fortes são aplicáveis apenas a problemas unidimensionais, envolvendo uma ou duas fases, uma vez que seus custos computacionais são demasiados ao serem empregadas em problemas multidimensionais (Hu & Argyropoulos, 1996).

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 com 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. Entre os métodos de solução fraca, temos: 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, o calor latente é contabilizado pelo aumento da capacidade térmica do material na faixa de temperatura de mudança de fase. Se o calor latente for uniformemente liberado na mudança de fase, a capacidade térmica aparente é definida por:

$$C_{ap} = \begin{cases} C_{sol} & , T < T_{sol} \\ C_{ls} & , T_{sol} \leq T \leq T_{liq} \\ C_{liq} & , T > T_{liq} \end{cases} \quad (2.1)$$

onde

$$C_{ls} = \frac{\left\{ \int_{T_{sol}}^{T_{liq}} \rho c_p(T) dT + \rho \Delta h \right\}}{(T_{liq} - T_{sol})} \quad (2.2)$$

Assim, a equação de energia unidimensional torna-se:

$$C_{ap} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (2.3)$$

A Eq. (2.3) pode ser facilmente discretizada e resolvida numericamente. Na formulação explícita para o método de diferenças finitas, C_{ap} é determinado pela temperatura em cada nó da malha do passo anterior. Na formulação implícita, podem-se usar as temperaturas do passo anterior ou os valores do passo atual (Hu & Argyropoulos, 1996).

O método da capacidade efetiva foi proposto por Poirier & Salcudean (1988), na tentativa de melhorar o método da capacidade aparente. Nessa técnica, assume-se um perfil de temperatura entre os nós da malha e a capacidade efetiva é calculada pela integração através do volume de controle discretizado no domínio. Assim,

$$C_{ef} = \frac{(\int C_{ap} dV)}{V} \quad (2.4)$$

onde C_{ef} , C_{ap} e V são a capacidade efetiva, a capacidade térmica aparente e o volume finito, respectivamente (Hu & Argyropoulos, 1996).

O uso da entalpia para resolver as equações diferenciais parciais foi primeiramente proposto por Eyres et al. (1946) para evitar a não-linearidade presente em problemas de condução de calor (Hu & Argyropoulos, 1996). No método, a condição de Stefan não é imposta, mas automaticamente obedecida (Ayasoufi, 2004).

Considerando a equação governante de um problema tridimensional em coordenadas Cartesianas, a conservação de energia, assumindo propriedades constantes em cada fase é dada por:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (2.5)$$

onde c_p , k e ρ são, respectivamente, o calor específico, a condutividade térmica e a massa específica do material. O lado esquerdo da equação é relacionado à variação da entalpia, definida por:

$$H = (1 - f) \int_{T_m}^T \rho c_{p,sol} dT + f \int_{T_m}^T \rho c_{p,liq} dT + f \rho \Delta h \quad (2.6)$$

na qual Δh é o calor latente por unidade de volume e f é igual a 1 para líquidos e 0 para sólidos.

Utilizando esta definição, podemos reescrever a equação governante, de modo que:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (2.7)$$

onde H é a entalpia por unidade de volume (Ayasoufi, 2004).

A principal característica dessa reformulação é que o calor latente é calculado em função da temperatura. Além disso, a relação entre entalpia e temperatura é estabelecida em termos do calor latente proveniente da mudança de fase do material.

Acredita-se que a primeira aplicação do método de entalpia para um esquema de diferenças finitas tenha sido efetuada por Rose (1960). Shamsunder & Sparrow (1975) aplicaram o Método da Entalpia juntamente com um esquema de diferenças finitas implícito, para resolver um problema de solidificação em coordenadas retangulares, com condições de

contorno convectivas. Bell & Wood (1983) avaliaram o desempenho do Método da Entalpia para um problema de Stefan unidimensional de um sólido semi-infinito em processo de fusão, que se encontrava inicialmente em temperatura de fusão e tendo uma de suas extremidades expostas a alta temperatura.

Poirier & Salcudean (1988) relataram que o método é mais complexo e de custosa implementação, quando comparado a outros métodos numéricos para solução de problemas de solidificação, tendo aumento no custo computacional conforme o refinamento da malha. Entretanto, o Método da Entalpia fornece soluções precisas, especialmente para a solidificação de metais, nos quais existe uma variação de temperatura de mudança de fase (Hu & Argyropoulos, 1996).

2.2 SOLIDIFICAÇÃO DE EXPLOSIVOS

Chen & Shiuan (1992) utilizaram o método de entalpia para estudar a fusão de explosivos, particularmente do TNT, em uma granada. Embora os efeitos de convecção tenham sido desconsiderados, os resultados numéricos obtidos 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.

A importância dos efeitos convectivos foi estudada por Ji & Lin (1998), que concluíram que o processo de solidificação induz a convecção natural, afetando a dependência do tempo nas curvas de resfriamento, bem como na distribuição de temperatura no material fundido. 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) propuseram um modelo numérico para simular precisamente os fenômenos de transporte, bem como as tensões térmicas induzidas encontradas no processo de solidificação do explosivo RDX. O modelo foi validado ao compará-lo com os dados experimentais e resultados numéricos obtidos por Chen & Shiuan (1992). Os autores observaram que a taxa de solidificação é muito alta no início do processo de fundição e confirmaram que, para explosivos com alta viscosidade, a transferência de calor por convecção não altera significativamente a distribuição da temperatura.

Zhang et al. (2013) elaboraram um modelo numérico com o intuito de observar quais condições afetam a ignição de explosivos. Considerando que impactos mecânicos são a principal causa de ignição de atmosferas explosivas na indústria, a pesquisa buscava estimar o

risco de ignição do explosivo sob impacto de pesos em queda. Os autores concluíram que o tempo de início da explosão diminui à medida que o tamanho dos poros presentes no explosivo aumenta.

Kumar & Rao (2014) apresentam um modelo que avalia a solidificação do TNT. O modelo combina princípios de transferência de calor de estado transiente, associados ao balanço de calor na interface sólido-líquido como um limite móvel de solidificação. O fato de que a solidificação do explosivo começa a partir da periferia (lado mais frio) e avança em direção ao centro nos permite prever o perfil de solidificação de peças explosivas à base de TNT. Isso permite a adoção de um controle de qualidade adequado, durante a solidificação do TNT fundido, para eliminar as desvantagens inerentes às cargas explosivas, como a contração do material solidificado e a formação de poros e vazios. Segundo os autores, ao prever o tempo de solidificação e a densidade do carregamento, pode-se estimar a porosidade e, assim, aplicar medidas corretivas, otimizando as condições da planta.

Sanhye et al. (2016) desenvolveram uma ferramenta de modelagem multifísica, que aborda as transferências de calor, de massa e momento envolvidas no processo de fundição, para representar o processo de fundição de materiais energéticos. A modelagem inclui os efeitos da convecção por fusão e das tensões térmicas. Os autores investigaram a influência da adesão da carga solidificada nas paredes do molde e a subsequente separação, devido à retração volumétrica, para uma munição de calibre 105mm. Dessa forma, os autores pudessem prever o tamanho e a localização de vazios entre o explosivo solidificado e a parede do molde. Os autores concluíram que, para reduzir as tensões de separação e residuais, deve-se controlar o gradiente de temperatura na solidificação, já que este está intrinsecamente ligado aos campos de tensão, ou seja, quanto menor o gradiente de temperatura, menores as tensões residuais.

Soares (2017) comparou diferentes condições de resfriamento e suas consequências no produto final, ao simular modelos multifásicos. Para o caso estudado pela autora, uma granada de morteiro 81mm, uma carga solidificada de melhor qualidade é obtida quando submetida à convecção forçada, pois os perfis de solidificação se mostraram suaves e com boa relação diâmetro-comprimento da cavidade formada pelo rechupe, fatores esses que contribuem para um menos expressivo aprisionamento de possíveis bolhas, para um recompletamento mais efetivo de explosivo fundido e para uma menor retenção de tensões residuais. O modelo matemático adotado nesse trabalho foi a formulação multifásica Euleriana e o procedimento numérico abrange as técnicas do método entalpia-porosidade e da aproximação

de Boussinesq para tratar a convecção natural decorrente do gradiente de massa específica entre as fases líquida e sólida.

2.3 PROBLEMA CONJUGADO

Durante o processo de solidificação, todos os modos de transferência de calor podem ocorrer isolados ou simultaneamente. Entre eles: convecção no metal líquido superaquecido; condução na camada de metal solidificada; convecção, radiação e condução na camada de ar entre o metal e o molde; condução através das paredes do molde e convecção, radiação e condução entre a superfície externa do molde e o meio ambiente. Entretanto, para situações particulares algumas formas de transferência de calor podem ser desprezíveis ou deixam de ocorrer (Santos, 1997).

O uso de simulações de solidificação em moldes pode contribuir muito para aumentar o conhecimento do processo, no entanto, algumas incertezas devem ser eliminadas antes que tais simulações possam obter uma descrição realista do processo. A transferência de calor na interface metal-molde é uma dessas incertezas. Além disso, a maneira como o fluxo de calor atravessa a fronteira entre o material a ser solidificado e a parede do molde afeta diretamente a evolução da frente de solidificação (Santos, Quaresma & Garcia, 2001).

Quando as superfícies do metal e do molde são colocadas em contato, uma junção imperfeita é formada. Embora gradientes de temperaturas uniformes possam existir tanto no metal como no molde, a junção entre as duas superfícies cria uma queda de temperatura, que depende das propriedades termofísicas dos materiais de contato, pressão de contato, temperatura inicial do molde, entre outras coisas (Santos, Quaresma & Garcia, 2001).

Segundo os autores Santos, Quaresma & Garcia (2001), o coeficiente de transferência de calor apresenta um alto valor no estágio inicial de solidificação, devido a uma boa conformidade superficial entre o molde metálico e o líquido em seu interior. Entretanto, com o avançar do processo de solidificação, o molde se expande devido à absorção de calor, enquanto o líquido se contrai ao ser resfriado. Como resultado, surgem vazios entre esses materiais, uma vez que a pressão se torna insuficiente para manter o contato entre eles.

Caldeira, Leiroz & Orlande (2005) analisam numericamente os efeitos térmicos conjugados de obstruções retangulares assimétricas nas regiões de entrada de canais de placas paralelas. As equações de governo do fluxo laminar incompressível e a equação de conservação de energia são discretizadas com um esquema WUDS (*Weighted Upstream*

Differencing Scheme) de diferença/volumes finitos. O domínio é subdividido em regiões e uma malha regular é usada dentro dos subdomínios obtidos, sendo os sistemas resultantes de equações algébricas resolvidos simultaneamente no domínio.

Nesse trabalho, o método de diferenças finitas com a abordagem de meio volume é empregado nos contornos, facilitando o uso das condições de contorno de primeiro tipo para a função de temperatura, vorticidade e fluxo. Nos volumes internos do domínio, os autores utilizaram o método de volume finito. Na interface da obstrução sólida/fluido, os centros dos volumes estão na interface, estando partes dos volumes no sólido e partes dos volumes no fluido (Caldeira, Leiroz & Orlande, 2005).

2.4 PROBLEMA INVERSO

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*, sendo a evolução das fases previamente conhecida. O problema inverso utilizado objetiva reconstruir a função que descreve o coeficiente de transferência de calor desconhecido, a partir das posições dos deslocamentos das interfaces de mudança de fase.

Nejad et al. (2010) consideram um problema de transferência de calor transiente não-linear. Os movimentos da interface sólido-líquido e a espessura da zona *mushy* são pré-estabelecidos, possibilitando controlar a qualidade final do material. O Método da Entalpia é utilizado, o que permite resolver o problema inverso em um único domínio espacial e temporal. O problema de minimização resultante foi eficientemente resolvido, utilizando a técnica do Gradiente Conjugado com Problema Adjunto.

Jaccoud (2013) abordou o processo de solidificação para um modelo físico-matemático unidimensional transiente, baseado no método da capacidade efetiva e resolvido numericamente pelo método de diferenças finitas. O autor utiliza um método estocástico de otimização, Otimização por Enxame de Partículas – PSO, para identificar o parâmetro associado à variação de temperatura na zona *mushy* e para estimar a porosidade formada durante o processo de solidificação do TNT.

O aquecimento não uniforme da parede do molde durante a fundição dá origem a uma expansão térmica diferencial que leva à distorção do molde, rachaduras e quebra. A distribuição da temperatura no molde depende do fluxo de calor na superfície quente do molde, velocidade do fluido de resfriamento, material da parede do molde e sua espessura,

entre outros. Udayraj et al. (2017) propõe uma metodologia em que o fluxo de calor limite pode ser estimado usando sensores de temperatura limitados. Nesse estudo, o problema direto envolve condução de calor bidimensional através do qual é resolvido usando o método de diferenças finitas. O método do gradiente conjugado é usado para o problema inverso da estimativa do fluxo de calor.

3 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA FÍSICO-MATEMÁTICO

O presente capítulo apresenta a descrição do problema físico e formulação matemática adotada, além de estabelecer as condições de contorno e inicial do problema em estudo.

3.1 GRANADA ALTO EXPLOSIVA

Atualmente, a granada 120mm AE CONV é uma das granadas de morteiro mais utilizadas pelo Exército Brasileiro, ilustrada na FIG. 3.1. Este tipo de projétil contém no seu interior uma carga de alto explosivo, sendo o trinitro- tolueno (TNT) fundido o mais utilizado.

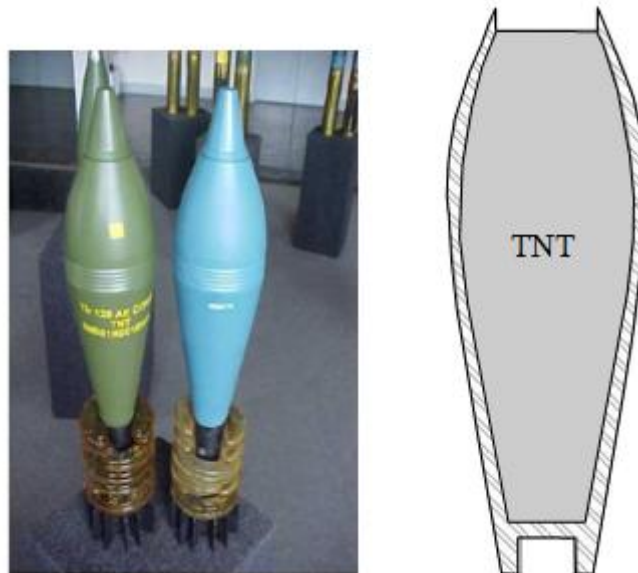


FIG. 3.1. Granada de morteiro 120mm AE CONV, produzida pela IMBEL (Jaccoud, 2013).

Ao longo da história, granadas alto explosivas com diversos calibres foram fabricadas, sendo na atualidade os calibres de morteiros mais comuns os 60, 81 e 120mm, enquanto os calibres mais comuns de obuseiros são os 105 e 155mm. Contudo, granadas com 240mm tanto de morteiros quanto de obuseiros já foram produzidas.

Este grande calibre, com 240mm, é interessante para estudar a evolução da frente de solidificação na direção radial da granada, sendo o tempo de duração deste fenômeno muito maior em granadas com grandes calibres que em granadas com pequeno calibre como as 60mm.

Como dados base para as análises a serem realizadas no presente trabalho, são adotadas as grandezas apresentadas na TAB 3.1 referentes a uma granada alto explosiva calibre 240mm hipotética.

TAB. 3.1: Características adotadas para uma granada hipotética calibre 240mm.

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: (Jaccoud, 2013).

3.2 PROBLEMA FÍSICO E MODELAGEM MATEMÁTICA

No modelo matemático proposto para descrever o processo de solidificação no interior de uma granada, considera-se que a cavidade interior da granada é um cilindro com altura L e raio R . A base e a superfície lateral direita desse cilindro encontram-se com temperatura inferior à temperatura de solidificação do TNT, caracterizando a condição de temperatura prescrita. Assume-se que o problema físico-matemático ora proposto possui simetria axial, com fluxo de calor nulo no eixo de simetria. Na superfície superior do cilindro, devido à dificuldade em reproduzir as condições reais do processo industrial de carregamento, assumiu-se a condição de contorno de fluxo nulo, semelhante à adotada pela bibliografia de referência. Desta forma, o problema físico envolve um processo de condução bidimensional, transiente, cujo domínio é ilustrado pela FIG. 3.2. Considera-se que a temperatura inicial T_i e

a temperatura da parede T_{wall} são constantes.

As propriedades termofísicas do TNT estão presentes em diversas referências (Sun & Garimella, 2007). Na TAB. 3.2 apresentam-se as propriedades termofísicas relevantes referentes às fases líquida e sólida.

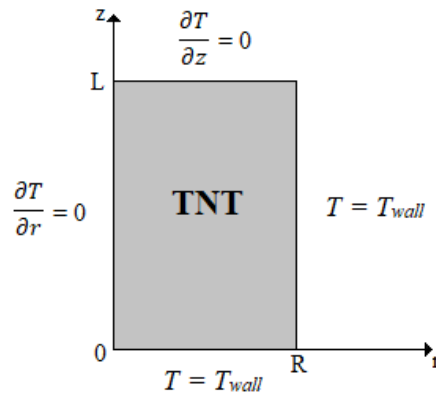


FIG. 3.2: Modelo geométrico representativo com as condições de contorno nas superfícies inferior, superior e lateral, e no eixo de simetria.

TAB. 3.2: Propriedades termofísicas do TNT.

Propriedades	Símbolo	Valor	Unidade
Massa específica na fase sólida	ρ_s	1648	kg/m ³
Massa específica na fase líquida	ρ_l	1655,6	kg/m ³
Calor específico	c_p	1062,2	J/kg K
Condutividade térmica	k	0,26	W/m K
Temperatura de fusão	T_m	354,05	K
Calor latente	Δh	98,4	kJ/kg

Fonte: (Sun & Garimella, 2007).

O calor específico e a condutividade térmica são constantes e independentes da fase e as massas específicas são constantes nas fases a que se referem.

Os parâmetros adotados neste modelo estão presentes na TAB.3.3.

TAB. 3.3: Parâmetros do modelo matemático.

Parâmetro	Representação	Valor	Unidade
Temperatura prescrita	T_{wall}	300	K
Temperatura inicial	T_i	360	K

Fonte: (Sun et al., 2005).

O processo de solidificação descrito pode ser caracterizado pela condução de calor bidimensional transiente em coordenadas cilíndricas, porém emprega-se o Método da Entalpia. Adicionalmente, considera-se que as propriedades termofísicas são constantes em cada fase, permitindo simplificar a Eq. (2.6).

Logo, o modelo matemático é estabelecido pelas seguintes equações, condições de contorno e inicial:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.1)$$

$$H = \begin{cases} \rho_{sol} c_{p,sol} T & , T < T_m \\ \rho_{liq} \Delta h + \rho_{sol} c_{p,sol} T_m + \rho_{liq} c_{p,liq} (T - T_m) & , T \geq T_m \end{cases} \quad (3.2)$$

$$T(r, z, t=0) = T_i \quad , 0 < r < R \text{ e } 0 < z < L \quad (3.3)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad , t > 0 \text{ e } 0 < z < L \quad (3.4)$$

$$T(R, z, t) = T_{wall} \quad , t > 0 \text{ e } 0 < z < L \quad (3.5)$$

$$T(r, 0, t) = T_{wall} \quad , t > 0 \text{ e } 0 < r < R \quad (3.6)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=L} = 0 \quad , t > 0 \text{ e } 0 < r < R \quad (3.7)$$

Portanto, a partir do campo de entalpia é possível determinar o campo de temperatura empregando:

$$T = \begin{cases} \frac{H}{\rho_{sol} c_{p,sol}} & , H \leq H_{sf} \\ T_m & , H_{sf} < H < H_{lf} \\ \frac{H - H_{lf}}{\rho_{liq} c_{p,liq}} + T_m & , H \geq H_{lf} \end{cases} \quad (3.8)$$

onde $H_{sf} = \rho_{sol}c_{p,sol}T_m$ e $H_{lf} = \rho_{sol}c_{p,sol}T_m + \rho_{liq}\Delta h$ são, respectivamente, as entalpias de fusão por unidade de volume das fases sólida e líquida (Ayasoufi, 2004).

3.3 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA CONJUGADO

Na elaboração do problema conjugado, exemplificado na FIG. 3.3, considerou-se o molde (AISI 302), cujas propriedades termofísicas constam na TAB. 3.4. Foi considerada uma junção perfeita entre o molde e o TNT, de modo que a transferência de calor entre eles é puramente condutiva.

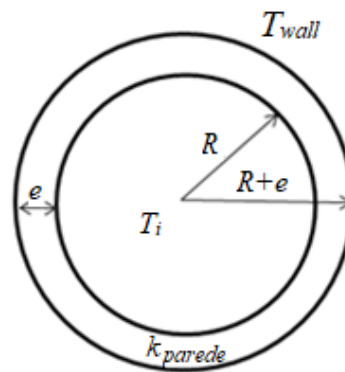


FIG. 3.3: Representação esquemática do problema conjugado.

TAB. 3.4: Propriedades termofísicas do molde.

Propriedades	Símbolo	Valor	Unidade
Massa específica	ρ_{parede}	8030	kg/m ³
Condutividade térmica	k_{parede}	16,27	W/m K
Calor específico	$c_{p,parede}$	502,48	J/kg K

Fonte: (Annapragada, Sun & Garimella, 2008).

A presença da parede do molde com espessura, e , nesta modelagem, acrescenta uma nova região ao domínio, sendo necessária uma nova relação entre a entalpia e a temperatura, a qual passa a ter que representar também o estado termodinâmico na parede. Desta forma, o modelo matemático é reescrito:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.9)$$

$$H = \begin{cases} \rho_{sol} c_{p,sol} T & , se r \leq R e T < T_m \\ \rho_{liq} \Delta h + \rho_{sol} c_{p,sol} T_m + \rho_{liq} c_{p,liq} (T - T_m) & , se r \leq R e T \geq T_m \\ \rho_{parede} c_{p,parede} T & , se R < r \leq R + e \end{cases} \quad (3.10)$$

$$T(r, z, t=0) = T_i \quad , 0 < r < R+e e 0 < z < L \quad (3.11)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad , t > 0 e 0 < z < L \quad (3.12)$$

$$T(R+e, z, t) = T_{wall} \quad , t > 0 e 0 < z < L \quad (3.13)$$

$$T(r, 0, t) = T_{wall} \quad , t > 0 e 0 < r < R+e \quad (3.14)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=L} = 0 \quad , 0 < r < R+e e t > 0 \quad (3.15)$$

Consequentemente, a partir do campo de entalpia é possível determinar o campo de temperatura no explosivo e na parede empregando:

$$T = \begin{cases} \frac{H}{\rho_{sol} c_{p,sol}} & , se r \leq R e H \leq H_{sf} \\ T_m & , se r \leq R e H_{sf} < H < H_{lf} \\ \frac{H - H_{lf}}{\rho_{liq} c_{p,liq}} + T_m & , se r \leq R e H \geq H_{lf} \\ \frac{H}{\rho_{parede} c_{p,parede}} & , se R < r \leq R + e \end{cases} \quad (3.16)$$

Então, de modo a determinar a propriedade relacionada a cada nó da malha, considerou-se:

$$\rho = \begin{cases} \rho_{liq} & , se r \leq R e T < T_m \\ \rho_{sol} & , se r \leq R e T \geq T_m \\ \rho_{parede} & , se R < r < R + e \end{cases} \quad (3.17)$$

$$c_p = \begin{cases} c_{p,liq} & , se r \leq R e T < T_m \\ c_{p,sol} & , se r \leq R e T \geq T_m \\ c_{p,parede} & , se R < r < R + e \end{cases} \quad (3.18)$$

$$k = \begin{cases} k & , se r \leq R \\ k_{parede} & , se r > R \end{cases} \quad (3.19)$$

Geralmente, no carregamento de uma granada em processo industrial, as condições de contorno laterais externas são caracterizadas por convecção natural do ar induzida pela superfície quente da granada ou por convecção forçada, nas quais se impõe uma ventilação direcionada (Soares, 2017).

Por isso, analisa-se também a condição de convecção na superfície externa, com temperatura do meio externo $T_{\infty} = 300K$. Para tal, nestes casos, a condição de contorno descrita pela Eq. (3.13) é substituída pela Eq. (3.20) a seguir.

$$k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R+e} = h_{conv} (T - T_{\infty}) \quad , t > 0 \text{ e } 0 < z < L \quad (3.20)$$

Os coeficientes de transferência de calor convectivo do ar considerados são apresentados na TAB. 3.5. Foi adotada uma aproximação para a situação de convecção natural, por meio de uma convecção forçada com baixo coeficiente convectivo.

TAB. 3.5: Coeficientes de convecção adotados.

Condição de contorno	Valor	Unidade	Biot
Convecção natural	5,1067	W/m ² K	0,1073
Convecção forçada	49,3179	W/m ² K	1,0364

Fonte: (Soares, 2017).

Na TAB. 3.5 o numero de Biot é definido como:

$$Bi = \frac{h_{conv}L}{k_{parede}} \quad (3.21)$$

4 MÉTODO NUMÉRICO

Ambos os métodos analíticos e numéricos formam a classe de métodos teóricos, pois objetivam resolver equações diferenciais. A diferença está na complexidade da equação que cada método pode solucionar.

Os métodos analíticos muitas vezes acompanham geometria e condições de contorno simples, além de hipóteses simplificadoras que desviam o problema matemático do problema físico real. Apesar dessas desvantagens, este deve ser preferido, quando for suficiente para resolver um problema de interesse dentro dos níveis de precisão e exigências necessárias. A experimentação numérica, por sua vez, praticamente não apresenta restrições (Maliska, 1995).

O presente capítulo descreve o Método dos volumes finitos e apresenta a discretização da equação governante do problema descrito.

4.1 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

Existem duas maneiras para obtenção das equações aproximadas: pelo balanço da propriedade em volumes finitos ou partindo-se da equação diferencial na forma conservativa e integrá-la sobre o volume elementar no espaço e no tempo. Logicamente, os processos são equivalentes. Segundo Maliska (1995), a preferência pela segunda opção é devido ao fato de que nem todos os balanços são fáceis de deduzir, como no caso do balanço da quantidade de movimento, em que é necessário identificar o somatório de todas as tensões atuantes no volume de controle. No presente trabalho, também se optou pela integração da equação diferencial.

Considerando equação governante apresentada no Capítulo 3, tem-se a formulação do problema proposto.

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right)$$

Uma simplificação da malha bidimensional utilizada é descrita na FIG. 4.1, sendo as dimensões em ambas as direções tomadas como unitárias.

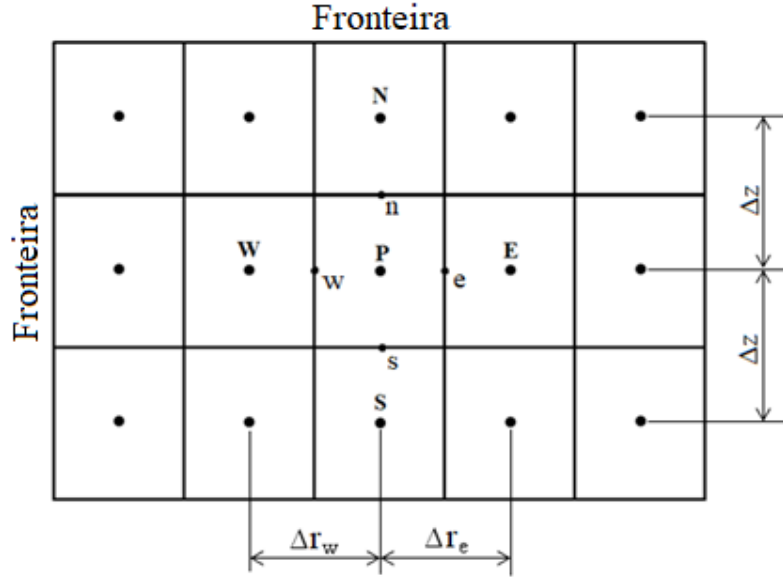


FIG. 4.1: Malha para o problema de volumes finitos.

Na FIG. 4.1, W e E são, respectivamente, os pontos anterior e seguinte ao ponto da malha que está sendo analisado, P. Já *n*, *s*, *e* e *w*, referem-se, respectivamente, às direções norte, sul, leste e oeste da derivada na qual as propriedades são avaliadas.

Integrando a Eq. (3.10) no espaço e no tempo, obtemos:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial H}{\partial t} dz dr dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(kr \frac{\partial T}{\partial r} \right) dz dr dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) dz dr dt \quad (4.1)$$

que resulta em:

$$\int_s^n \int_w^e (H - H^o) dz dr = \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \frac{1}{r_p} \left(k_e r_e \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_e - k_w r_w \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_w \right) dz dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \left(k_n \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_n - k_s \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_s \right) dr dt \quad (4.2)$$

Para não utilizar o subscrito $t+\Delta t$, optou-se por usar o sobrescrito *o* para o tempo anterior.

Deve-se decidir agora qual o comportamento do fluxo de calor entre as faces do volume de controle no intervalo de tempo Δt . A escolha dessa função é o que caracteriza a formulação como totalmente implícita, implícita ou explícita. No presente trabalho, adotou-se a formulação explícita, na qual todas as temperaturas vizinhas ao nó P são avaliadas no tempo

anterior e, portanto, tem suas temperaturas conhecidas. Como temos uma equação para cada ponto discreto e, em cada uma destas equações, as temperaturas vizinhas são sempre do instante anterior, a formulação explícita dá origem a um conjunto de equações algébricas que podem ser resolvidas uma a uma (Maliska, 1995).

A equação adquire, então, a seguinte forma:

$$(H - H^o)\Delta z\Delta r = \frac{1}{r_p} \left(k_e r_e \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_e - k_w r_w \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_w \right) \Delta t \Delta z + \left(k_n \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_n - k_s \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_s \right) \Delta t \Delta r \quad (4.3)$$

Se optássemos pela formulação implícita, obteríamos um sistema de equações acopladas entre si, já que as temperaturas nos nós T_E e T_W seriam calculadas no mesmo nível de tempo de T_P (Maliska, 1995). Além disso, com a formulação implícita, entalpia e temperatura também seriam calculadas no mesmo nível de tempo, dificultando o sistema numérico.

Devemos também escolher a função de interpolação espacial para a temperatura. Uma vez que, apenas os efeitos da difusão são considerados nesse problema físico, opta-se por uma função linear entre os pontos nodais. Logo, as derivadas da direção axial nas faces são expressas por:

$$\frac{\partial T}{\partial z} \Big|_n = \frac{T_N^o - T_P^o}{\Delta z} \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} \Big|_s = \frac{T_P^o - T_S^o}{\Delta z} \quad (4.5)$$

De maneira análoga se obtém as derivadas na direção radial. Com essas definições, a Eq. (4.3) dividida por $(\Delta t \Delta z \Delta r)$ torna-se:

$$\frac{(H_P - H_P^o)}{\Delta t} = \frac{1}{r_p} \frac{1}{\Delta r \Delta r_e} k_e r_e (T_E^o - T_P^o) - \frac{1}{r_p} \frac{1}{\Delta r \Delta r_w} k_w r_w (T_P^o - T_W^o) + \frac{1}{\Delta z^2} k_n (T_N^o - T_P^o) - \frac{1}{\Delta z^2} k_s (T_P^o - T_S^o) \quad (4.6)$$

Rearranjando os termos, obtemos:

$$H_P = H_P^o + \frac{1}{r_P} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_e} k_e r_e (T_E^o - T_P^o) - \frac{1}{r_P} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_w} k_w r_w (T_P^o - T_W^o) + \frac{\Delta t}{\Delta z^2} [k_n (T_N^o - T_P^o) - k_s (T_P^o - T_S^o)] \quad (4.7)$$

Um dos requisitos fundamentais de uma aproximação numérica é que ela seja capaz de reproduzir a equação diferencial, quando os tamanhos da malha espacial e temporal tendam a zero, caracterizando-a como consistente. Além disso, a solução numérica deve ser estável. Consistência e estabilidade são condições necessárias e suficientes para a convergência (Maliska, 1995).

O critério de estabilidade de Von Neumann é um procedimento usado para verificar a estabilidade de métodos de diferenças finitas. Dessa forma, devem-se escolher malha e passo temporal que obedeçam a seguinte inequação:

$$\frac{k}{\rho c_p} \frac{\Delta t}{\Delta r^2} + \frac{k}{\rho c_p} \frac{\Delta t}{\Delta z^2} \leq 0,5 \quad (4.8)$$

4.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO

Todos os volumes internos da malha possuem equação aproximada conforme definido pela Eq. (4.7). Entretanto, faz-se necessário obter as equações dos volumes que se encontram na fronteira.

A discretização do domínio é feita com volumes elementares inteiros, de modo que nunca se tem uma variável sobre a fronteira. Para cada um dos oito casos particulares de fronteira, obtemos a equação de transferência de calor correspondente, conforme indicado na TAB. 4.1. Os volumes de fronteira são discretizados, conforme representado na FIG. 4.2.

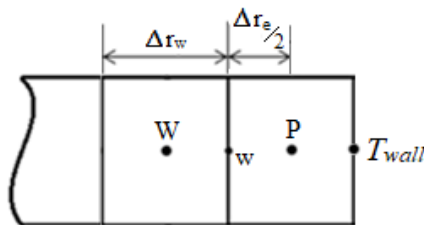


FIG. 4.2. Discretização de um volume de fronteira.

TAB. 4.1: Equações discretizadas para cálculo da entalpia.

Volume	Coordenadas	Condição de contorno	Equação diferencial
Face norte	$z = L$ $r \neq 0$ $r \neq R+e$	Fluxo nulo em $z=L$	$H_P = H_P^0 + \frac{1}{r_p} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_e} k_e r_e (T_E^0 - T_P^0) - \frac{1}{r_p} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_w} k_w r_w (T_P^0 - T_W^0) - \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} k_s (T_P^0 - T_S^0)$
Face sul	$r \neq 0$ $r \neq R+e$ $z = 0$	Temperatura prescrita em $z = 0$	$H_P = H_P^0 + \frac{1}{r_p} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_e} k_e r_e (T_E^0 - T_P^0) - \frac{1}{r_p} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_w} k_w r_w (T_P^0 - T_W^0) + \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} [k_n (T_N^0 - T_P^0) - 2k_s (T_P^0 - T_{wall})]$
Face leste	$r = R+e$ $z \neq 0$ $z \neq L$	Temperatura prescrita em $r = R+e$	$H_P = H_P^0 + \frac{1}{r_p} \frac{2\Delta t}{\Delta r \Delta r_e} k_e r_e (T_{wall} - T_P^0) - \frac{1}{r_p} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_w} k_w r_w (T_P^0 - T_W^0) + \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} [k_n (T_N^0 - T_P^0) - k_s (T_P^0 - T_N^0)]$
Face oeste	$r = 0$ $z \neq 0$ $z \neq L$	Fluxo nulo em $r = 0$	$H_P = H_P^0 + \frac{1}{r_p} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_e} k_e r_e (T_E^0 - T_P^0) + \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} [k_n (T_N^0 - T_P^0) - k_s (T_P^0 - T_S^0)]$
Contorno nordeste	$r = R+e$ $z = L$	Fluxo nulo em $z=L$ e temperatura prescrita em $r = R+e$	$H_P = H_P^0 + \frac{1}{r_p} \frac{2\Delta t}{\Delta r \Delta r_e} k_e r_e (T_{wall} - T_P^0) - \frac{1}{r_p} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_w} k_w r_w (T_P^0 - T_W^0) - \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} k_s (T_P^0 - T_S^0)$
Contorno noroeste	$r = 0$ $z = L$	Fluxo nulo em $z=L$ e fluxo nulo em $r = 0$	$H_P = H_P^0 + \frac{1}{r_p} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_e} k_e r_e (T_E^0 - T_P^0) - \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} k_s (T_P^0 - T_S^0)$
Contorno sudeste	$r = R+e$ $z = 0$	Temperatura prescrita em $z = 0$ e temperatura prescrita em $r = R+e$	$H_P = H_P^0 + \frac{1}{r_p} \frac{2\Delta t}{\Delta r \Delta r_e} k_e r_e (T_{wall} - T_P^0) - \frac{1}{r_p} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_w} k_w r_w (T_P^0 - T_W^0) + \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} [k_n (T_N^0 - T_P^0) - 2k_s (T_P^0 - T_{wall})]$
Contorno sudoeste	$r = 0$ $z = 0$	Temperatura prescrita em $z = 0$ e fluxo nulo em $r = 0$	$H_P = H_P^0 + \frac{1}{r_p} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_e} k_e r_e (T_E^0 - T_P^0) + \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} [k_n (T_N^0 - T_P^0) - 2k_s (T_P^0 - T_{wall})]$

Para a condição de contorno convectiva, as equações que calculam a entalpia dos contornos nordeste e sudeste e da face leste, em $r = R$, são, respectivamente:

$$H_P = H_P^o + \frac{1}{r_P} \frac{\Delta t}{\Delta r} r_e h_{conv} (T_\infty - T_P^o) - \frac{1}{r_P} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_w} k_w r_w (T_P^o - T_W^o) - \frac{\Delta t}{\Delta z^2} k_s (T_P^o - T_S^o) \quad (4.9)$$

$$H_P = H_P^o + \frac{1}{r_P} \frac{\Delta t}{\Delta r} r_e h_{conv} (T_\infty - T_P^o) - \frac{1}{r_P} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_w} k_w r_w (T_P^o - T_W^o) + \frac{\Delta t}{\Delta z^2} [k_n (T_N^o - T_P^o) - 2k_s (T_P^o - T_{wall})] \quad (4.10)$$

$$H_P = H_P^o + \frac{1}{r_P} \frac{\Delta t}{\Delta r} r_e h_{conv} (T_\infty - T_P^o) - \frac{1}{r_P} \frac{\Delta t}{\Delta r \Delta r_w} k_w r_w (T_P^o - T_W^o) + \frac{\Delta t}{\Delta z^2} [k_n (T_N^o - T_P^o) - k_s (T_P^o - T_S^o)] \quad (4.11)$$

4.3 ASPECTOS NUMÉRICOS DO PROBLEMA CONJUGADO

Nota-se que para malhas uniformes, quando todos os volumes de controle possuem o mesmo tamanho, não há diferença entre considerar os nós da malha no centro ou na face do volume de controle. Para um material composto, pode-se estabelecer a face do volume de controle onde ocorre a descontinuidade das propriedades do material. Entretanto, é difícil estabelecer as faces do volume de controle, de modo que esses coincidam com a localização desejada, sendo necessário, primeiramente, especificar as posições dos pontos da malha (Patankar, 1980).

Neste trabalho, optou-se por adotar os nós da malha localizados no centro de cada volume de controle, coincidindo o centro do volume de controle com a interface explosivo-molde, estando partes dos volumes no sólido e partes dos volumes no fluido, conforme indicado na FIG. 4.3.

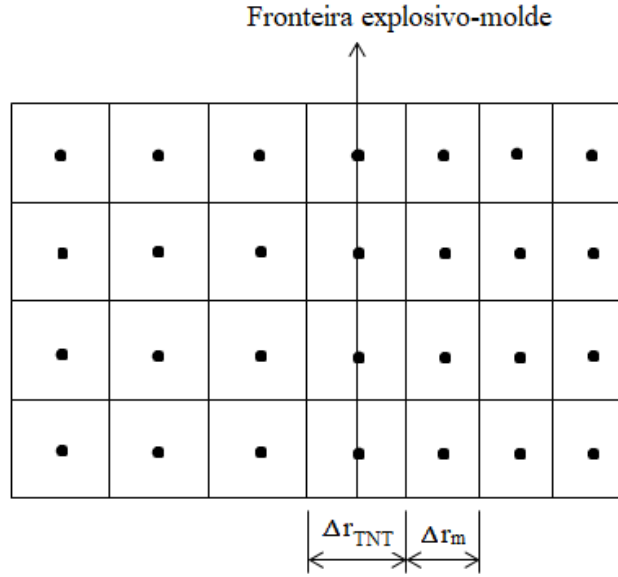


FIG. 4.3: Discretização da malha do problema conjugado e localização da interface explosivo-molde.

Dessa forma, as propriedades dos volumes centrados na interface explosivo-molde são definidas pela média aritmética entre as propriedades do explosivo e do material do molde, ou seja:

$$c_{p,interface} = \frac{c_p + c_{p,parede}}{2} \quad (4.12)$$

$$\rho_{interface} = \frac{\rho + \rho_{parede}}{2} \quad (4.13)$$

Para cada espessura de parede simulada no problema conjugado, adotaram-se malhas e passos no tempo diferentes, conforme indicado na TAB. 4.3. O intervalo de tempo para cada caso foi escolhido para satisfazer os critérios de estabilização do método do volume finitos com formulação explícita.

TAB. 4.2: Malhas adotadas.

e (m)	Malha	Volumes na parede	Δt (s)
0,005	106x120	6	0,10
0,01	80x120	8	0,13
0,02	72x120	12	0,20

5 RESULTADOS

No presente capítulo serão apresentados e analisados os resultados obtidos nas simulações da solidificação bidimensional em regime transiente do TNT.

Inicialmente é realizada a verificação do modelo computacional empregado, ao comparar os resultados do presente trabalho com resultados obtidos por Sun et al. (2005) e Jaccoud (2013), e analisa-se a convergência da malha. Na sequência, são apresentados os resultados referentes ao problema conjugado e à condição de contorno convectiva.

5.1 VERIFICAÇÃO DO MODELO

Para validar o código computacional implementado, utilizou-se um modelo físico-matemático para a solidificação bidimensional transiente de um material genérico em coordenadas retangulares. As propriedades termofísicas do material e os parâmetros do modelo foram adotados conforme Sun et al. (2005) e encontram-se na TAB. 5.1.

TAB.5.1: Propriedades termofísicas do material e parâmetro do modelo para verificação do código implementado.

Parâmetro/Propriedade	Símbolo	Valor	Unidade
Altura	L	5	m
Largura	R	5	m
Temperatura inicial	T_i	620	°C
Temperatura prescrita	T_{wall}	100	°C
Massa específica	P	1	kg/m ³
Calor específico	c_p	1	J/kg K
Condutividade térmica	k	1	W/m K
Temperatura de fusão	T_m	500	°C
Calor Latente	Δh	100	J/kg

Fonte: Sun et al. (2005).

A equação de transferência de calor e as condições inicial e de contorno que descrevem esse modelo são:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (5.1)$$

$$(x, y, t = 0) = T_i \quad (5.2)$$

$$T(0, y, t) = T_{wall} \quad (5.3)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=R} = 0 \quad (5.4)$$

$$T(x, 0, t) = T_{wall} \quad (5.5)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=L} = 0 \quad (5.6)$$

Comparou-se a posição da frente de solidificação em função do tempo encontrada numericamente com os resultados analíticos obtidos por Sun et al. (2005), que propuseram um modelo numérico para simular precisamente os fenômenos de transporte. Foram analisados os resultados para malhas com 20x20, 40x40 e 60x60 volumes, todas com passo de tempo de 5×10^{-4} s.

A FIG. 5.1 mostra a validação do código numérico desenvolvido, além de apresentar a convergência da malha. Observa-se que o refinamento da malha produz resultados mais precisos, apesar das curvas não terem sido capazes de reproduzir completamente o fenômeno na região curvilínea da frente de solidificação.

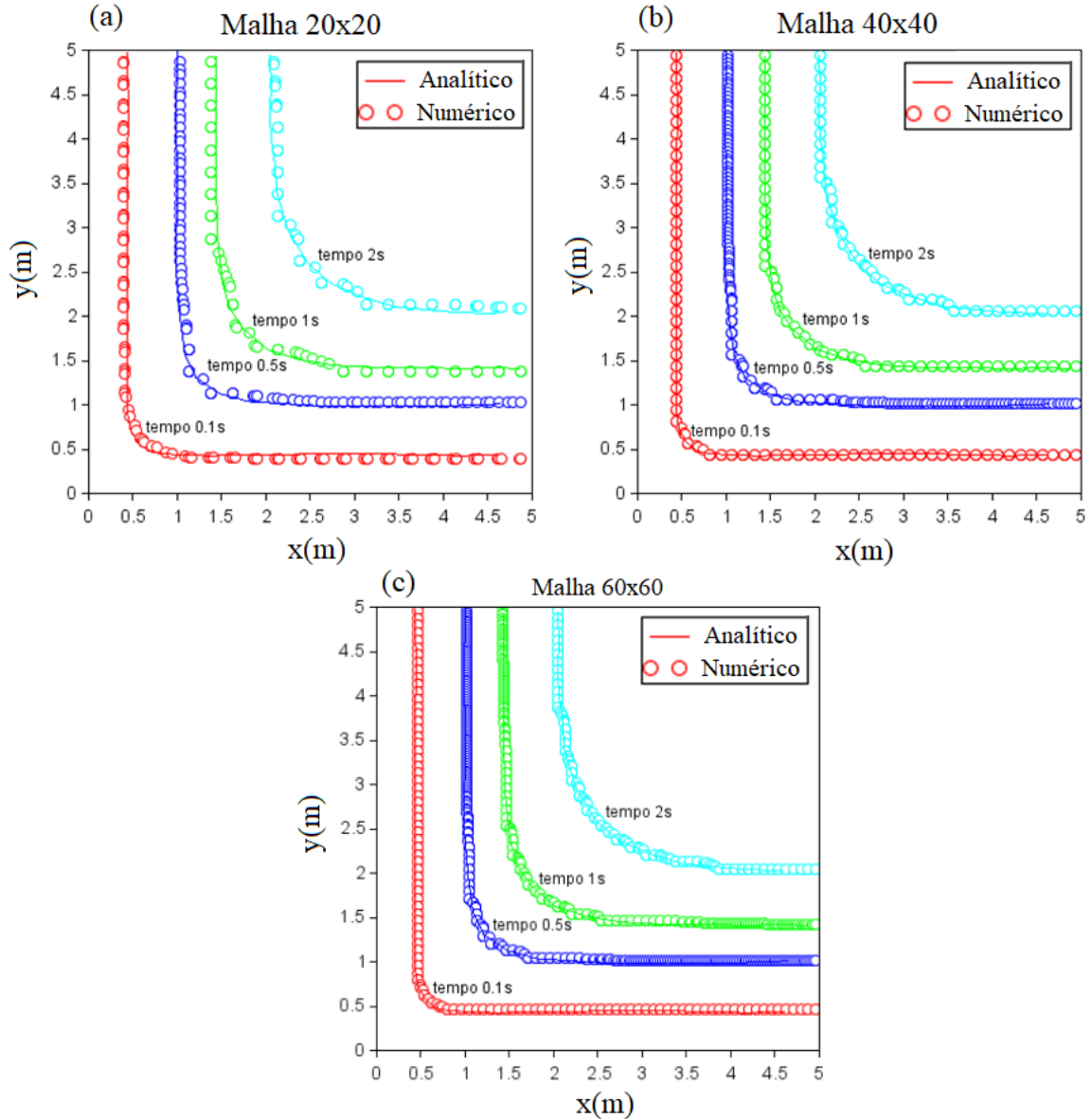


FIG. 5.1: Análise da malha para solidificação. (a) 20x20; (b) 40x40; (c) 60x60.

As distâncias médias entre as frentes de solidificação analíticas e numéricas foram, respectivamente, de 0,12m, 0,02m e 0,02m, para as malhas grosseira, intermediária e refinada. A variação da distância da frente de solidificação foi de 8% entre malha grosseira e a malha intermediária e, por isso, foi verificada a convergência da malha.

5.2 SIMULAÇÃO DA SOLIDIFICAÇÃO DO TNT

Primeiramente, foi considerado um modelo unidimensional, problema de Stefan, com condução de calor na direção z , com condição de contorno de temperatura prescrita em $z = 0$ e

fluxo nulo em $z = L$. Também foi elaborado um modelo bidimensional, no qual ambos os extremos da direção r têm fluxo de calor nulo, de modo que a condução de calor ocorra apenas na direção axial.

Conforme já abordado na seção 3, segue abaixo as propriedades termofísicas do TNT e os parâmetros do modelo matemático.

Propriedades termofísicas do TNT.

Propriedades	Símbolo	Valor	Unidade
Massa específica na fase sólida	ρ_s	1648	kg/m ³
Massa específica na fase líquida	ρ_l	1655,6	kg/m ³
Calor específico	c_p	1062,2	J/kg K
Condutividade térmica	k	0,26	W/m K
Temperatura de fusão	T_m	354,05	K
Calor latente	Δh	98,4	kJ/kg

Fonte: (Sun & Garimella, 2007).

Parâmetros do modelo matemático.

Parâmetro	Representação	Valor	Unidade
Temperatura prescrita	T_{wall}	300	K
Temperatura inicial	T_i	360	K

Fonte: (Sun et al., 2005).

Para o modelo unidimensional considerou-se uma malha de 120 volumes, com $\Delta t = 10s$. Já para o caso bidimensional, simulou-se uma malha de 60x100, também com passo no tempo de 10s.

Foram obtidas as curvas de evolução da frente de solidificação para ambos os casos, presentes na FIG. 5.2. Os resultados foram comparados aos apresentados por Jaccoud (2013) de modo a validar o código computacional implementado e avaliar o desempenho do Método da Entalpia. Como esperado, foram obtidos os mesmos resultados para a evolução da frente de solidificação.

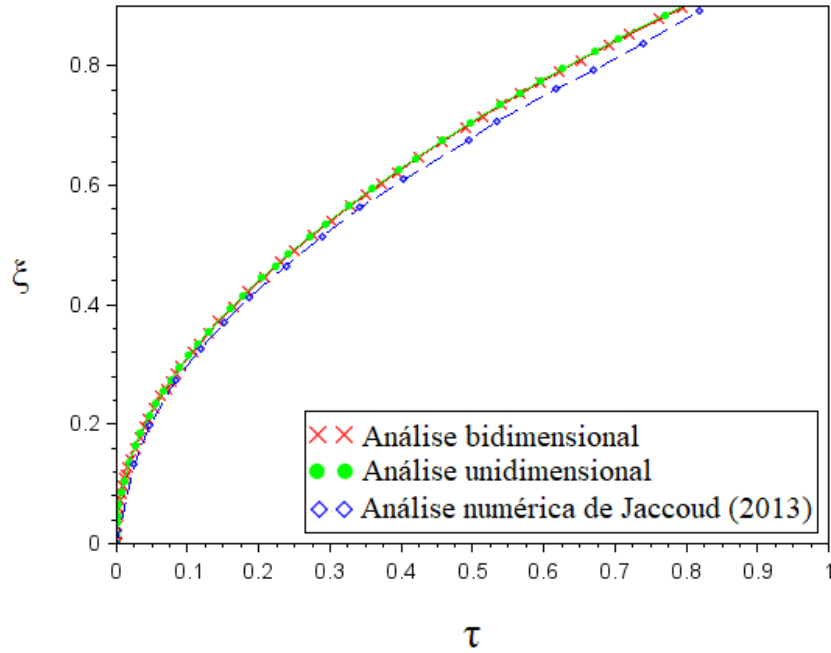


FIG. 5.2: Evolução da frente de solidificação para os casos unidimensional e bidimensional.

Na FIG. 5.2, o eixo das ordenadas e o eixo das abscissas representam, respectivamente, a posição adimensional da frente de solidificação e o tempo adimensional, conforme:

$$\xi = \frac{xz}{L} \quad (5.7)$$

$$\tau = \frac{k t}{\rho_{sol} c_{p,sol} L^2} \quad (5.8)$$

onde xz é a posição da frente de solidificação em uma dada posição no eixo z .

O resultado similar obtido na FIG. 5.2 indica o bom desempenho do Método da Entalpia, quando comparado a outras soluções fracas numéricas mais complexas, como o método da capacidade efetiva, utilizado por Jaccoud (2013), já que a curva obtida na simulação do problema unidimensional possui desvio de aproximadamente 1,79% quando comparada com os resultados de Jaccoud (2013).

Em seguida, para o problema bidimensional transiente de interesse descrito na secção 3.2, foi obtida a evolução da frente de solidificação na direção axial quando $r = 0$, mostrada na FIG. 5.3, e na direção radial quando $y = L$, na FIG. 5.4. Dessa maneira, pode-se observar a

influência das direções axial e radial na condução de calor.

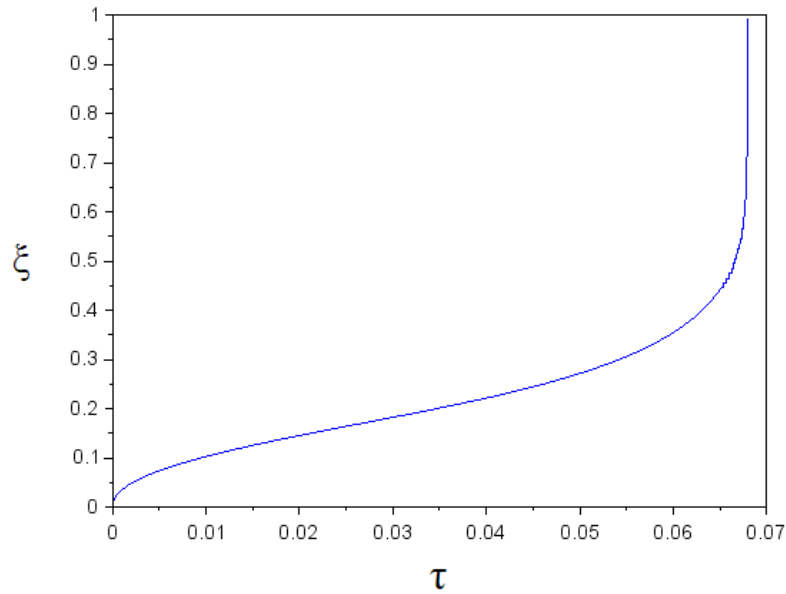


FIG. 5.3: Evolução da frente de solidificação do TNT na direção axial, em $r = 0$.

Na FIG. 5.3, o avanço abrupto da frente de solidificação em aproximadamente $\tau = 0,065$ é devido ao encontro das frentes de solidificação radial e axial.

Para avaliar a evolução da frente de solidificação na direção radial, ao longo de $z = L$, define-se as seguintes grandezas adimensionais:

$$\zeta = \frac{xr}{R} \tag{5.9}$$

$$\eta = \frac{k_s t}{\rho_s c_p R^2} \tag{5.10}$$

onde xr é a posição da frente de solidificação em uma dada posição do eixo r .

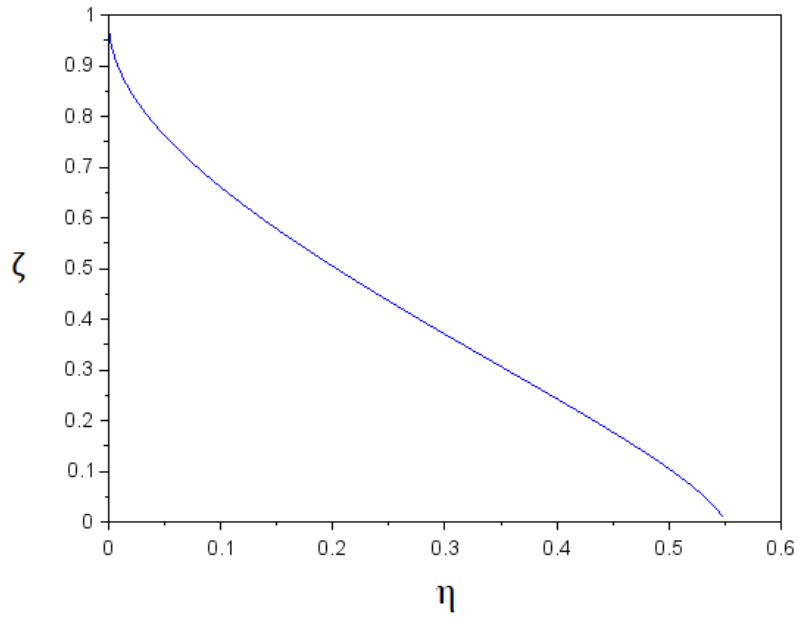


FIG. 5.4: Evolução da frente de solidificação do TNT na direção radial, em $y = L$.

Combinando as curvas das FIGS. 5.3 e 5.4, obtemos curvas isotérmicas que indicam a posição da frente de solidificação no plano bidimensional para cada instante de tempo, conforme o que mostra a FIG. 5.5.

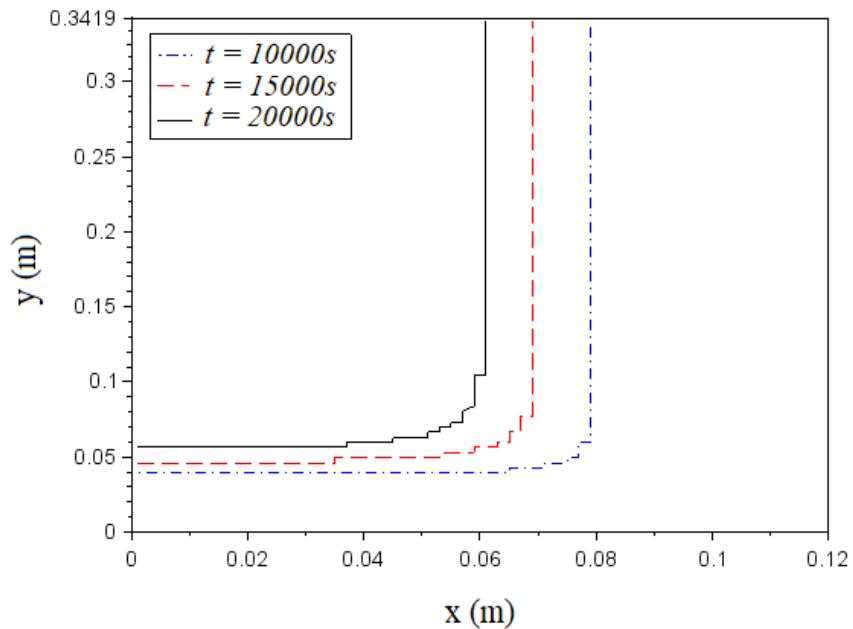


FIG. 5.5: Evolução da frente de solidificação bidimensional do TNT para diferentes instantes de tempo.

Para melhor analisar esse processo, avaliou-se a variação de temperatura em três pontos internos do explosivo e os resultados foram apresentados na FIG. 5.6.

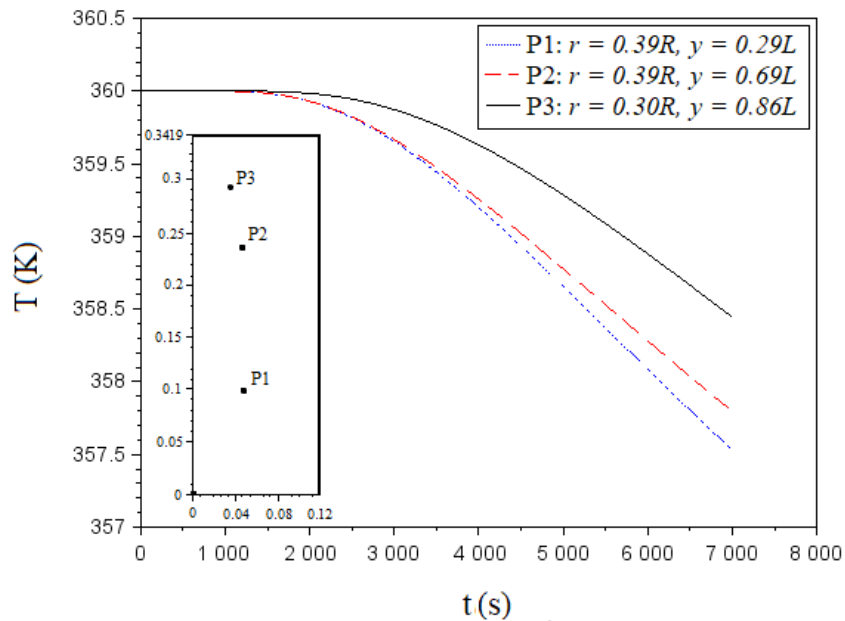


FIG. 5.6: Evolução da temperatura em quatro pontos internos do explosivo.

Ao analisar a FIG. 5.6, percebe-se que a solidificação do explosivo ocorre da lateral em contato com o molde em direção ao centro, sendo a porção de TNT localizada no centro superior do explosivo a última a solidificar.

Na sequência, buscou-se avaliar o efeito do raio interno do molde sobre o processo de solidificação bidimensional. Assim, posto que é bem conhecido que quando o diâmetro tende ao infinito, a solução unidimensional é recuperada. Desta forma, foram realizadas simulações para valores de raio de $R = 0,36m$, $R = 0,72m$ e $R = 1,08m$ e os resultados estão apresentados na FIG. 5.7.

A FIG. 5.7 mostra que o aumento do raio interno do molde diminui a influência das condições de contorno na direção r . Assim, a evolução do perfil da frente de solidificação no tempo tende para a obtida para a situação unidimensional. Para o caso $R = 0,72m$, curvas muito próximas já são obtidas e para $R = 1,08m$, as curvas praticamente se sobrepõem.

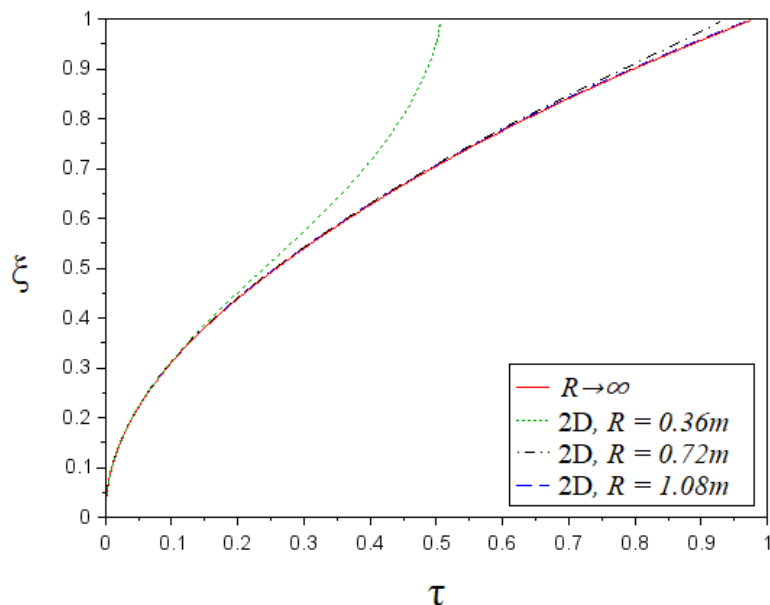


FIG. 5.7: Efeito do raio interno do molde sobre evolução da frente de solidificação do TNT na direção axial, em $r = 0$.

Portanto, a influência da direção r pode ser considerada irrelevante para a evolução da frente de solidificação na direção axial quando:

$$\frac{R}{Z} \geq 3,2 \quad (5.11)$$

5.3 RESULTADOS PARA O PROBLEMA CONJUGADO

Na elaboração do problema conjugado, no qual a espessura da parede do molde é considerada, foram avaliadas três espessuras diferentes: $e = 0,005\text{m}$, $e = 0,01\text{m}$ e $e = 0,02\text{m}$. Considerou-se que a transferência de calor entre o molde e o TNT ocorreu apenas por condução.

Para cada caso, foi analisada a evolução da frente de solidificação na direção axial, ilustradas na FIG. 5.8. Também foi comparada, na FIG. 5.9, as curvas de distribuição de temperatura em diferentes instantes de tempo quando não se considera a presença do molde e para $e = 0,01\text{m}$.

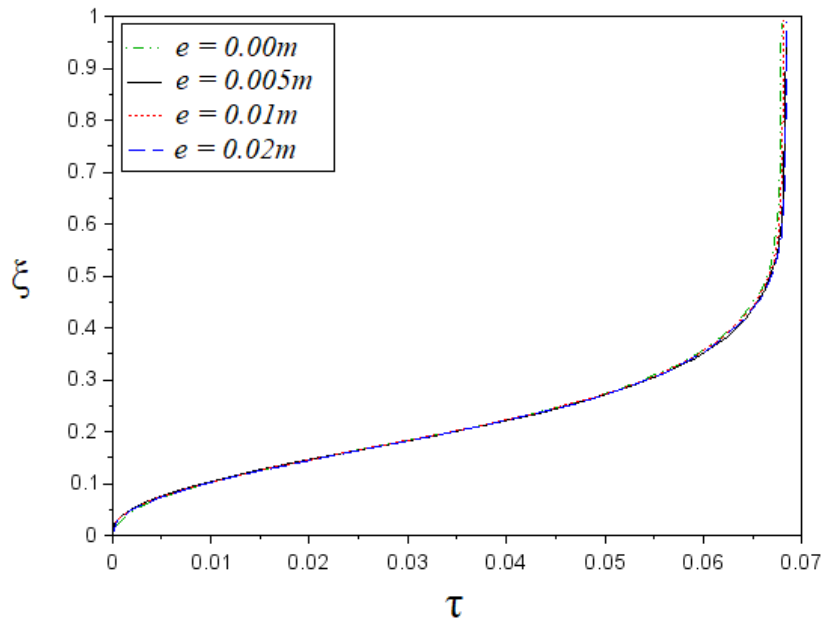


FIG. 5.8: Evolução da frente de solidificação do TNT no problema conjugado na direção axial, em $r = 0$.

A inclusão da espessura da parede do molde na simulação computacional não parece afetar significativamente os resultados obtidos sem a presença da parede. Isso é esperado, de certa forma, devido à elevada condutividade térmica do material do molde quando comparado à condutividade do explosivo.

Como as curvas da FIG. 5.8 se sobrepõem, a fim de obter uma melhor comparação dos resultados, os tempos totais de solidificação em função da espessura do molde são mostrados na TAB. 5.2. Percebe-se que mesmo para a espessura relativamente grande de $e = 0,02\text{m}$, o tempo adicionado para completar o processo de solidificação foi de apenas 0,73%.

TAB. 5.2: Tempo total de solidificação para diferentes espessuras do molde.

Espessura (m)	Tempo total (s)
-	53510.0
0,005	53635.2
0,01	53736.0
0,02	53900.4

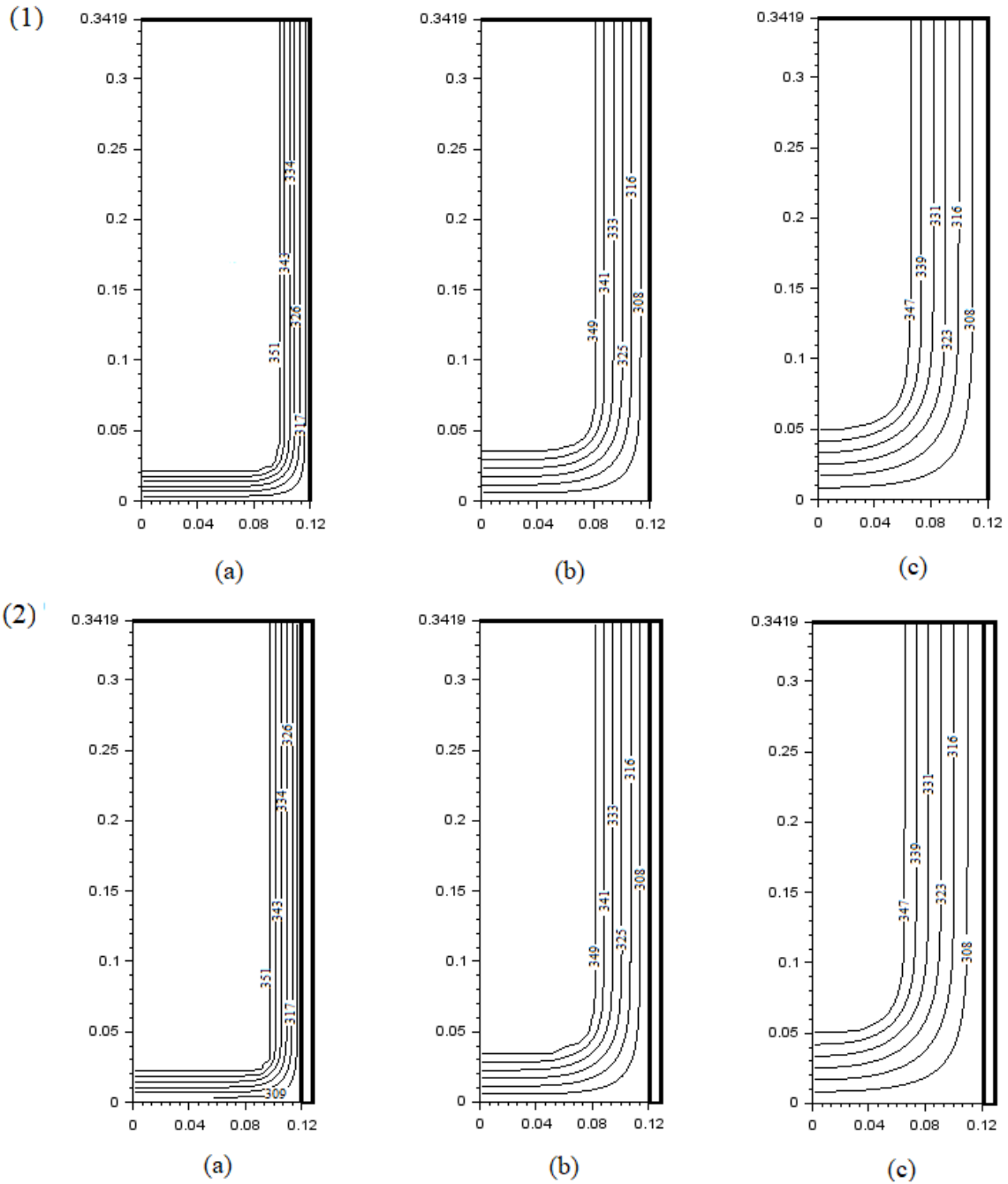


FIG. 5.9: Distribuição de temperatura em (a) $t = 3600s$; (b) $t = 10800s$; (c) $t = 21600s$, quando (1) não é considerada a espessura do molde e (2) para $e = 0,01m$.

Para melhor entender a evolução de transferência de calor do molde, analisem-se suas curvas de temperatura em tempos iniciais do processo de solidificação, conforme mostrado na FIG. 5.10.

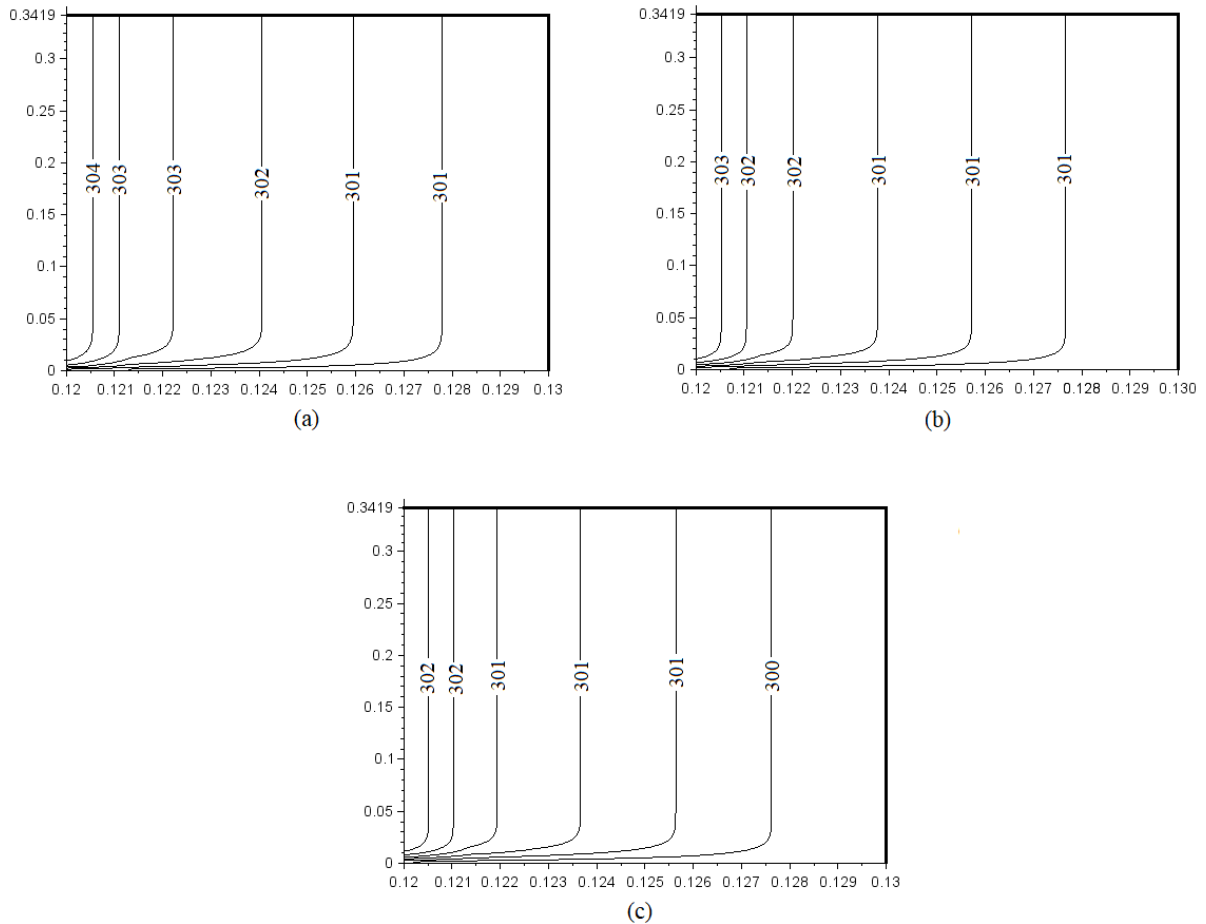


FIG. 5.10: Distribuição de temperatura para molde com espessura $e = 0,01\text{m}$, quando: (a) $t = 60\text{s}$; (b) $t = 120\text{s}$; (c) $t = 240\text{s}$.

As curvas mostradas na FIG. 5.10 indicam que, após 4 minutos de solidificação, o molde praticamente atinge uma temperatura de 300K em todo o seu volume, basicamente recuperando a condição de contorno de temperatura prescrita em $r = R$. Isto corrobora os resultados apresentados anteriormente nas FIGS. 5.8 e 5.9.

Os resultados da FIG. 5.10 também podem ser apresentados conforme representado na FIG. 5.11, que mostra a distribuição de temperatura na direção radial ao longo de toda espessura da parede em $y = L/2$, para os mesmos instantes de tempo avaliados na FIG. 5.10.

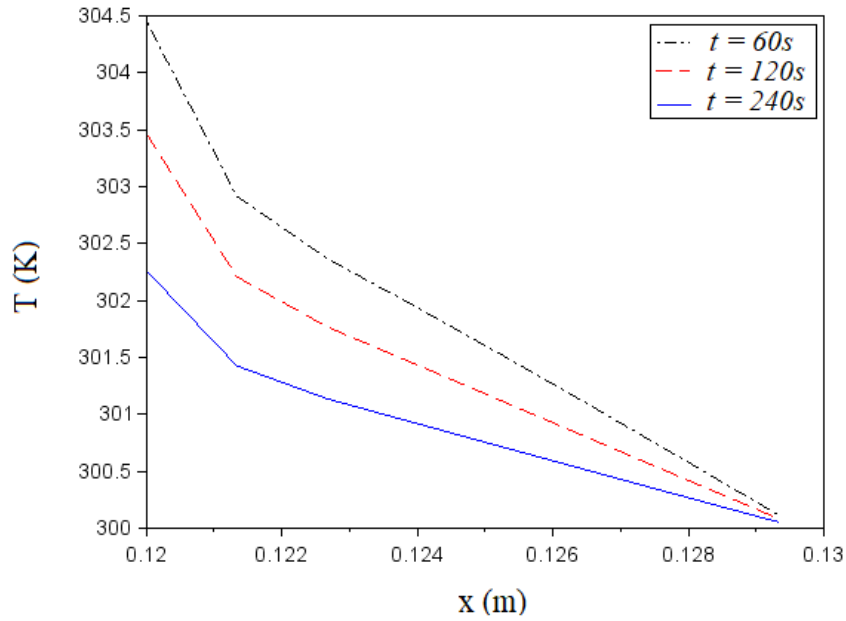


FIG. 5.11. Perfil de temperatura ao longo da espessura da parede de material condutivo, com $e = 0,01\text{m}$.

Em seguida, fixando a espessura da parede em $e = 0,01\text{m}$, buscou-se avaliar qual a influência do diâmetro da granada, ao simular a solidificação para três valores hipotéticos de raios internos, arbitrariamente escolhidos. Os resultados encontram-se nas FIGS. 5.12, 5.13 e 5.14.

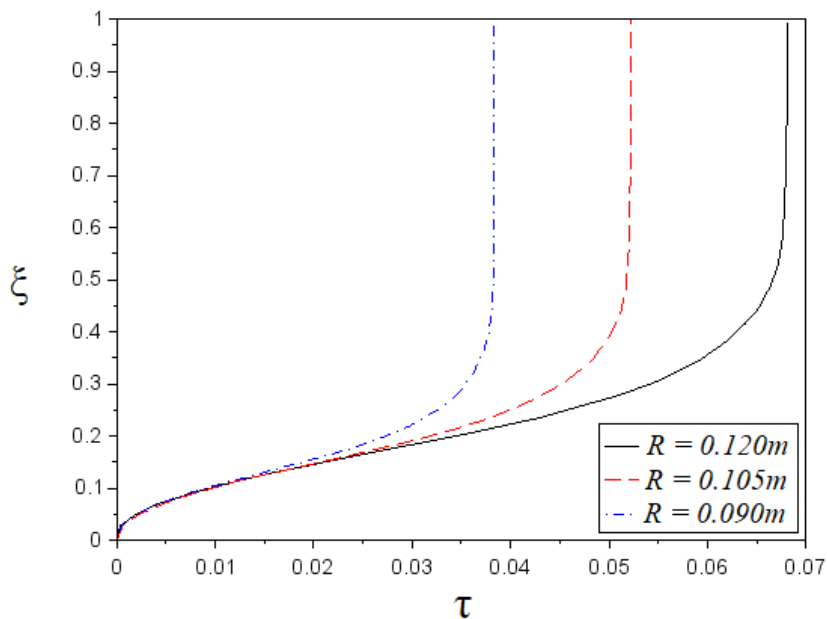


FIG. 5.12: Influência do raio interno do molde na evolução da frente de solidificação do TNT na direção axial, em $r = 0$.

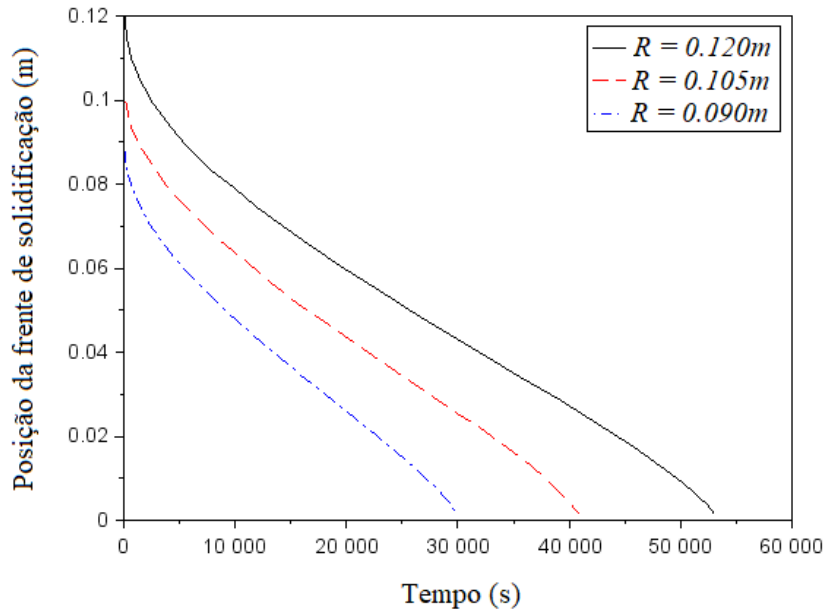


FIG. 5.13: Influência do diâmetro da granada na evolução da frente de solidificação na direção radial, em $y = L$.

As FIGS. 5.12 e 5.13 indicam que, uma pequena mudança no diâmetro interno da granada, causa uma mudança significativa no tempo total de solidificação, uma vez que o aumento do diâmetro interno aumenta a massa do material a ser solidificado sob as mesmas condições de contorno.

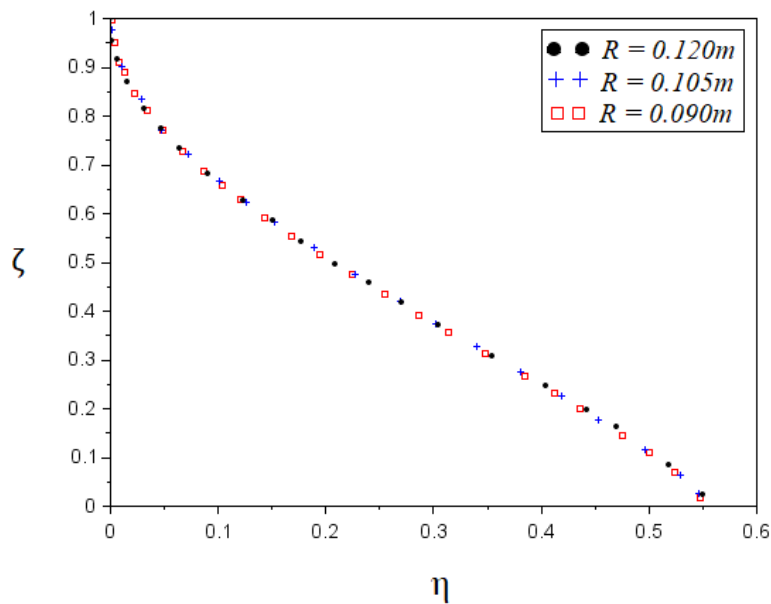


FIG. 5.14: Adimensionalização da influência do raio interno do molde na evolução da frente de solidificação do TNT na direção radial, em $y = L$.

Finalmente, avaliou-se a influência da convecção natural e forçada no processo de solidificação, para a situação de espessura do molde igual a 0,01m, estando superfície direita, em $r = R+e$, exposta a uma corrente de ar. Um coeficiente de transferência de calor de $49,3179\text{W}/(\text{m}^2\text{K})$ foi considerado para convecção forçada, enquanto o comportamento de convecção natural foi aproximado por convecção forçada com coeficiente de transferência de calor muito baixo, $5,1067\text{W}/(\text{m}^2\text{K})$, valores considerados por Soares (2017). Os resultados obtidos são mostrados na FIG. 5.15.

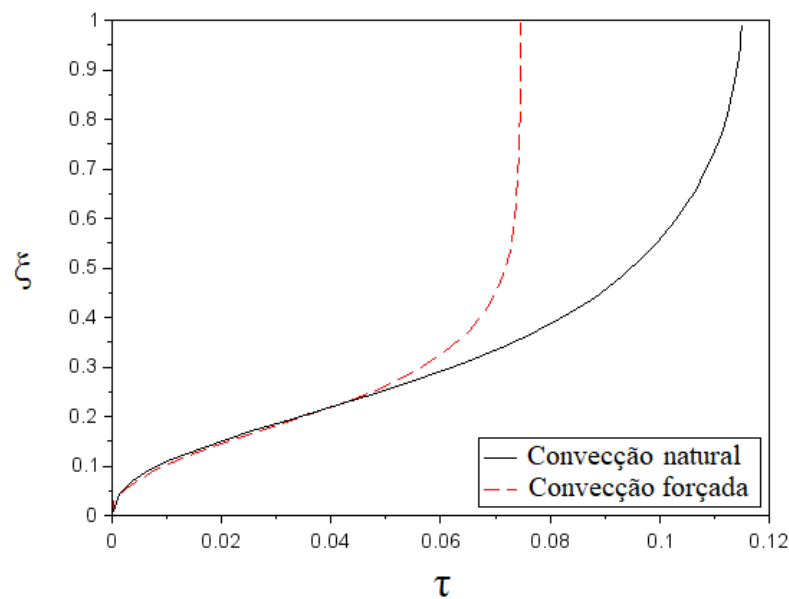


FIG. 5.15: Influência da convecção natural e forçada na evolução da frente de solidificação do TNT na direção axial, em $r = 0$.

Percebe-se, na FIG. 5.15, que o aumento do coeficiente convectivo diminui o tempo total de solidificação. Esse fenômeno pode ser melhor observado quando se analisa a distribuição de temperaturas para ambos os casos em diferentes instantes de tempo, como mostrado na FIG. 5.16.

Uma vez que o diâmetro da munição não pode ser alterado, devido a especificações comerciais, o controle do processo de solidificação alterando o fluxo convectivo pode ser alcançado na prática pela imposição de valores adequados para a temperatura ambiente e velocidade do ar nos ventiladores responsáveis por promover a convecção forçada na mesa de carregamento da granada. Assim, o produto final pode atender aos padrões de qualidade exigidos pela indústria de defesa.

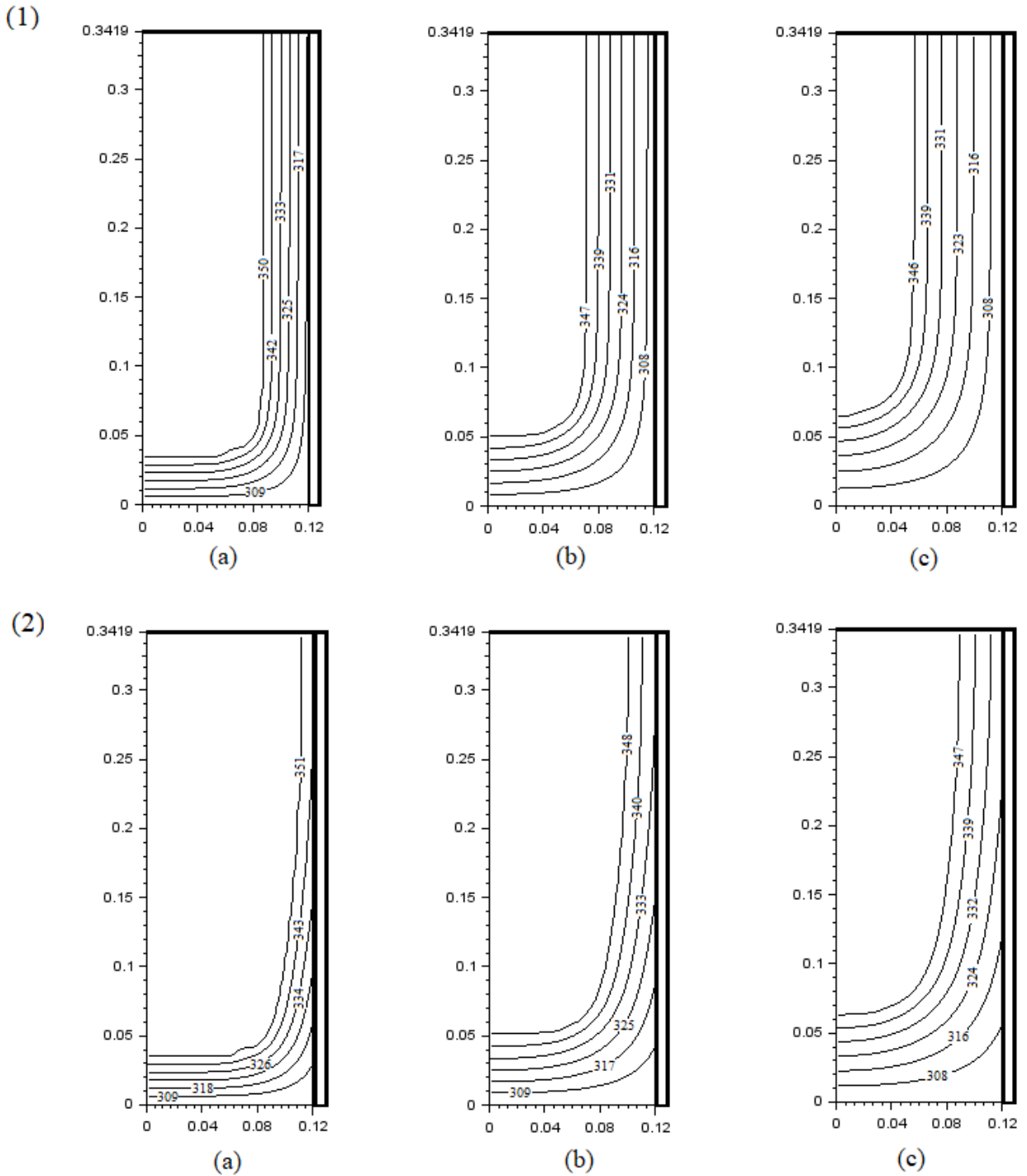


FIG. 5.16: Distribuição de temperatura em (a) $t = 10800s$; (b) $t = 21600s$; (c) $t = 32400s$, para (1) convecção forçada e (2) convecção natural.

Por fim, avaliou-se o comportamento do processo de solidificação ao substituir a parede do molde por um material com condutividade térmica semelhante a do TNT. Escolheu-se o Teflon, cujas propriedades termofísicas encontram-se na TAB. 5.3.

TAB. 5.3: Propriedades termofísicas do molde de Teflon.

Propriedades	Valor	Unidade
Massa específica	2160	kg/m ³
Condutividade térmica	0,25	W/m K
Calor específico	1200	J/kg K

Fonte: DuPont Teflon PTFE Properties Handbook.

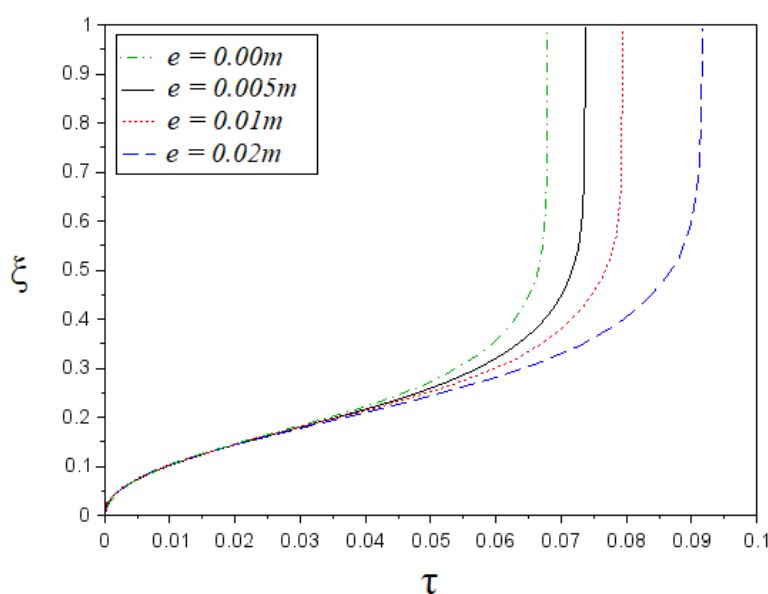


FIG. 5.17: Evolução da frente de solidificação do TNT na direção axial, em $r = 0$, com parede de Teflon.

Nota-se pela FIG. 5.17, que o molde de Teflon atrasa o processo de solidificação, ao desempenhar o papel de isolante térmico, retardando a influência da condição de contorno da parede no interior do TNT a ser solidificado. Esse efeito é melhor observado na FIG. 5.18, que apresenta as curvas de temperatura no TNT em diferentes instantes de tempo. Dessa forma, quanto mais espessa a parede do molde, maior o tempo total de solidificação.

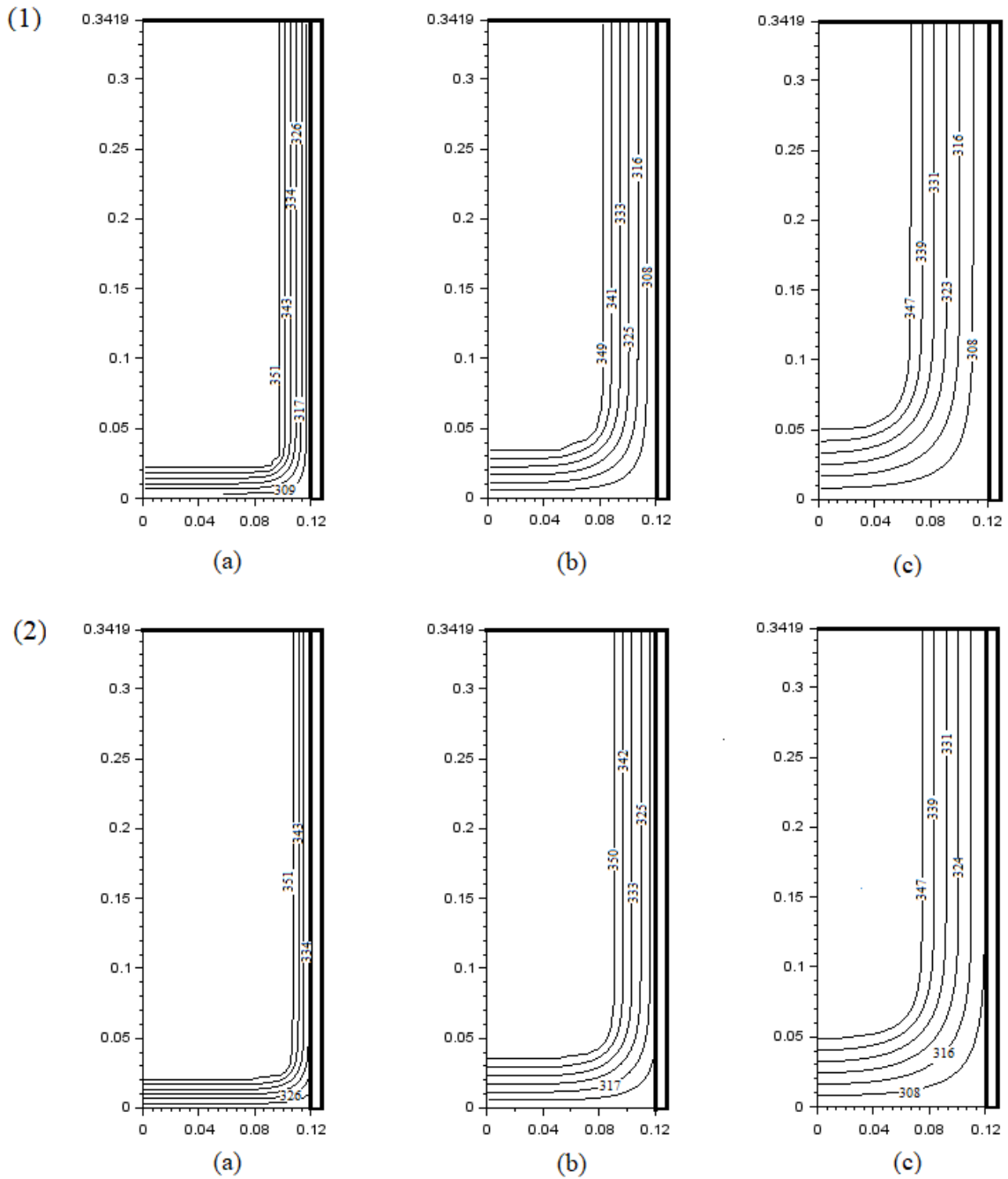


FIG. 5.18: Distribuição de temperatura em (a) $t = 3600s$; (b) $t = 10800s$; (c) $t = 21600s$, para (1) molde de material metálico e (2) molde de Teflon.

Além disso, ao avaliar o perfil de temperatura ao longo da parede de Teflon com espessura $e = 0,01m$, observa-se, conforme indicado na FIG. 5.19, que a queda de temperatura na parede é mais lenta, quando comparado ao molde de material condutivo, FIG. 5.11.

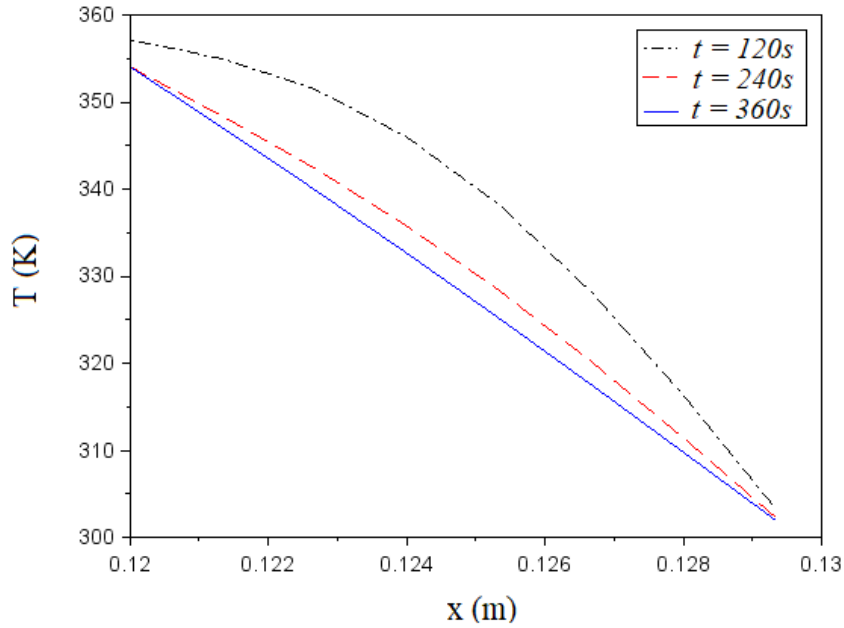


FIG. 5.19. Perfil de temperatura ao longo da espessura da parede de Teflon, com $e = 0,01\text{m}$.

Conforme apresentado na FIG. 5.19, para o molde de Teflon, após 360s, sua temperatura máxima ao longo de sua espessura é ainda próxima a 355K, enquanto que, para o molde de material condutor, passados 240s, o molde possui temperatura máxima de 302,5 K em sua espessura, FIG. 5.11.

Uma maneira de avaliar qualitativamente a transferência de calor é por meio do conceito de resistência térmica. Assim, para o caso apresentado na FIG. 3.3, a equação que define a resistência térmica ($R_{t\acute{e}rmica}$) para o cilindro é dada por:

$$R_{t\acute{e}rmica} = \frac{\ln\left(\frac{r_e}{r_i}\right)}{2\pi kL} \quad (5.12)$$

e o coeficiente global de transferência de calor (q) é definido por:

$$q = \frac{(T_{wall} - T_i)}{R_{t\acute{e}rmica}} \quad (5.13)$$

Uma vez que as dimensões são as mesmas para as simulações com ambos os materiais da parede, podemos escrever as resistências em função de uma constante λ qualquer. Assim,

$$R_{condutor} = \frac{\lambda}{16,27} = 0,0615 \lambda$$

$$R_{teflon} = \frac{\lambda}{0,25} = 4 \lambda$$

E, portanto:

$$q_{condutor} = \frac{16,27 \Delta T}{\lambda}$$

$$q_{teflon} = \frac{0,25 \Delta T}{\lambda}$$

Ou seja, o material condutor analisado oferece baixa resistência à transferência de calor e sua transferência de calor ocorre rapidamente. Enquanto o teflon pode ser considerado um isolante térmico, devido à baixa condutividade térmica e consequente baixa transferência de calor.

5.4 SIMULAÇÕES DE CALIBRES PADRÃO DO EXÉRCITO BRASILEIRO

Finalmente, realizaram-se simulações computacionais do processo de solidificação do TNT em munições de calibres usados pelo Exército Brasileiro, já que os resultados já apresentados se referem a granadas hipotéticas. Foram escolhidos os tiros de morteiro de calibre 60mm, 81mm e 120mm.

Nos três casos, a espessura da parede de material condutivo adotada foi de $e = 0,01\text{m}$ e a condição de contorno na superfície lateral direita foi de temperatura prescrita, com $T_{wall} = 300\text{K}$. Devido ao calibre caracterizar a dimensão do raio externo da munição, a espessura do molde deve ser decrescida do raio total, ou seja, para a munição de calibre 60mm, por exemplo, o raio interno que corresponde ao TNT que será solidificado tem valor de 0,02m.

Na FIG. 5.20, encontram-se a evolução da frente de solidificação na direção axial, ao longo do eixo de simetria, em $r = 0$.

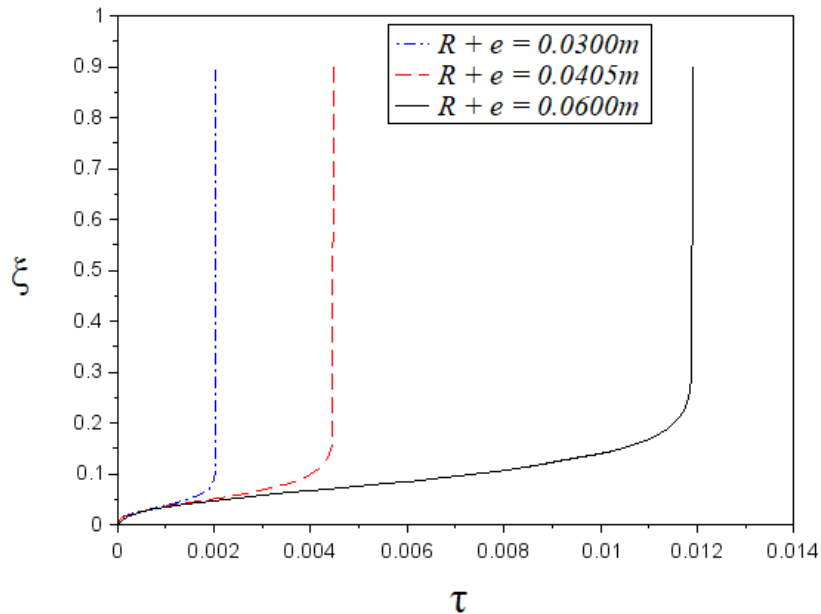


FIG. 5.20. Evolução da frente de solidificação na direção axial para as munições calibre 60, 81 e 120mm, em $r = 0$.

Mais uma vez, prova-se que, devido à baixa condutividade térmica do TNT, o aumento do diâmetro interno da munição influencia consideravelmente no tempo total do processo. O aumento de 63% no raio interno da munição resultou em um aumento de 166% no tempo total de solidificação, diferenças essas observados entre os calibres 81mm e 120mm.

Também vale ressaltar que a espessura da parede de material condutivo não afeta no tempo total de solidificação, uma vez que, conforme mostrado na FIG. 5.11, após os instantes iniciais, toda a espessura da parede possui temperatura constante de 300K. Assim, o aumento tempo de solidificação ocorre, pois quanto maior o calibre da munição, maior a quantidade de TNT a ser solidificado.

A FIG. 5.21 apresenta a evolução da frente de solidificação na direção axial, em $y = L$, para essas três munições. Esses resultados são apresentados na FIG. 5.22 nas grandezas adimensionais.

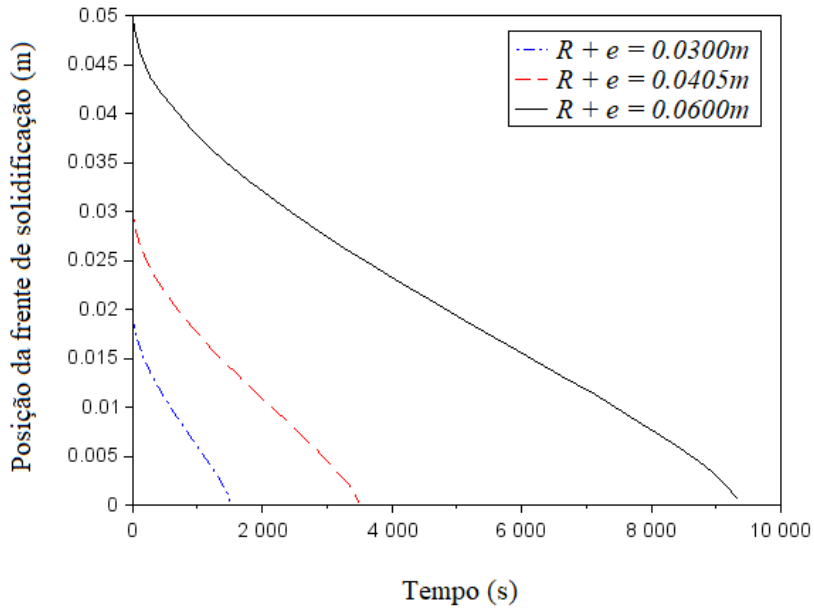


FIG. 5.21. Evolução da frente de solidificação na direção axial para as calibre 60, 81 e 120mm, em $y = L$.

Observam-se, na FIG. 5.22, os mesmos resultados apresentados na FIG. 5.14, com as três curvas coincidentes. Isso ocorre visto que os três calibres possuem o mesmo perfil de solidificação na direção radial, que é proporcional ao raio interno.

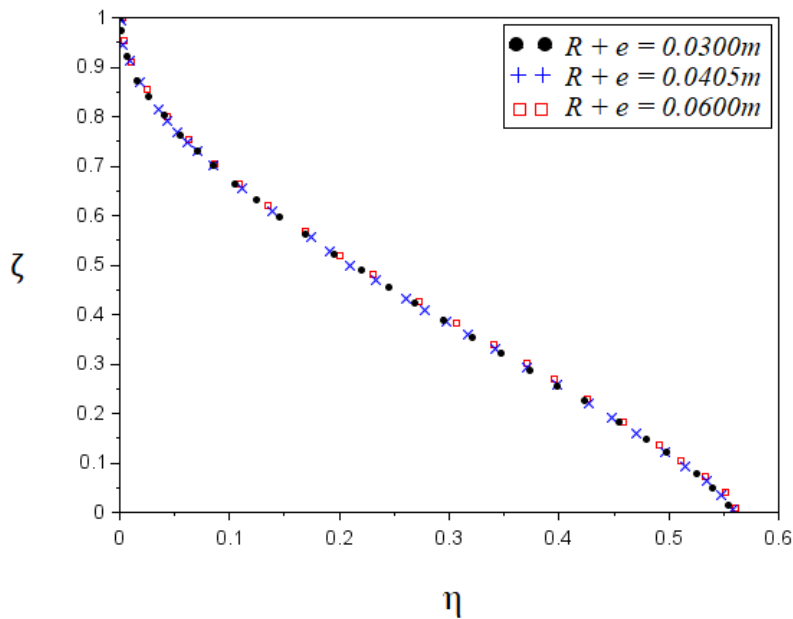


FIG. 5.22. Evolução da frente de solidificação na direção axial para as calibre 60, 81 e 120mm, em $y = L$, na forma adimensional.

6 TÉCNICA LEVENBERG-MARQUARDT

Nesse capítulo são apresentados os resultados obtidos para a estimativa do parâmetro de transferência de calor por convecção entre o molde e o ambiente externo. Esse parâmetro é importante, pois ele é uma das variáveis do processo de solidificação que pode ser facilmente alterada, de modo a obter-se a qualidade final da peça solidificada. No problema inverso, será utilizado o método determinístico de Levenberg-Marquardt. Também serão apresentados a fundamentação teórica e o algoritmo que caracteriza esse método.

6.1 ASPECTOS TEÓRICOS

Na solução do problema inverso em estudo, estima-se o coeficiente convectivo de transferência de calor por convecção entre a parede do molde e o meio externo, utilizando a técnica determinística de Levenberg-Marquardt. Dessa forma, ao aplicar o problema inverso para um problema real, deseja-se que futuramente seja possível especificar a velocidade ótima do ar dos ventiladores da mesa de carregamento, para obter-se a melhor qualidade do TNT solidificado.

A técnica é baseada na minimização da função objetivo, também conhecida norma dos mínimos quadrados (Özisik & Orlande, 2000). A frente de solidificação nem sempre é de fácil acesso em um experimento, sendo assim, optou-se por analisar a temperatura. Para esse problema de transferência de calor, a função objetivo é baseada na temperatura medida em pontos internos do explosivo e definida por:

$$S(h_{conv}) = \sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^I \left[T_{exp_{i,m}} - T_{num_{i,m}}(h_{conv}) \right]^2 \quad (6.1)$$

onde o subíndice *exp* corresponde às temperaturas obtidas pela solução do problema direto ou experimentalmente, o subíndice *num* corresponde às temperaturas estimadas, em função do parâmetro que se deseja obter, *M* é o número de sensores e *I* o total de medidas por sensor.

Assim, a cada iteração, um passo adequado é dado, estabelecendo um procedimento iterativo para minimizar a função objetivo $S(h_{conv})$. O procedimento iterativo é implementado até que o Princípio da Discrepância seja satisfeito (Özisik & Orlande, 2000):

$$S(h_{conv}^{k+1}) \leq 10^{-5} \text{ (K}^2\text{)} \quad (6.2)$$

ou que, após 10 iterações consecutivas:

$$h_{conv}^{k+1} - h_{conv}^k \leq 10^{-8} \text{ (W/m}^2\text{ K)} \quad (6.3)$$

Para evitar o crime inverso, uma vez que ambas as temperaturas medidas e estimadas são obtidas pela solução numérica, introduz-se diferentes níveis de ruído (Zhang et al., 2009). Dessa forma:

$$Y_{exp} = Y_{num} + \omega E Y_{max} \quad (6.4)$$

onde Y_{exp} são os dados pseudo-experimentais, ω é uma variável randômica de distribuição normal entre 0 e 1, E é um nível de ruído arbitrário e Y_{max} é o máximo valor encontrado para os dados numéricos, Y_{num} (Özisik & Orlande, 2000). Para o presente problema, considerou-se E igual a 1% e 5%.

6.2 MATRIZ DE SENSIBILIDADE

Para resolver o problema inverso de estimativa de parâmetro utilizando técnicas determinísticas, é necessário calcular a matriz Jacobiana ou matriz de sensibilidade, $J(h_{conv})$, definida por:

$$J(h_{conv}) = \left[\frac{\partial T^T(h_{conv})}{\partial h_{conv}} \right]^T \quad (6.5)$$

Explicitamente, a matriz de sensibilidade é escrita como:

$$J(h_{conv}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \bar{T}_1^T}{\partial h_{conv}} \\ \frac{\partial \bar{T}_2^T}{\partial h_{conv}} \\ \vdots \\ \frac{\partial \bar{T}_I^T}{\partial h_{conv}} \end{bmatrix} \quad (6.6)$$

$$\text{onde } \frac{\partial T_i^T}{\partial h_{conv}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial T_{i1}}{\partial h_{conv}} \\ \frac{\partial T_{i2}}{\partial h_{conv}} \\ \vdots \\ \frac{\partial T_{iM}}{\partial h_{conv}} \end{bmatrix}.$$

Os elementos da matriz de sensibilidade são definidos pela derivada primeira da temperatura estimado no tempo t_i em relação ao parâmetro desconhecido h_{conv_j} , ou seja:

$$J_{ij} = \frac{\partial T_i}{\partial h_{conv_j}} \quad (6.7)$$

Os coeficientes de sensibilidade, J_{ij} , definidos pela Eq. (6.7), medem a variação da temperatura estimada em relação a variações no parâmetro h_{conv_j} . Uma pequena magnitude de J_{ij} indica que uma grande variação no parâmetro causa uma pequena variação em T_i . Dessa forma, é muito difícil estimar o parâmetro, uma vez que, basicamente, o mesmo valor de temperatura será obtido para um grande intervalo de valores de h_{conv_j} .

Portanto, para implementar o método iterativo utilizando a técnica de Levenberg-Marquardt, a matriz de identificação $J^T J$ não pode ser singular, ou seja:

$$|J^T J| \neq 0 \quad (6.8)$$

A condição apresentada na Eq. (6.8) é denominada Condição de Identificação. Uma vez que o determinante de $J^T J$ é zero ou aproximadamente zero, o problema inverso é denominado mal-condicionado e o parâmetro h_{conv_j} não pode ser determinado. Portanto, é desejável que os coeficientes de sensibilidade sejam linearmente independentes e com grande magnitude, para que o problema inverso não seja suscetível a erros de medição e seja obtida uma estimativa precisa para o parâmetro.

Para problemas inversos lineares, a matriz de sensibilidade não é função do parâmetro desconhecido, enquanto que, problemas não-lineares possuem certa dependência entre a matriz de sensibilidade e o vetor de parâmetros desconhecidos.

Existem diferentes maneiras para calcular os coeficientes de sensibilidade, entre eles: a solução analítica direta, problema de valor de contorno e aproximação por diferenças finitas.

Neste trabalho, optou-se pelo uso da aproximação por diferenças finitas, utilizando diferenças centrais, na qual:

$$J_{ij} \approx \frac{T_{num_i}(h_{conv}+\Delta) - T_{num_i}(h_{conv}-\Delta)}{2\Delta h_{conv}} \quad (6.9)$$

onde Δ é uma pequena variação no valor do parâmetro (Özisik & Orlande, 2000).

6.3 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DA TÉCNICA LEVENBERG-MARQUARDT

A técnica de Levenberg-Marquardt, originalmente desenvolvida para aplicação em problemas de estimação de parâmetros não-lineares, também tem sido aplicada com sucesso na solução de problemas lineares mal-condicionados (Özisik & Orlande, 2000).

A condição necessária para minimizar a função objetivo, $S(h_{conv})$, pode ser representado pelo gradiente de $S(h_{conv})$.

$$[\nabla S(h_{conv}^k)] = -2 \sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^I \frac{\partial T_{num_{i,m}}^k}{\partial h_{conv_j}} [T_{exp_{i,m}} - T_{num_{i,m}}(h_{conv}^k)] \quad (6.10)$$

Utilizando a definição de matriz de sensibilidade, a Eq. (6.10) pode ser reescrita como:

$$-2J^T(h_{conv})[T_{exp} - T_{num}(h_{conv})] = 0 \quad (6.11)$$

Uma vez que problemas inversos de transferência de calor são geralmente mal-condicionados, a técnica Levenberg–Marquardt utiliza o seguinte processo iterativo:

$$h_{conv}^{k+1} = h_{conv}^k + [(J^k)^T J^k + \mu^k \Omega^k]^{-1} (J^k)^T [T_{exp} - T_{num}(h_{conv}^k)] \quad (6.12)$$

onde μ_k é um escalar positivo denominado parâmetro de amortecimento e Ω_k é uma matriz diagonal.

O propósito da matriz $\mu_k \Omega_k$ é amortecer as oscilações e instabilidades do problema, ao adicionar um valor aos componentes da matriz $J^T J$. O parâmetro de amortecimento é maior no

começo das iterações, na região da estimativa inicial do parâmetro, sendo gradualmente reduzido no avanço do processo iterativo.

Existem variações na técnica Levenberg-Marquardt, em relação á maneira escolhida para calcular Ω_k . Neste trabalho, a matriz diagonal é definida por (Özisik & Orlande, 2000):

$$\Omega^k = \text{diag}[(J^k)^T J^k] \quad (6.13)$$

6.4 RESULTADOS DO PROBLEMA INVERSO

Para o problema de solidificação conjugado, com condição de contorno em $r = R+e$ de convecção e espessura da parede de Teflon de $e = 0,01\text{m}$, aplicou-se o método determinístico de Levenverg-Marquardt, para estimar o coeficiente de transferência de calor convectivo entre a parede do molde e o ambiente externo.

O problema inverso foi aplicado no intervalo de tempo $5000 < t < 8000\text{s}$ com passo de 5s. A temperatura foi medida em dez posições, correspondendo a 10 sensores, localizados nos pontos indicados na FIG. 6.1.

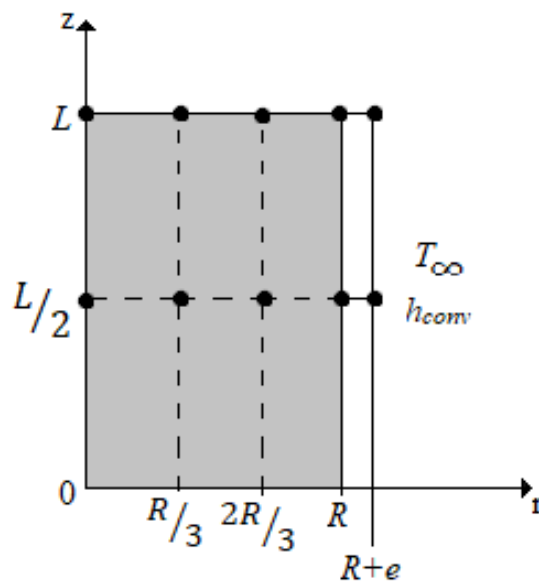


FIG. 6.1. Localização dos sensores de temperatura para aplicação do problema inverso

A função objetivo é determinada pela temperatura. Avaliou-se o valor do parâmetro estimado, o número de iterações e o tempo computacional até a convergência para cada

método. A TAB. 6.1 apresenta os resultados obtidos para diferentes níveis de ruído aplicados aos dados experimentais. Em todos os casos, considerou-se a estimativa inicial de $10\text{W/m}^2\text{ K}$.

TAB. 6.1: Coeficientes convectivos estimados pela técnica Levenberg-Marquardt.

Nível de ruído	h_{conv} estimado (W/m² K)	Função objetivo (K^2)	Número de iterações	Tempo Computacional (s)
0%	5,1063	$3,825 \cdot 10^{-07}$	4	12717,90
1%	5,0929	44,9216	17	47782,67
5%	5,0126	1712,9698	18	50650,62

Os resultados do problema inverso foram verificados, uma vez que o coeficiente de transferência de calor convectivo foi corretamente estimado para dados pseudo-experimentais sem ruído. Como esperado, a adição de ruído torna a estimativa do coeficiente menos precisa. Além disso, aumentou-se o número de iterações até que a convergência fosse alcançada e, conseqüentemente, o tempo computacional.

7 CONCLUSÃO

O presente trabalho tem como objetivo a simulação computacional de um modelo físico-matemático clássico do processo de solidificação do TNT, de modo a avaliar a influência do material e espessura do molde e das condições de resfriamento, bem como o diâmetro interno do molde.

Conforme explorado na revisão bibliográfica, existe uma grande variedade de abordagens matemáticas aplicáveis ao problema proposto. No presente trabalho, aplicou-se o Método da Entalpia para solução do problema direto de solidificação bidimensional transiente, o qual foi resolvido numericamente pelo Método dos volumes finitos, com um esquema explícito.

O método de entalpia é uma técnica muito simples para lidar com problemas de mudança de fase, com a vantagem de evitar a necessidade de rastrear a posição de contorno móvel como em outros métodos numéricos, pois os efeitos térmicos são incorporados as propriedades termofísicas. E, após comparar a evolução da frente de solidificação do caso unidimensional com resultados da literatura, provou-se que o método é eficaz, quando comparado a outras soluções fracas numéricas mais complexas.

Ao avaliar três pontos internos do explosivo, corroborou-se o perfil de solidificação do TNT, das superfícies laterais em direção ao centro, sendo o centro superior à última porção a ser solidificada.

Em uma análise posterior, concluiu-se que, aumentando sistematicamente o raio interno do molde, mantendo a altura fixa, estabeleceu-se uma relação entre raio e altura a influência da direção r pode ser considerada irrelevante para a evolução da frente de solidificação na direção axial. Foi determinado que, para valores maiores ou iguais a $R = 3,2L$, a solução bidimensional recupera os resultados obtidos para o processo unidimensional para o problema estudado, ao se avaliar a evolução da frente de solidificação ao longo do eixo da cavidade cilíndrica.

Com relação ao problema conjugado, concluiu-se que a espessura do molde influencia o processo de transferência de calor, dependendo do material do qual o molde é feito. Quando é considerado o molde com condutividade térmica significativamente maior que a do TNT, após os instantes iniciais, todo o domínio do molde já possui temperatura uniforme, recuperando a condição de temperatura prescrita. Entretanto, para o molde de Teflon, a espessura do molde atrasa o processo de solidificação, ao desempenhar o papel de isolante

térmico, retardando a influência da condição de contorno da parede no interior do TNT a ser solidificado.

Avaliou-se também a influência do raio interno do molde e concluiu-se que, uma pequena mudança no diâmetro interno do molde, causa uma mudança significativa no tempo total de solidificação.

Ao analisar a influência da condição de contorno convectiva, pode-se observar que o aumento do coeficiente convectivo diminui o tempo total de solidificação. Esse parâmetro é importante para o processo de solidificação, pois o coeficiente convectivo é uma das variáveis podem ser facilmente alteradas, ao impor valores adequados para a temperatura ambiente e para a velocidade do ar nos ventiladores responsáveis por promover a convecção forçada na mesa de carregamento da granada, garantindo a qualidade final da munição. Por isso, utilizou-se a técnica determinística de Levenberg-Marquardt para estimativa do coeficiente de transferência convectivo entre o molde e o ambiente externo. Os resultados do problema inverso foram satisfatórios ao estimar os dados pseudo-experimentais com e sem ruídos.

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

- 1- Avaliar o efeito da porosidade no processo de solidificação, aplicada ao modelo bidimensional desenvolvido.
- 2- Aplicar técnicas de problema inverso para estimativa do valor da porosidade na solidificação do TNT.
- 3- Aplicar o modelo desenvolvido á geometrias assimétricas mais complexas.
- 4- Estender o problema estudado para o caso com propriedades termofísicas variáveis com a temperatura em cada fase.

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANNAPRAGADA, S. R., SUN, D. & GARIMELLA, S. **Analysis and Suppression of Base Separation in the Casting of a Cylindrical Ingot.** Heat Transfer Engineering, 29(4):385–394, 2008.
- AYASOUFI, A. **Numerical Simulation of heat conduction with melting and/or freezing by space-time conservation element and solution element method,** Ph.D. Thesis, University of Toledo, Toledo, 2004.
- BELL, G. E. & WOOD, A.S. **On the performance of enthalpy method in the region of a singularity.** International Journal for Numerical Methods in Engineering, 19: 1583-92, 1983.
- BOURDILLON, A.; VERDIN, P & THOMPSON, C. **Numerical simulations of water freezing processes in cavities and cylindrical enclosures.** Applied Thermal Engineering, 75: 839-855, 2015.
- CALDEIRA, A. B., LEIROZ, A. J. K. & ORLANDE, H. R. B. **Asymmetric Rectangular Obstruction Thermal Effects on Entrance Regions of Flat Plate Channels.** COBEM, 18th International Congress of Mechanical Engineering, 2005.
- CHEN, C. & SHIUAN, J. **Numerical Simulation of Casting Explosives in Shell.** Propellants, Explosives, Pyrotech, 17: 20–26, Fevereiro 1992.
- DUPONT. **Teflon PTFE fluoropolymer resin, Properties Handbook.**
- EYRES, N. R., HARTREE, N. R., INGHAM, J., JACKSON, R., SARJANT, R. J. & WAGSTAFF, J. B. **The Calculation of Variable Heat Flow in Solids.** Phil. Trans. R. Soc. Lond. A, 240: 1–57, 1946.
- HU, H. & ARGYROPOULOS, S. **Mathematical modelling of solidification and melting: A review.** Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 4(4): 371–396, Julho 1996.

- JACCOUD, B.R. **Solidificação do TNT: Solução Numérica do Modelo de Transferência de Calor e Problema Inverso de Estimativa da Porosidade**, Dissertação de Mestrado, Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, Brasil, 2013.
- JIN, C. & LI, C. **The Solidification Process of Melt Casting Explosives in Shell**. Propellants, Explosives, Pyrotech, 23: 137–141, Junho 1998.
- LU, J.H., LEI, H.Y. & DAI, C.S. **A unified thermal lattice Boltzmann equation for conjugate heat transfer problem**. International Journal of Heat and Mass Transfer, Part B, 126: 1275-1286, Novembro 2018.
- KUMAR, A.S. & RAO, V.D. **Modeling of Cooling and Solidification of TNT based Cast High Explosive Charges**. Defence Science Journal, 64(4): 339-343, 2014.
- MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. LTC, Rio de Janeiro, 1995.
- MUDRYYY, R., JIA, S. & NASTAC, L. **Recent advances on the solidification processing of cast energetic materials**. Shape Casting: 5th International Symposium, 67–74, 2014.
- NEJAD, A., MAGHREBI, M., TABRIZI, H., HENG, Y., MHAMDI, A. & 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.
- ÖZISIK, M. N. **Heat conduction**. John Wiley & Sons, Nova York, 2 edition, 1993.
- ÖZISIK, M. N. & ORLANDE, H. R. B. **Inverse Heat Transfer Fundamentals and Applications**. Taylor & Francis, Nova York, 2000.
- PATANKAR, S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**, Taylor & Francis, 1980.

- POIRIER, D. & 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.
- SANTOS, C.A. **Influência das taxas direcionais de resfriamento na evolução da solidificação em sistemas metal/molde.** Dissertação de Mestrado, UNICAMP, 1997.
- SANTOS, C.A., QUARESMA, J.M. & GARCIA, A. **Determination of transient interfacial heat transfer coefficients in chill mold castings.** Journal of Alloys and Compounds, 319 (1-2): 174-186, 2001.
- SHAMSUNDER, N. & SPARROW, E. M. **Analysis of multidimensional conduction phase change via the enthalpy model.** Journal of Heat Transfer, 97: 333-340, 1975.
- SANHYE, W., DUBOIS, C., LAROCHE, I & PELLETIER, P. **Numerical Modeling of the Cooling Cycle and Associated Thermal Stresses in a Melt Explosive Charge,** AIChE Journal, 62(10): 3797-3811, 2016.
- SLODICKA, M. & DE SCHEPPER, H. **Determination of the heat-transfer coefficient during solidification of alloys.** Comput. Methods Appl. Mech. Eng., 194: 491 – 498, 2005.
- SOARES, A.C. **Modelagem numérica da solidificação em molde: aplicação a granadas de grande calibre.** Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 2017.
- SUN, D. & 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. & NAIK, N. **Numerical and Experimental Investigation of the Melt Casting of Explosives.** Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 30:369–380, Outubro 2005.

- SWAMINATHAN, C.R. & VOLLER, V.R. **A General Enthalpy Method for Modeling Solidification Processes.** Metallurgical Transactions B, 23: 651-664, 1992.
- UDAYRAJ, U., CHAKRABORTY, S., GANGULY, S., CHACKO, E. Z., AJMANI S.K. & TALUKTAR, P. **Estimation of surface heat flux in continuous casting mould with limited measurement of temperature.** International Journal of Thermal Sciences, 118: 435-447, 2017.
- VOLLER, V.R., CROSS, M. and MARKATOS, N.C. **An Enthalpy Method for Convection/Diffusion Phase Change.** International Journal for Numerical Methods in Engineering, 24: 271–284, 1987.
- 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, Janeiro 2013.