

DA. 26.10.88

PAULO VATAVUK

Eng. Mecânico, Instituto de Ensino de Engenharia Paulista, 1982

SOLIDIFICAÇÃO UNIDIMENSIONAL
DE SUBSTÂNCIAS PURAS:
RESOLUÇÃO POR FUNÇÕES DE GREEN

Dissertação apresentada à
Escola Politécnica da USP
para obtenção do título
de Mestre em Engenharia
Mecânica.

Orientador: Prof.Dr. Otávio M. Silvares, Deptº Engª Mecânica

CONSULTA
FD-956

São Paulo, 1988

fd.
1956

RESUMO

Este trabalho trata da resolução de um problema unidimensional de transmissão de calor em regime transiente, envolvendo a solidificação de um líquido que ocupa inicialmente o semi-espaço $x > 0$, devido as trocas de calor por convecção com o meio ambiente. O problema foi resolvido utilizando um método baseado nas funções de Green e por um método de diferenças finitas explícito. Os resultados obtidos com os dois métodos foram compatíveis e na faixa de erros admissíveis de 1% o método das diferenças finitas apresentou melhor performance computacional.

ABSTRACT

This work deals with a one-dimensional transient heat transfer problem in which a liquid occupying initially the semi-infinite space $x > 0$, solidifies due to convection heat transfer with the ambient. The problem was solved using a Green's function method and a explicit finite difference method. The results obtained with the two methods showed good agreement and when the acceptable error was 1% the finite difference method showed a better computational performance.

AGRADECIMENTOS

- Ao professor Dr. Otávio M. Silvaes por toda a orientação fornecida.

- Aos Engenheiros Erberto F. Gentile e Rui T. Sato que, atendendo aos interêsses da Companhia Siderúrgica Paulista, deram total apoio a realização deste trabalho.

- Aos professores Dr. José M. Saiz Jabardo e Dr. Clemente Greco pela participação na banca do exame de qualificação, comentários e sugestões apresentadas.

ÍNDICE

1 - INTRODUÇÃO.....	1
2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	3
2.1 - TRABALHOS UTILIZANDO FUNÇÕES DE GREEN.....	3
2.2 - TRABALHOS UTILIZANDO DIFERENÇAS FINITAS.....	6
2.3 - TRABALHOS UTILIZANDO MÉTODOS APROXIMADOS.....	8
2.4 - TRABALHOS UTILIZANDO OUTROS MÉTODOS DE RESOLUÇÃO...	11
3 - FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	15
3.1 - FORMULAÇÃO.....	15
3.2 - MÉTODO DA FUNÇÃO DE GREEN E RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE CONDUÇÃO DE CALOR.....	23
3.3 - APLICAÇÃO DO MÉTODO DA FUNÇÃO DE GREEN EM PROBLEMAS COM MUDANÇA DE FASE.....	29
4 - APLICAÇÃO DO MÉTODO DA FUNÇÃO DE GREEN NA RESOLUÇÃO DO PROBLEMA.....	36
4.1 - PROBLEMA COM TEMPERATURA IMPOSTA.....	36
4.2 - PROBLEMA COM FLUXO DE CALOR IMPOSTO.....	43
4.3 - PROBLEMA COM TROCAS DE CALOR POR CONVECÇÃO.....	44
5 - RESULTADOS.....	46
5.1 - MÉTODO DA FUNÇÃO DE GREEN.....	46
5.2 - MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS.....	53
5.3 - COMPARAÇÕES ENTRE OS RESULTADOS OBTIDOS COM OS DOIS MÉTODOS.....	67
6 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS.....	70
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	72
APÊNDICE 1.....	78
APÊNDICE 2.....	84
APÊNDICE 3.....	89
APÊNDICE 4.....	98
APÊNDICE 5.....	103

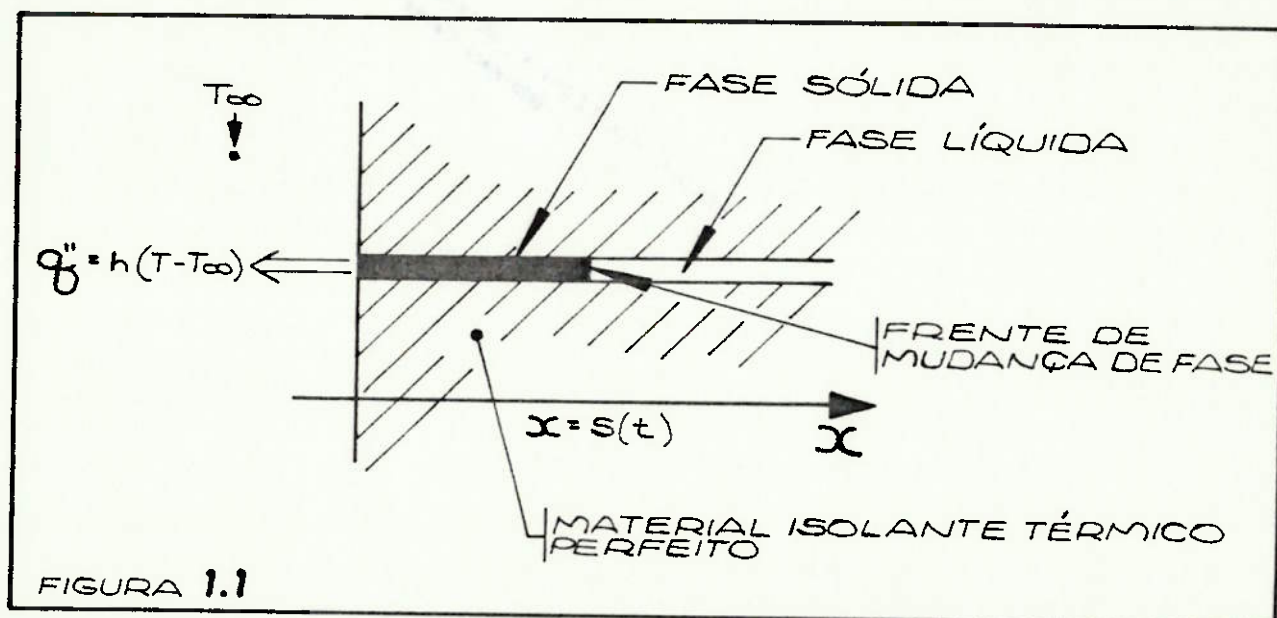
1 - INTRODUÇÃO

Problemas de transmissão de calor em regime transiente com mudança de fase sólido-líquido tem sido abordados na literatura técnica visando aplicações em vários campos. Podemos citar solidificação de metais na indústria siderúrgica e fundições, fabricação de gêlo, congelamento de alimentos, fusão de metais, soldagem, solidificação de solos nas regiões polares, na geologia para estudar a solidificação da crosta terrestre, ablação durante a reentrada de veículos espaciais.

O problema que iremos abordar trata-se da solidificação de uma substância pura contida no interior de uma barra isolada de grande comprimento. O líquido inicialmente se encontra a uma temperatura uniforme T_i que poderá ser maior ou igual à temperatura de fusão T_f . Uma das extremidades da barra troca calor por convecção com o meio ambiente e o coeficiente de transmissão de calor por convecção varia com o tempo. A outra extremidade está muito distante e iremos considerar que a barra pode ser modelada como infinita. Todo o desenvolvimento estará voltado à situação em que as propriedades físicas são independentes da temperatura e do estado de agregação. Iremos considerar, também, que a fase líquida não se move em relação à barra. Conforme se poderá observar, no item da revisão bibliográfica, este problema já foi abordado em diversos trabalhos na literatura técnica. O objetivo deste trabalho, em particular, se refere à aplicação do método das funções de Green ou método das fontes móveis de calor na resolução deste problema. Este método foi pouco estudado quanto a aplicação em problemas uni-dimensionais. Até onde pode-se investigar, só foram publicados dois trabalhos tratando da resolução de problemas uni-dimensionais em coordenadas cartesianas [7], [10]. Por outro lado, existia a perspectiva de grandes ganhos de tempo computacional em relação a resolução do problema utilizando o método das diferenças finitas, que é o método mais comumente utilizado na obtenção de soluções exatas para este tipo de problema.

O presente trabalho foi iniciado visando aplicações na automação do lingotamento contínuo, que é um processo siderúrgico em que o aço líquido é solidificado continuamente na forma de placas, barras ou tarugos. Entretanto, o desenvolvimento do trabalho será fora do contexto de solidificação no lingotamento contínuo pois desejamos dar ênfase no método de resolução e uma série de outros aspectos importantes para análise da solidificação no lingotamento contínuo deveriam ser abordados de maneira adequada.

O tópico seguinte será a revisão bibliográfica onde procuramos fornecer uma visão geral sobre os problemas abordados e métodos de resolução adotados. Alguns trabalhos serão abordados com maior profundidade no Capítulo 3 onde procuramos fornecer o embasamento teórico para os desenvolvimentos subsequentes no Capítulo 4. No Capítulo 5 são apresentados resultados para alguns casos particulares do problema acima mencionado. Foram feitas também comparações com os resultados obtidos utilizando o método das diferenças finitas.



2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O grande interêsse em problemas de transmissão de calor com mudança de fase é atestado pelo grande número de trabalhos publicados. A revisão a seguir não pretende abordar todos os trabalhos publicados sobre o assunto, o que a tornaria consideravelmente mais extensa. Luikov [1] afirma que foram publicados mais de 50 trabalhos originais, sobre o assunto, no século passado. A referência [2] cita 146 trabalhos publicados até o ano de 1965, enquanto que a ref. [3] cita 94 trabalhos publicados entre os anos 1831 e 1979. Rubinstein [4] publicou um livro sobre o problema de Stefan e foram publicados os trabalhos apresentados em duas conferências sobre o assunto [5] e [6].

Na revisão a seguir separamos os trabalhos segundo os métodos matemáticos utilizados, procurando manter a ordem cronológica.

2.1- Trabalhos Utilizando Funções de Green.

Lightfoot [7] resolveu o problema da solidificação de um líquido ocupando o semi-espaco $x > 0$. No instante inicial o líquido se encontra a uma temperatura T_i superior à temperatura de fusão T_f . A temperatura em $x=0$ é subitamente baixada para $T_0 < T_f$. O autor considerou iguais as condutibilidades e difusividades nas duas fases o que permitiu equacionar o problema como se tivessemos uma fase homogênea onde atua uma fonte móvel de calor coincidindo com a frente de solidificação. Inicialmente foi resolvido o problema para uma fonte móvel de calor genérica pelo método das funções de Green, a imposição de que a temperatura sobre a frente de solidificação é T_f permitiu obter uma equação integral, que deve ser resolvida para obter a posição da frente de solidificação $S(t)$. Lightfoot observou que uma função do tipo $S(t) = 2k\sqrt{at}$, onde k é uma constante, é uma solução da equação integral, a substituição desta na equação original permitiu obter uma equação não-linear para k cuja solução conduz à distribuição de temperaturas nos dois

meios. No mesmo trabalho o autor resolveu o problema da solidificação de um líquido contido no semi-espaço $x > 0$ que é colocado em contato com material sólido no semi-espaço $x < 0$. A resolução foi obtida a partir do resultado anterior. Este autor resolveu também, de forma aproximada, o problema de uma placa de espessura 2ℓ , contendo inicialmente líquido à temperatura $T_i > T_f$, que solidifica devido à imposição da temperatura $T_o < T_f$ nas superfícies $x=0$ e $x = 2\ell$. A solução se deu da mesma forma que o primeiro problema citado, porém a função $S(t) = 2k\sqrt{\alpha t}$ não forneceu a solução exata do problema, conseguindo-se apenas uma solução aproximada válida para os instantes iniciais.

Miles [8] propôs um método para resolução de problemas unidimensionais genéricos de condução de calor com mudança de fase, utilizando funções de Green. Para exemplificar o método, o autor aplicou-o na resolução do problema de uma placa que solidifica devido a imposição de uma temperatura $T_1 < T_f$ em uma das faces, enquanto a outra é mantida a $T_2 > T_f$. Porém, a solução completa do problema depende de uma função de Green que se anula em $x=S(t)$ e esta não pode ser obtida de maneira trivial.

Rathjen e Jiji [9] estudaram o problema bi-dimensional de um líquido inicialmente à temperatura $T_i > T_f$ ocupando a região $x > 0$, $y > 0$. Em $t=0$ a temperatura nas superfícies $x=0$ e $y=0$ é subitamente baixada para $T_o < T_f$ dando início à solidificação. A solução do problema seguiu basicamente os passos da ref. [7], a frente de solidificação foi equacionada como uma superfície fonte de calor móvel e obteve-se a solução do perfil de temperaturas utilizando funções de Green. A imposição da condição de que a temperatura na frente de solidificação é T_f , permitiu obter uma equação integral, que foi resolvida de forma aproximada impondo que a frente de solidificação tem a geometria de uma super-hipérbole. Os parâmetros que definem esta super-hipérbole são obtidos impondo em alguns pontos da frente de solidificação a condição de contorno desejada. Os autores verificaram a solução resolvendo o mesmo problema com o método das diferenças finitas.

Chuang e Szekely [10] resolveram o problema da fusão de uma placa imersa em um banho líquido de mesmo material. A solução foi obtida utilizando funções de Green mantendo como incógnita a

função que define as posições da frente de mudança de fase $S(t)$. Esta função foi aproximada por uma série de polinômios de grau 1 cada um válido para um intervalo $[t_{k-1}, t_k]$ o que permitiu efetuar as integrais envolvendo esta função. A imposição de que a temperatura na frente de solidificação é T_f nos instantes t_k fornece equações não lineares que devem ser resolvidas a fim de obtermos $S(t)$. O mesmo método foi utilizado para resolver o problema da fusão de um cilindro [11] e de uma esfera [12].

Budhia e Kreith [13] estenderam os resultados, anteriormente obtidos por Rathjen e Jiji [9], para a solidificação de um material contido em um canto de ângulo α , com lado infinitos. O procedimento para resolução seguiu os mesmos passos que a ref. [9].

Özişik [14] procurou generalizar os métodos utilizados em [7], [9], [10], [11], [12] e [13]. A frente de mudança de fase é inicialmente abordada como uma fonte móvel de calor e o campo é resolvido utilizando funções de Green. A imposição da temperatura de mudança de fase T_f nos pontos da frente de solidificação resulta em uma equação integral que deve ser resolvida para obtermos o comportamento da frente de mudança de fase. O autor não propôs nenhum método para resolução desta equação integral que é um passo fundamental para a solução dos problemas.

Kartashov [15] desenvolveu um método baseado nas funções de Green para resolver problemas em que as condições de contorno são aplicadas em superfícies móveis. Da mesma maneira que o método proposto por Miles [8], a função de Green utilizada na resolução deve obedecer algumas condições de contorno na superfície móvel, desta forma dificultando sua obtenção.

Banerjee e Shaw [16] estenderam o método dos elementos de fronteira ("Boundary Element Method"), para sua utilização em problemas de condução de calor com mudança de fase. Este método utiliza funções de Green para equacionar os problemas como equações integrais envolvendo como incógnitas temperaturas ou fluxos de calor no contorno. A aplicação deste método ao problema da fusão de uma placa levou às mesmas equações obtidas por Chuang e Szekely [10]. Os autores não propuseram nenhum método para resolver as equações integrais envolvendo a frente de mudança de fase como incógnita.

2.2- Trabalhos Utilizando Método de Diferenças Finitas.

Landau [17] resolveu o problema uni-dimensional da fusão de um sólido ocupando inicialmente o semi-espaço $x > 0$. O líquido formado é imediatamente retirado e a fusão ocorre devido a um fluxo de calor imposto na interface entre o sólido e o ambiente. O autor utilizou uma transformação de variáveis de tal forma a manter fixa a fronteira entre o sistema e o meio ambiente. A equação resultante foi resolvida por um método de diferenças finitas explícito.

Lazaridis [18] desenvolveu um método para resolver problemas multi-dimensionais de condução de calor com mudança de fase baseado no método de diferenças finitas explícito. Inicialmente é definida uma malha e as equações são discretizadas. Para os nós que não estão na vizinhança da frente de solidificação são utilizadas as equações usuais para problemas de condução de calor em regime transiente. Para os nós vizinhos à frente de solidificação foram desenvolvidas equações especiais envolvendo a distância do ponto até a frente de solidificação nas direções dos eixos cartesianos. Foram desenvolvidas também equações para computar o movimento da frente de solidificação. O método obtido foi utilizado para resolver 4 exemplos. Os três primeiros se referem a solidificação de um prisma de secção quadrada, as condições de contorno nas laterais são de temperatura imposta ou trocas por convecção. O quarto exemplo se refere a solidificação ocorrendo junto aos vértices de um cubo de lados infinitos. A solidificação ocorre devido a imposição de uma temperatura $T_0 < T_f$ nas fronteiras do cubo. Os resultados obtidos foram comparados com outros resultados da literatura e as discrepâncias foram discutidas.

Kroeger e Ostrach [19] resolveram um problema bi-dimensional relativo à solidificação de metais puros e ligas eutéticas no lingotamento contínuo. Os autores utilizaram uma transformação de variáveis baseada em representação conforme de tal forma que a frente de solidificação fosse transformada em uma linha reta. As equações transformadas foram resolvidas pelo método de diferenças finitas.

Shamsundar e Sparrow [20] resolveram o problema bi-dimensional da solidificação de um líquido contido em um prisma de secção quadrada. O líquido se encontra inicialmente a temperatura

de fusão e a solidificação ocorre devido às trocas de calor por convecção com o meio externo. O método de resolução foi o das diferenças finitas utilizando o modelo da entalpia, neste método as equações são basicamente iguais às utilizadas em problemas sem mudança de fase porém a temperatura dos nós é mantida no valor da temperatura de mudança de fase até que a variação de entalpia corresponda ao calor latente.

Sparrow, Lee e Shamsundar [20] investigaram os parâmetros críticos, para o início das correntes convectivas, durante a fusão de um material aquecido pela superfície inferior. Para obter estes parâmetros foi necessário resolver o problema com ausência destas correntes. O caso em que o aquecimento ocorre devido a trocas de calor por convecção foi resolvido utilizando um método de diferenças implícito em que a frente de solidificação coincide sempre com um nó de malha e o tempo para o avanço da frente entre um nó e outro foi utilizado como incógnita. Os resultados na forma adimensional para posição da frente de solidificação e temperaturas da superfície inferior foram fornecidos na forma de gráficos em função do número de Fourier e de Stefan.

Crowley [22] resolveu basicamente o mesmo problema abordado na referência [19] levando em conta outras condições de contorno. O autor considerou o caso em que a temperatura nas superfícies laterais decresce continuamente e o caso em que esta é subitamente baixada para $T_o < T_f$. Adotou-se o mesmo método de resolução utilizado ref. [19]. Foram feitas comparações com outros resultados da literatura.

Crank e Crowley [23] utilizaram o método da migração de isotermas ("Isotherm Migration Method") para abordar os mesmos problemas resolvidos na referência [22]. O método adotado consiste em mudar a formulação do problema de tal forma que a nova incógnita passa a ser uma das coordenadas enquanto que as variáveis dependentes passam a ser a outra coordenada, a temperatura da isoterma e o tempo. As equações obtidas são resolvidas utilizando o método das diferenças finitas e os resultados são comparados com os da ref. [22].

Gupta e Kumar [24] propuseram um método para resolução de problemas multidimensionais que envolve a transformação de uma

das variáveis independentes, de tal forma a manter fixa a posição da frente de mudança de fase. As equações obtidas são resolvidas utilizando o método das diferenças finitas. Para exemplificar a utilização do método proposto foram analisados 3 problemas. O primeiro é relativo à solidificação de uma barra prismática de seção quadrada contendo inicialmente líquido à temperatura de mudança de fase T_f . A solidificação ocorrendo em virtude da imposição de uma temperatura $T_o < T_f$ no contorno. O segundo problema se refere à fusão de gelo contido em uma barra prismática de seção retangular, é suposta uma condição inicial em que uma parte do gelo já está fundido com um determinado perfil de temperaturas na fase líquida. Todas as faces da barra são isoladas com a exceção de uma onde é imposta uma temperatura $T_o > T_f$. O terceiro problema se refere à solidificação de um cubo contendo inicialmente líquido a temperatura T_f nas faces é imposta uma temperatura $T_o < T_f$. Os resultados obtidos foram comparados com outros apresentados na literatura.

2.3- Trabalhos Utilizando Métodos Aproximados.

London e Seban [25] resolveram uma série de problemas unidimensionais de solidificação nas geometrias cartesiana, cilíndrica e esférica. Foram consideradas trocas de calor por convecção na fronteira fixa da fase sólida. O método de resolução despreza o calor sensível da fase sólida, desta forma os perfis de temperatura em qualquer instante são iguais aos que ocorreriam em regime permanente com a frente de solidificação imóvel. No artigo são apresentadas também aplicações dos resultados para fabricação de gelo e congelamento de alimentos. Foi proposto um método para avaliar os erros cometidos nas simplificações adotadas.

Goodman [26] analisou quatro problemas unidimensionais envolvendo a fusão de um material ocupando o semi-espaco $x > 0$. Foram adotadas condições de contorno de temperatura imposta, fluxo de calor imposto e trocas de calor por convecção na fronteira fixa em $x=0$. O método de resolução foi o do perfil integral que consiste em resolver ao invés de equação diferencial, a integral desta de $x=0$ até um valor $x=\delta$ que depende do problema analisado. A solução aproximada foi obtida impondo um perfil de temperaturas qua-

drático em x e impondo as condições de contorno. Foram feitas comparações com outros resultados da literatura.

Muehlbauer e colaboradores [27] resolveram o problema unidimensional da solidificação de uma placa contendo inicialmente uma liga metálica na fase líquida. As condições de contorno adotadas nas superfícies da placa foram de trocas de calor por convecção e fluxo de calor nulo. A formulação do problema é diferente dos problemas anteriormente resolvidos, pois tratando-se de uma liga metálica, a solidificação se inicia a uma temperatura T_l e termina a uma temperatura T_s , os autores modelaram o comportamento do material nesta faixa de temperaturas corrigindo o calor específico para incluir os efeitos do calor latente. A solução foi obtida utilizando o mesmo método da ref. [26]. Foram realizados experimentos que comprovaram a adequação dos resultados fornecidos pelo modelo.

Garcia e Prates [28] resolveram o problema unidimensional da solidificação de um material, ocupando o semi-espaço $x > 0$, com condição de trocas de calor por convecção em $x=0$. O método de solução baseou-se na solução exata, anteriormente obtida por Neuman, para o problema com temperatura imposta em $x=0$. Foi feita a suposição que as temperaturas em $x=0$ e $t > 0$ correspondem ao perfil de temperaturas em $x > \delta$ no problema de Neuman para instantes de $t > t_0$, δ e t_0 são determinados de tal forma que a condição de contorno do problema seja atendida no instante inicial. O mesmo método foi utilizado para analisar o problema da solidificação de um líquido ocupando o semi-espaço $x > 0$ trocando calor por convecção com um sólido que ocupa o semi-espaço $x < 0$ [29]. Nos dois artigos foram feitas comparações com resultados experimentais os autores consideraram boa a concordância entre os resultados.

Clyne e Garcia [30] analisaram a solução obtida em [29] em alguns casos limites. No primeiro o coeficiente de trocas de calor e o calor específico do material que solidifica tendem ao infinito. No segundo o coeficiente de trocas de calor e o calor específico do material, ocupando $x < 0$, tendem ao infinito. No terceiro caso os calores específicos dos meios ocupando $x < 0$ e $x > 0$ tendem ao infinito enquanto que o coeficiente de trocas de calor por convecção permanece finito. Constatou-se que os resultados obtidos estão em perfeito acordo com resultados apresentados anteriormente na literatura.

El-Genk e Cronenberg [31] obtiveram uma solução aproximada para o problema da fusão de um sólido, inicialmente contido no semi-espaço $x > 0$, devido a um fluxo de calor constante em $x=0$. A solução foi obtida partindo da solução para o problema análogo sem mudança de fase. Foram introduzidas algumas constantes nesta solução e estas foram calculadas de tal forma a atender à condição de que a temperatura na frente de mudança de fase é a de fusão. Este procedimento fez com que a equação obtida não fosse mais solução da equação diferencial original. O andamento da frente de solidificação foi obtido impondo a equação que rege o movimento desta. A comparação com outros resultados da literatura mostrou boa concordância.

Cho e Sunderland [32] resolveram dois problemas relativos à solidificação de um líquido inicialmente contido no semi-espaço $x > 0$, utilizando condições de contorno em $x=0$ de fluxo de calor imposto e de trocas de calor por convecção. Foram obtidas duas soluções aproximadas, para cada problema, partindo das soluções análogas para os problemas sem mudança de fase e introduzindo nestas algumas constantes arbitrárias. A primeira solução foi obtida impondo que a temperatura na frente de solidificação é a de fusão e a outra solução foi obtida impondo a equação que rege o movimento da frente de solidificação. A comparação com outros resultados da literatura indicou que a segunda solução aproximada, que foi obtida, fornece valores mais precisos para a posição da frente de solidificação.

Shamsundar [33] generalizou o procedimento utilizado na referência [25] para problemas bi-dimensionais. A metodologia para resolução é baseada na imposição de uma geometria da frente de mudança de fase. O movimento desta é obtido desprezando o calor sensível na fase sólida e utilizando os fatores de forma para condução de calor em regime estacionário. Foi obtida a solução para o problema da solidificação de um líquido, inicialmente contido em uma barra prismática de secção quadrada, com condições de contorno de trocas de calor por convecção. Foi obtida também a solução para o problema anterior com a condição de contorno de que a temperatura decresce linearmente e para uma barra prismática de secção elíptica com a mesma condição de contorno. Foram obtidas também soluções válidas para os instantes iniciais da solidificação de barras prismáticas de secção poligonal com condições de contorno de

trocas de calor por convecção ou temperatura imposta. Os resultados obtidos mostraram boa concordância com outros apresentados na literatura.

Lunardini [34] resolveu os problemas da solidificação e fusão de um material contido no semi-espaço $x > 0$. A temperatura inicial foi considerada diferente da temperatura de fusão e foram consideradas propriedades físicas diferentes nas fases sólida e líquida. O método de resolução foi o mesmo utilizado por Goodman [26]. Foram apresentados resultados para várias faixas de temperaturas e propriedades físicas.

Barry e Goodling [35] resolveram o mesmo problema anteriormente analisado na referência [29]. O método de resolução foi baseado na utilização do princípio variacional de Biot supondo um perfil linear de temperaturas na fase sólida em $x > 0$ e um perfil polinomial em $x < 0$. A solução obtida foi comparada com resultados experimentais e soluções utilizando métodos numéricos.

2.4- Trabalhos Utilizando outros Métodos de Resolução.

Luikov [1] cita o trabalho pioneiro de Lamé e Clapeyron (1831) que resolveram o problema da solidificação de um líquido, inicialmente a temperatura de fusão T_f , ocupando o semi-espaço $x > 0$. No instante $t=0$ a temperatura é subitamente baixada para $T_0 < T_f$ dando início a solidificação. Os autores resolveram o problema efetuando uma transformação por similaridade baseada na variável $\eta = x/2\sqrt{\alpha t}$.

Özişik [3] cita o trabalho de Neuman (desenvolvido por volta de 1860 porém publicado somente em 1912). Este autor estendeu a solução de Lamé e Clapeyron para um problema em que a temperatura inicial do líquido é diferente da temperatura de fusão, considerando diferentes as propriedades físicas para as fases sólida e líquida.

Evans e colaboradores [36] abordaram o problema da fusão de um sólido, contido no semi-espaço $x > 0$, devido a um fluxo de calor imposto em $x=0$. O problema foi resolvido utilizando séries de Taylor para expandir as funções que definem o campo de temperaturas e a posição da frente de mudança de fase. Foram apresen

tados os primeiros cinco t ermos da s erie para o c alculo da posi c o da frente de mudan a de fase.

Westphal [37] resolveu o problema unidimensional da solidifica o de um material inicialmente   temperatura de fus o ocupando o semi-espaco $x > 0$. A solidifica o ocorre devido  s trocas de calor por convec o com o meio ambiente. O autor resolveu o problema partindo de uma solu o da equa o diferencial envolvendo tr s fun es inc gnitas, uma destas   a posi o da frente de solidifica o. Estas fun es s o expandidas em s ries de Taylor e a aplica o das condi es de cont rno permitem calcular os termos da s rie. O autor, calculou 8 t ermos da s rie para a posi o da frente de solidifica o.

Cho e Sunderland [38] resolveram o problema da solidifica o de uma liga met lica, contida no semi-espaco $x > 0$, devido a imposi o de uma temperatura em $x=0$ inferior a temperatura de final de solidifica o. Foi adotado um modelo para a varia o de entalpia na faixa de temperaturas entre o in cio e o final da solidifica o e as equa es foram resolvidas por meio de uma transforma o por similaridade utilizando a vari vel $\eta = x/2\sqrt{\alpha t}$. O mesmo problema por m com uma geometria finita, considerando a outra face isolada, foi resolvido, de forma aproximada, utilizando uma combina o da transforma o por similaridade com o m todo do perfil integral descrito na refer ncia [26].

Pedroso e Domoto [39] abordaram o mesmo problema estudado anteriormente por Westphal [37]. A metodologia de resolu o se baseou, inicialmente, na mudan a da vari vel t para a vari vel S (posi o da frente de solidifica o) na equa o para o campo de temperaturas. A equa o obtida foi resolvida utilizando uma t cnica de perturba o utilizando como vari vel o n mero de Stefan. Foram obtidos os oito primeiros t ermos da solu o por m a converg ncia desta s  s  garantida para n meros de Stefan menores ou iguais a 1. Os mesmos autores resolveram o problema para a solidifica o de um material contido no semi-espaco $x > 0$ com condi o de cont rno de temperatura imposta em $x=0$, levando em conta propriedades f sicas vari veis na fase s lida [40]. A solu o foi obtida utilizando a transforma o de Kirchof e posteriormente utilizando a mesma t cnica, j  utilizada no problema anterior. Os autores apresentaram alguns resultados para o caso em que as propriedades f sicas variam linearmente com a temperatura.

Tao [41] abordou o problema da solidificação de uma fase líquida que ocupa inicialmente o semi-espaco $x > 0$ e possui um perfil de temperaturas arbitrário no instante inicial. A temperatura em $x=0$ varia de forma arbitrária porém é sempre inferior à temperatura de solidificação. Para resolver o problema o autor, inicialmente, definiu uma família de funções que são soluções da equação diferencial para o campo de temperaturas. Posteriormente os campos de temperaturas, para as fases líquida e sólida, foram representados por séries utilizando estas funções e a função que define a posição da frente de solidificação foi representada por uma série de potências. As constantes foram determinadas utilizando as condições de contorno. O mesmo método foi utilizado pelo autor para analisar o problema com fluxo de calor arbitrário [42] e levando em conta trocas de calor por convecção [43].

Beckett e Hobson [44] analisaram o problema da solidificação de um lingote de aço cilíndrico em um molde também cilíndrico de espessura finita. Foram consideradas trocas de calor por convecção e radiação na superfície externa do molde e trocas por radiação entre a superfície interna do molde e a superfície externa do metal solidificado. O método de resolução consistiu em utilizar uma mudança de variáveis para manter fixa a posição da frente de solidificação. As equações obtidas foram resolvidas pelo método de Hartree-Wormsley que consiste em utilizar diferenças finitas para a derivada em relação ao tempo e resolver, para cada instante de tempo, a equação diferencial ordinária resultante.

Lozano e Reemtsen [45] resolveram o mesmo problema abordado nas referências [37] e [39]. O método de resolução se baseou em um resultado, anteriormente obtido por Colton, que relaciona o campo de temperaturas com uma série de derivadas da posição da frente de solidificação. Esta função foi expandida em uma série de potências e a aplicação da condição de contorno em: $x = 0$ permite a obtenção dos termos desta série. Os autores apresentaram resultados numéricos para o caso em que o problema se degenera em um problema com fluxo de calor imposto em $x=0$.

Gupta [46] resolveu o problema bi-dimensional da solidificação de um líquido, contido no semi-espaco $x > 0$, devido a um perfil de temperaturas imposto em $x=0$ que é função do tempo e da variável y . O método de resolução consistiu na obtenção de uma

solução da equação diferencial envolvendo quatro funções incógnitas uma destas é a que define a posição da frente de solidificação. Estas funções são expandidas utilizando séries de potências e os termos das séries são obtidos através das condições de contorno. Neste artigo o mesmo método foi utilizado para resolver o problema da fusão de um material, contido no semi-espaço $x > 0$, devido a um fluxo de calor imposto na fronteira da fase sólida, supondo que o líquido formado é imediatamente retirado.

Blackwell e Ockendon [47] resolveram um problema relativo à solidificação no lingotamento contínuo. A temperatura na superfície externa do sólido, na região externa ao molde, foi considerada constante, enquanto que no interior do molde o fluxo de calor, nesta superfície, foi considerado nulo. Os autores consideraram também que as faces do molde estão bastante afastadas uma da outra. O problema foi resolvido mediante uma transformação de variáveis utilizando coordenadas parabólicas cilíndricas. As equações obtidas recaíram em um problema cuja solução já era conhecida.

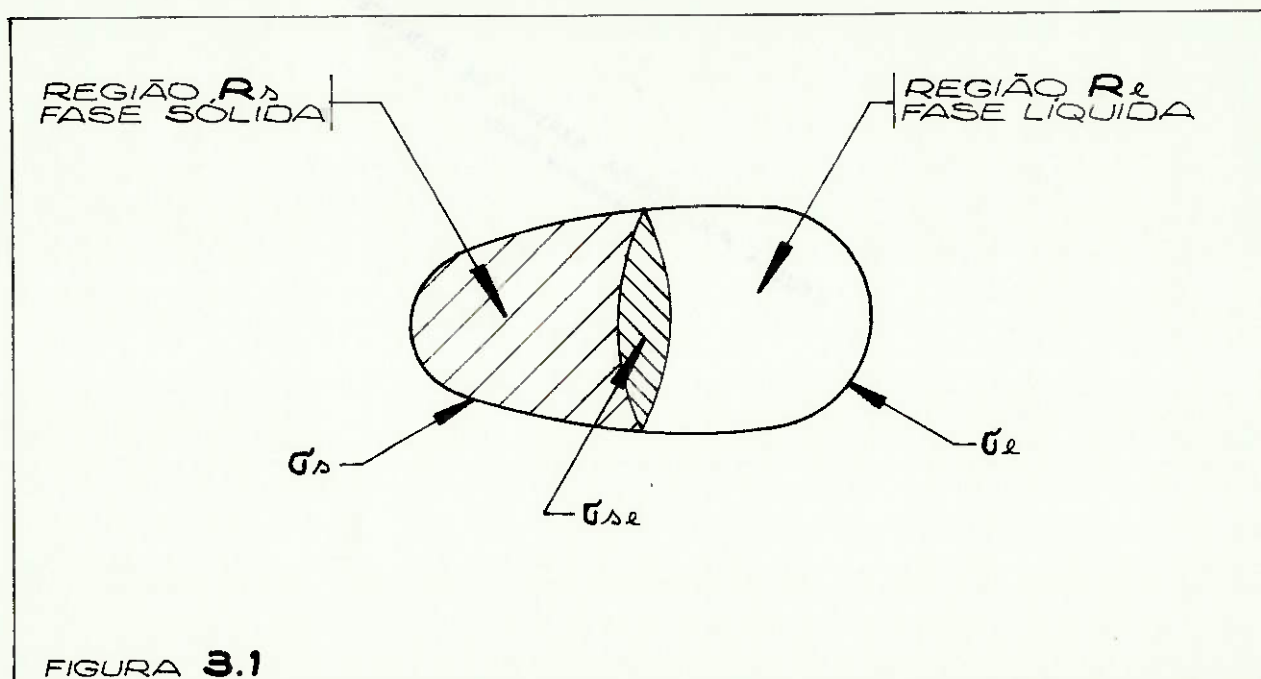
Hong, Ueda e Kimura [48] resolveram o problema bi-dimensional da solidificação de uma liga metálica no interior de um molde com secção transversal quadrada. O problema foi resolvido utilizando o método dos elementos de fronteira para obter o perfil de temperaturas no molde, acoplado com um método de diferenças finitas para obter o perfil de temperaturas no metal que está solidificando. Em um outro artigo [49], os autores abordaram o problema utilizando o método dos elementos de fronteira nas duas regiões. Para possibilitar a utilização deste método as temperaturas no instante $t + \Delta t$ são calculadas com base nas temperaturas do instante t , os cálculos são feitos como se não houvesse mudança de fase. As temperaturas obtidas são então corrigidas para levar em conta os efeitos do calor latente e possibilitando assim uma nova iteração para dar continuidade ao processo.

3 - FUNDAMENTOS TEÓRICOS

3.1 - Formulação

A formulação envolve os tópicos referentes a obtenção das equações diferenciais e condições de contorno que representam o modelo do fenômeno físico estudado. Estas equações devem ser resolvidas por algum método matemático para conhecermos o comportamento do modelo que é a própria solução das equações que foram formuladas. Iremos abordar neste ítem a formulação geral para problemas com mudança de fase envolvendo substâncias puras, paralelamente iremos particularizar a formulação especificamente para o problema que estamos abordando. Este ítem será desenvolvido seguindo o material das referências [3] e [50].

Vamos inicialmente considerar um sistema genérico onde estão presentes duas fases como esquematizado na figura 3.1.



Nos problemas de solidificação a frente de mudança de fase (superfície σ_{sl}) esta avançado em direção à fase líquida, enquanto que nos problemas de fusão ocorre o inverso.

No interior de cada uma das fases é válida a equação geral da condução de calor:

$$\rho c \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla T \right) = \nabla (k \nabla T) + \dot{q}''' \quad (3.1)$$

onde: T - temperatura do meio sólido ou líquido

\vec{V} - velocidade

\dot{q}''' - calor gerado internamente

ρ - densidade do meio sólido ou líquido

c - calor específico do meio

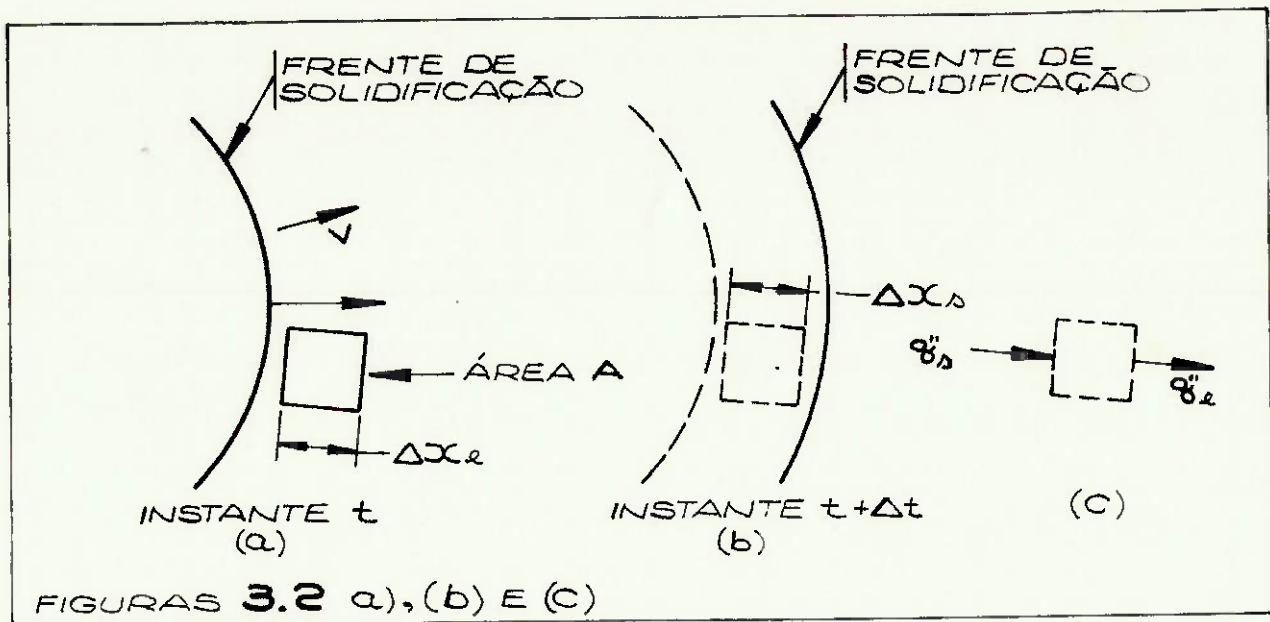
k - condutibilidade térmica do meio.

Esta equação [3], [50] decorre da aplicação do 1º princípio da termodinâmica a um meio isotrópico onde é válida a equação fenomenológica de Fourier.

Devemos especificar condições de contorno nas superfícies σ_s e σ_l que separam respectivamente as fases sólida e líquida do meio externo. Podem ser especificadas condições de contorno da maneira usual nos problemas de transmissão de calor, por exemplo condição de temperatura imposta na superfície, fluxo de calor imposto ou trocas de calor por convecção, conforme o problema que está sendo estudado.

Como estamos tratando de uma substância pura, a temperatura na frente de solidificação é especificada como sendo a temperatura de fusão do material. Assim a fase sólida tem condições de contorno especificadas em toda a superfície que a envolve ($\sigma_s + \sigma_{sl}$) O mesmo ocorrendo com a fase líquida. Estas condições juntamente com as condições iniciais para cada fase (campo de temperaturas em $t=0$) permitiriam que o problema fosse resolvido se a frente σ_{sl} estivesse fixa. Entretanto este não é o caso dos problemas tratados aqui, então necessitamos de uma equação que nos forneça o movimento da frente de solidificação. Vamos agora obter esta equação para o caso específico de solidificação. Os problemas envolvendo fusão tem formulação completamente análoga.

Consideremos um sistema fechado a passagem de massa, numa posição adjacente à frente de solidificação no instante t (conforme a figura 3.2.a). Consideremos também que o sistema foi desenhado de tal forma que é totalmente englobado pela frente de solidificação no instante $t + \Delta t$, permanecendo adjacente a esta, conforme a fig. 3.2.b.



FIGURAS 3.2 (a), (b) E (c)

O sistema tinha espessura Δx_l conforme mostrado na figura 3.2.a e passou a ter espessura Δx_s devido à diferença entre as densidades da fase sólida e líquida. A conservação da massa exige que:

$$\Delta x_l \rho_l A = \Delta x_s \rho_s A \quad (3.2)$$

onde: Δx_l , Δx_s - espessura do sistema nos instantes t e $t + \Delta t$ respectivamente

ρ_s , ρ_l - densidade das fases sólida e líquida à temperatura de fusão

A - área transversal ao sistema.

Ao fazermos um balanço de energia, para este sistema, a variação de energia interna entre os instantes t e $t + \Delta t$ deverá ser:

$$\Delta u = \Delta x_s \cdot A \cdot \rho_s \cdot u_s - \Delta x_l \cdot A \cdot \rho_l \cdot u_l \quad (3.3)$$

onde: u_s , u_l - energia interna das fases sólida e líquida respectivamente.

O calor adicionado ao sistema entre estes dois instantes, seguindo a convenção da figura 3.2.c), é dado por:

ERRATA

Página não numerada:

Na 2ª linha do ABSTRACT:

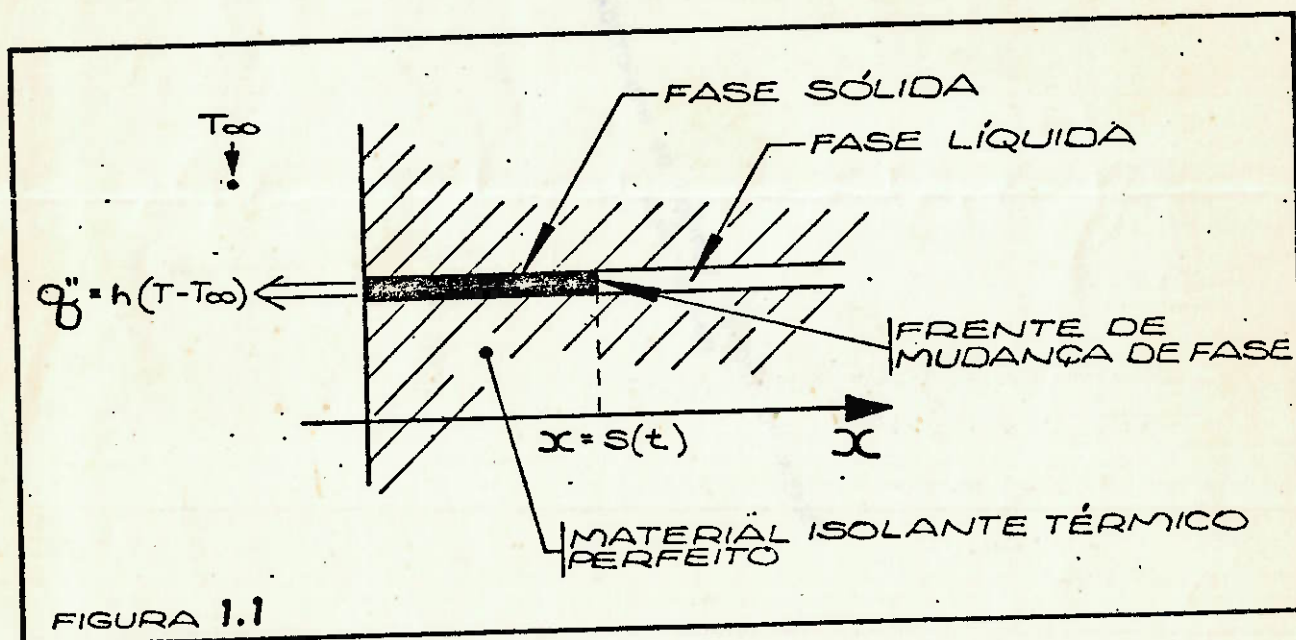
trocar "occuping"
por "occupying"

Na 4ª linha do ABSTRACT:

trocar "ambient"
por "surroundings"

Página 2:

Acrescentar a figura abaixo:



Página 7:

Na 6ª linha do 3º parágrafo:

trocar "utilizado ref."
por "utilizado na ref."

Página 21:

Na equação 3.17:

trocar $" \frac{\partial T}{\partial x^2} "$

por $" \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} "$

Página 22:

Na equação 3.21:

trocar $" k = \frac{\partial T}{\partial x} "$

por $" k \frac{\partial T}{\partial x} "$

Página 32:

No 1º parágrafo, 2ª linha:

trocar "região R"

por "região M"

Página 33:

Na 3ª linha:

trocar "região "

por "região M"

Na última linha:

trocar "3.13"

por "3.12"

Página 35:

Nas linhas 1ª e 3ª:

trocar "função integrando"

por "função integranda"

Página 37:

Na equação 4.2:

trocar $\frac{\partial T_\ell}{\partial x^2}$

por $\frac{\partial^2 T_\ell}{\partial x^2}$

Na equação 4.3:

trocar "T (x,0)"

por $T_\ell(x,0)$

Página 38:

Abaixo da equação 4.11:

acrescentar o número da equação: (4.12)

Página 41:

Na equação 4.19:

trocar " I2(x,t)"

por $\frac{H_{s\ell}}{c} I2(x,t)$

Página 58:

Na 3ª linha:

trocar "[52]"

por "[54]"

Página 78:

Na equação A1.2:

trocar $A_k + B_k - T_i$

por $A_{k\tau} + B_k - T_i$

Página 79:

Na 2ª linha:

trocar "equação 4" por "equação A1.4"

$$Q = (\dot{q}_S'' - \dot{q}_l'') \cdot A \cdot \Delta t \quad (3.4)$$

onde: \dot{q}_S'' , \dot{q}_l'' - calor proveniente das fases sólida e líquida respectivamente.

Observar que não levamos em conta o calor proveniente das outras faces do sistema pois estas são perpendiculares à frente de solidificação, que é uma isotérma. O vetor fluxo de calor, por sua vez, é sempre perpendicular às isotérmicas num material que segue a lei de Fourier. Desta forma, o fluxo é nulo nas outras superfícies.

O trabalho efetuado pelo sistema deverá ser:

$$W = p \cdot A \cdot (\Delta x_S - \Delta x_l) \quad (3.5)$$

Desta forma, o 1º princípio da termodinâmica exige que:

$$(\Delta x_S \rho_S u_S A) - (\Delta x_l \rho_l u_l A) = (\dot{q}_S'' - \dot{q}_l'') A \Delta t - p (\Delta x_S - \Delta x_l) A \quad (3.6)$$

Expressando Δx_l em termos de Δx_S pela eq.3.2, eliminando a área e re-arranjando os termos podemos obter a equação abaixo:

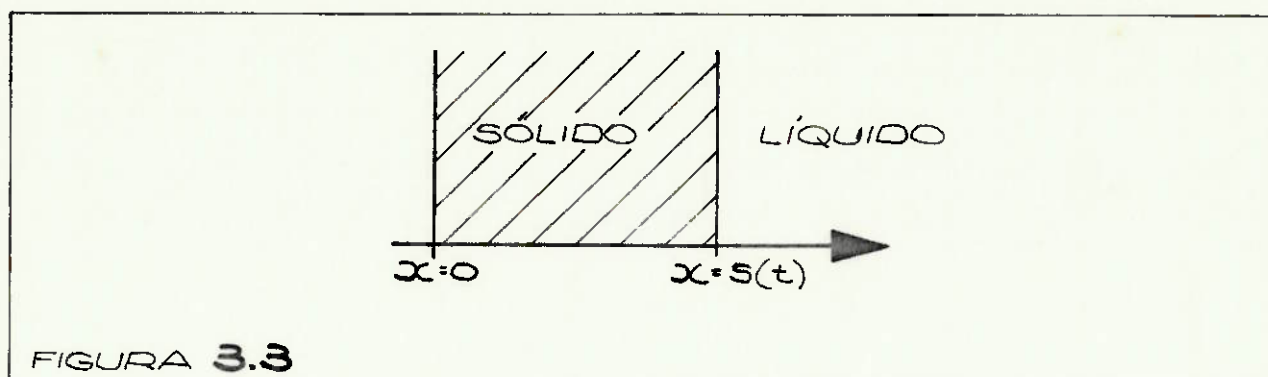
$$\rho_S \frac{\Delta x_S}{\Delta t} \left[u_S - u_l + \frac{p}{\rho_S} - \frac{p}{\rho_l} \right] = \dot{q}_S'' - \dot{q}_l'' \quad (3.7)$$

Levando ao limite para $\Delta t \rightarrow 0$ o termo $\frac{\Delta x_S}{\Delta t}$ tende à velocidade da frente de solidificação V_S enquanto que o termo entre colchetes é a entalpia de fusão por unidade de massa H_{Sl} com sinal negativo.

$$- H_{Sl} \rho_S V_S = \dot{q}_l'' - \dot{q}_S'' \quad (3.8)$$

A equação anterior evidencia que a diferença entre os fluxos de calor provenientes das fases líquida e sólida causa uma movimentação da frente de solidificação de tal forma que a entalpia de fusão do material solidificado mantém o balanço de energia.

Caso estejamos tratando de um problema uni-dimensional, onde levamos em consideração somente uma coordenada espacial, a posição da frente de solidificação pode ser descrita por uma função $S(t)$, que a cada instante de tempo t associa uma posição no eixo de coordenadas x , onde se encontra a frente de solidificação, tal como mostra a figura 3.3.



Os fluxos de calor podem ser calculados pela equação de Fourier seguindo a convenção da figura 3.2.c). Desta forma a equação 3.8 se torna:

$$\rho_S H_{sl} \dot{S}(t) = k_S \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=S(t)} - k_L \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=S(t)} \quad (3.9)$$

Para o caso multi-dimensional a frente de solidificação se constitui em uma superfície cuja forma e posição varia com o tempo. Dependendo da geometria da frente de solidificação esta poderá ser representada por uma equação do tipo da equação 3.10

$$z = S(x, y, t) \quad (3.10)$$

Vamos supor que a orientação do sistema de coordenadas é tal que a fase sólida se encontra em $z < S(x, y, t)$ e a fase líquida em $z > S(x, y, t)$.

Para determinarmos o vetor normal à frente de solidificação \vec{n} podemos considerar que esta é a superfície de nível zero de uma função de x, y, z e t definida pela equação 3.11.

$$F(x, y, z, t) = z - S(x, y, t) \quad (3.11)$$

Como o vetor gradiente é sempre normal as superfícies de nível, o vetor unitário à frente de solidificação pode ser obtido pela equação 3.12.

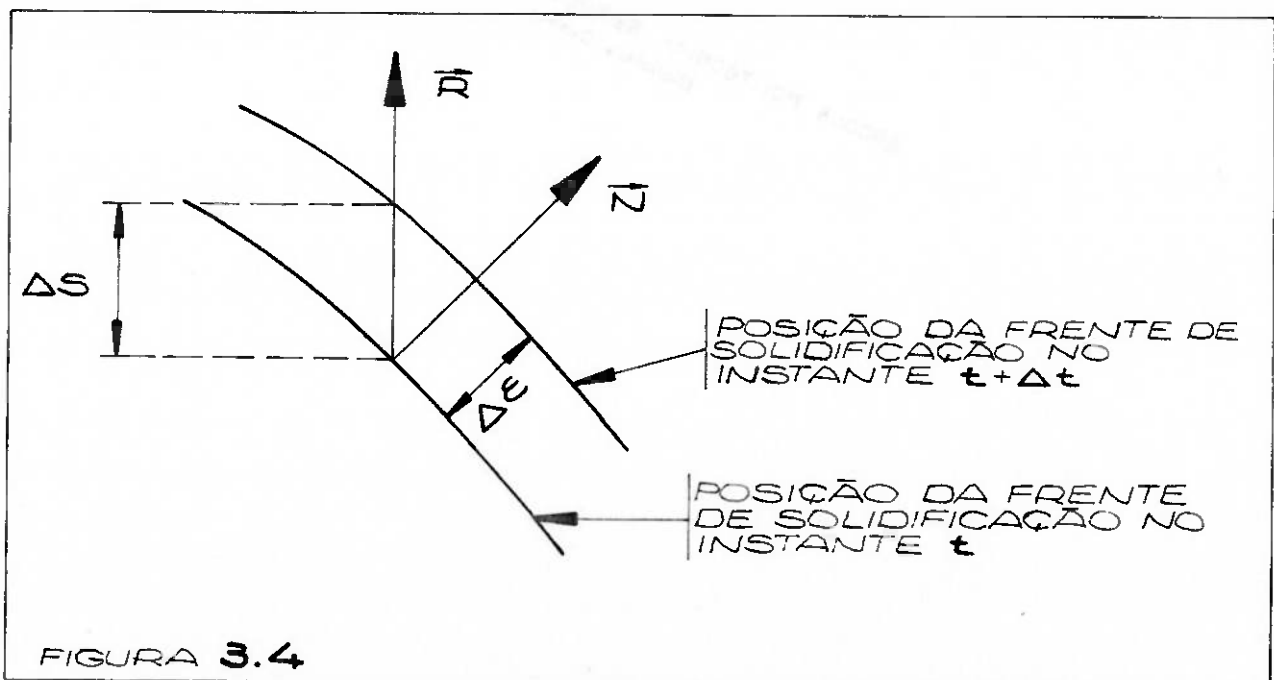
$$\vec{n} = \frac{\nabla F(x,y,z,t)}{|\nabla F(x,y,z,t)|} = \frac{\left(-\frac{\partial S}{\partial x} \vec{i} - \frac{\partial S}{\partial y} \vec{j} + \vec{k}\right)}{\sqrt{\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 + 1}} \quad (3.12)$$

Do modo como definimos a orientação do sistema de coordenadas o vetor normal, definido pela equação 3.12, "aponta" para a fase líquida. Os fluxos de calor \dot{q}_s'' e \dot{q}_l'' podem, então, ser calculados pela equação de Fourier seguindo a convenção da figura 3.2.c).

$$\dot{q}_s'' = -k_s \nabla T_s \cdot \vec{n} \quad (3.13)$$

$$\dot{q}_l'' = -k_l \nabla T_l \cdot \vec{n} \quad (3.14)$$

A velocidade da frente de solidificação poderá ser obtida observando a figura 3.4 onde podemos verificar que o deslocamento $\Delta \epsilon$ na direção normal é a projeção do deslocamento ΔS nesta direção.



A velocidade V_s da frente de solidificação pode ser obtida pela equação 3.15 onde utilizamos a equação 3.12.

$$V_{sl} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta \epsilon}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta S}{\Delta t} \vec{n} \cdot \vec{k} =$$

$$= \frac{\partial S}{\partial t} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2}} \quad (3.15)$$

Substituindo as equações 3.13, 3.14 e 3.15 na equação 3.8 obtemos:

$$H_{sl} \rho_s \frac{\partial S}{\partial t} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2}} = (k_s \nabla T_s - k_l \nabla T_l) \cdot \vec{n} \quad (3.16)$$

Concluimos assim a formulação geral para problemas de solidificação, envolvendo substâncias puras, que consistirá na resolução da equação 3.1 aplicada ao meio sólido e ao líquido, juntamente com as condições:

- a) Condição inicial
- b) Condição de contorno nas superfícies σ_s e σ_l conforme análise física do problema.
- c) Condição de que a temperatura na superfície σ_{sl} é a de fusão.
- d) Condição de trocas de calor na superfície σ_{sl} dada pela equação 16.

Retomando a formulação do problema abordado neste trabalho, as fases sólida e líquida são consideradas imóveis, as propriedades físicas são constantes e independentes do estado de agregação, assim a equação 3.1 para as fases líquida e sólida pode ser dada pelas equações 3.17 e 3.18.

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} \quad \text{para } 0 < x < S(t) \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial T_l}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T_l}{\partial x^2} \quad \text{para } x > S(t) \quad (3.18)$$

A condição inicial é dada por:

$$T_l = T_i \quad \text{para } t = 0 \quad (3.19)$$

A condição de contorno em $x = 0$, antes do início da solidificação, é dada pela equação 3.20.

$$k \frac{\partial T_l}{\partial x} = h(t) [T_l - T_\infty] \quad \text{em } x = 0 \quad (3.20)$$

e $0 < t < t_i$

onde: t_i - instante de tempo em que se inicia a solidificação

$h(t)$ - função que define o coeficiente de transmissão de calor por convecção.

Após o início da solidificação a condição de contorno em $x = 0$ passará a ser:

$$k \frac{\partial T_s}{\partial x} = h(t) [T_s - T_\infty] \quad \text{em } x = 0 \quad (3.21)$$

e $t > t_i$

A condição de que a temperatura na frente de solidificação é a de fusão é dada por:

$$T_s = T_l = T_f \quad \text{para } x = S(t) \quad (3.22)$$

A condição de trocas de calor na frente de solidificação pode ser equacionada como:

$$k \left[\frac{\partial T_s}{\partial x} - \frac{\partial T_l}{\partial x} \right]_{x=S(t)} = H_{sl} \rho \frac{dS}{dt} \quad (3.23)$$

3.2 - Método da Função de Green e Resolução de Problemas de Condução de Calor

A metodologia de utilização das funções de Green na resolução de equações diferenciais a derivadas parciais será delineada neste ítem, para que não haja necessidade de consulta a material externo. O material deste ítem foi baseado nas referências [51] e [52].

Vamos considerar a resolução de uma equação diferencial genérica, envolvendo as variáveis independentes x, y e t , apresentada na forma da equação 3.24. Nesta equação "L" é um operador diferencial linear envolvendo as variáveis independentes. Iremos supor que a solução é procurada nos instantes de tempo $t > 0$, no interior da região \mathcal{D} que possui uma fronteira σ .

$$L\phi = f(x,y,t) \quad (3.24)$$

Estamos supondo também que são definidas condições iniciais e condições de contorno na fronteira σ , de tal forma que o problema esteja matematicamente bem formulado.

De maneira resumida, podemos afirmar que o método da função de Green consiste em expressar o operador "L" em relação a novas variáveis ϵ, ν e τ , que fazem o papel de x, y e t respectivamente. Multiplicamos o operador, aplicado à função ϕ , por uma função G que envolve, além de outras, as variáveis ϵ, ν, τ . A expressão é integrada no domínio de interesse como indicado abaixo:

$$\int_0^\lambda \int_{\mathcal{D}} G \cdot L\phi \, d\epsilon \, d\nu \, d\tau$$

onde: λ é um instante de tempo além do qual não há interesse na solução.

O método da função de Green requer que o termo acima seja desenvolvido (utilizando integração por partes e o teorema da divergência), de tal forma a obtermos uma expressão matemática que envolva, além de outros termos, uma integral sobre o mesmo domínio, da função ϕ multiplicada por um novo operador "L*"

operando em G , tal como indicado na equação 3.25.

$$\int_0^\lambda \int_{\mathcal{D}} G \cdot L\phi \, d\varepsilon \, dv \, d\tau = \int_0^\lambda \int_{\sigma} (\dots) \, d\ell \, d\tau + \int_{\mathcal{D}} (\dots) \, d\varepsilon \, dv + \int_0^\lambda \int_{\mathcal{D}} \phi \cdot L^* G \, d\varepsilon \, dv \, d\tau \quad (3.25)$$

onde: $d\ell$ - elemento da curva σ .

Posteriormente assumimos que a G , até agora não especificada, é uma solução da equação diferencial eq.3.26.

$$L^* G = \delta(\varepsilon - x) \delta(v - y) \delta(\tau - t) \quad (3.26)$$

A função δ , que aparece na expressão acima, é a função de Dirac. Esta função é uma função generalizada e não uma função no sentido usual do cálculo diferencial e integral. A função delta possui o seguinte comportamento na integração:

$$\int_{l_1}^{l_2} f(x) \delta(x - \alpha) dx = \begin{cases} f(\alpha) & \text{se } l_1 < \alpha < l_2 \\ 0 & \text{se } \alpha > l_2 \text{ ou } \alpha < l_1 \end{cases} \quad (3.27)$$

onde: $f(x)$ é uma função contínua qualquer.

Tendo em vista o comportamento da função de Dirac o último termo da equação 3.25 pode ser integrado, resultando na equação 3.28, onde foi utilizada a equação 3.24 para eliminar o termo " $L\phi$ ".

$$\phi(x, y, t) = \int_0^\lambda \iint_{\mathcal{D}} G \cdot f(\varepsilon, \nu, \tau) d\varepsilon d\nu d\tau + \int_0^\lambda \int_\sigma (\dots) d\ell d\tau - \iint_{\mathcal{D}} (\dots) d\varepsilon d\nu \quad (3.28)$$

Os termos que estão entre parênteses, na equação 3.28, resultam do desenvolvimento da equação 3.25. Estes termos irão depender do operador diferencial "L" e envolvem, de maneira geral, valores das funções ϕ e G , bem como suas derivadas, na fronteira para os instantes de tempo $0 < t < \lambda$ e na região \mathcal{D} para os instantes $t = 0$ e $t = \lambda$. Alguns valores da função ϕ e/ou suas derivadas podem ser obtidas através das condições de contorno, porém existirão valores da função incógnita e/ou suas derivadas que não são conhecidas a priori. Para eliminarmos estes termos indesejáveis devemos impor condições de contorno para a função G . Desta forma a função G deverá ser uma solução da equação 3.26 atendendo a condições de contorno que permitam eliminar os termos indesejáveis da equação 3.28.

Para sermos um pouco mais específicos iremos analisar o problema bi-dimensional de condução de calor em regime transiente, dado pela seguinte formulação:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \nabla^2 T = f(x, y, t) \quad \text{para } (x, y) \in \mathcal{D} \quad (3.29) \\ \text{e } t > 0$$

com a condição inicial:

$$T(x, y, 0) = p(x, y) \quad \text{para } (x, y) \in \mathcal{D} \quad (3.30)$$

Para mantermos a generalidade iremos supor que a curva σ , que delimita a região \mathcal{D} , pode ser sub-dividida em 3 partes σ_1 , σ_2 e σ_3 , onde são válidas as seguintes condições de contorno:

$$T(x,y,t) = r_1(x,y,t) \quad \text{para } (x,y) \in \sigma_1 \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial T}{\partial n}(x,y,t) = r_2(x,y,t) \quad \text{para } (x,y) \in \sigma_2 \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial T}{\partial n}(x,y,t) = \frac{h}{k} [r_3(x,y,t) - T(x,y,t)]$$

para $(x,y) \in \sigma_3$ (3.33)

onde: $\frac{\partial}{\partial n}$ indica a derivada na direção da normal externa à curva σ .

Para construir uma solução utilizando o método das funções de Green devemos obter uma equação semelhante à eq.3.28 partindo da integral abaixo indicada.

$$\int_0^\lambda \iint_{\mathcal{D}} G \left(\frac{\partial T}{\partial \tau} - \alpha \nabla^2 T \right) d\epsilon \, d\nu \, d\tau$$

Trocando a ordem de integração e utilizando integração por partes podemos obter o seguinte resultado:

$$\begin{aligned} & \int_0^\lambda \iint_{\mathcal{D}} G \frac{\partial T}{\partial \tau} d\epsilon \, d\nu \, d\tau = \iint_{\mathcal{D}} \int_0^\lambda G \frac{\partial T}{\partial \tau} d\tau \, d\epsilon \, d\nu = \\ & = \iint_{\mathcal{D}} \left\{ [G T]_{\tau=0}^{\tau=\lambda} - \int_0^\lambda T \frac{\partial G}{\partial \tau} d\tau \right\} d\epsilon \, d\nu = \quad (3.34) \\ & = \iint_{\mathcal{D}} [G T]_{\tau=0}^{\tau=\lambda} d\epsilon \, d\nu - \int_0^\lambda \iint_{\mathcal{D}} T \frac{\partial G}{\partial \tau} d\epsilon \, d\nu \, d\tau \end{aligned}$$

Por outro lado, utilizando o teorema da divergência podemos demonstrar o seguinte resultado, que é denominado Teorema de Green:

$$\iiint_{\mathcal{D}} (G \nabla^2 T - T \nabla^2 G) d\epsilon dv = \oint_{\sigma} \left(G \frac{\partial T}{\partial n} - T \frac{\partial G}{\partial n} \right) d\ell \quad (3.35)$$

Utilizando as equações 3.34 e 3.35 podemos obter uma equação análoga à equação 3.25. Como indicado abaixo:

$$\begin{aligned} & \int_0^\lambda \iiint_{\mathcal{D}} G \left(\frac{\partial T}{\partial \tau} - \alpha \nabla^2 T \right) d\epsilon dv d\tau = \\ & = \iiint_{\mathcal{D}} G T \Big|_{\tau=\lambda} d\epsilon dv - \iiint_{\mathcal{D}} G T \Big|_{\tau=0} d\epsilon dv + \\ & + \alpha \int_0^\lambda \oint_{\sigma} \left(T \frac{\partial G}{\partial n} - G \frac{\partial T}{\partial n} \right) d\ell d\tau + \int_0^\lambda \iiint_{\mathcal{D}} T \left(-\frac{\partial G}{\partial \tau} - \alpha \nabla^2 G \right) d\epsilon dv d\tau \end{aligned} \quad (3.36)$$

Impondo que a função G seja uma solução da equação diferencial abaixo:

$$L^* G = -\frac{\partial G}{\partial \tau} - \alpha \nabla^2 G = \delta(\epsilon-x)\delta(v-y)\delta(\tau-t) \quad (3.37)$$

Obtemos a partir da equação 3.36 e da equação 3.29

$$\begin{aligned} T(x,y,t) = & - \iiint_{\mathcal{D}} G T \Big|_{\tau=\lambda} d\epsilon dv + \iiint_{\mathcal{D}} G T \Big|_{\tau=0} d\epsilon dv + \\ & - \alpha \int_0^\lambda \oint_{\sigma} \left(T \frac{\partial G}{\partial n} - G \frac{\partial T}{\partial n} \right) d\ell d\tau + \\ & + \int_0^\lambda \iiint_{\mathcal{D}} G \cdot f(\epsilon, v, \tau) d\epsilon dv d\tau \end{aligned} \quad (3.38)$$

A equação acima envolve valores não especificados da incógnita T . Não conhecemos T para $t = \lambda$ nem para $(x,y) \in \sigma_2$ e $(x,y) \in \sigma_3$. Também não conhecemos $\frac{\partial T}{\partial n}$ em σ_1 e σ_3 . Entretanto a imposição das condições de contorno para a função G equações 3.39, 3.40, 3.41 e 3.42 irá permitir que estes termos sejam eliminados.

$$G = 0 \text{ para } \tau = \lambda \quad (3.39)$$

$$G = 0 \text{ para } (\epsilon, \nu) \in \sigma_1 \quad (3.40)$$

$$\frac{\partial G}{\partial n} = 0 \text{ para } (\epsilon, \nu) \in \sigma_2 \quad (3.41)$$

$$\frac{\partial G}{\partial n} = - \frac{h}{k} G \text{ para } (\epsilon, \nu) \in \sigma_3 \quad (3.42)$$

Utilizando as equações 3.39, 3.40, 3.41 e 3.42 na equação 3.38 iremos obter:

$$\begin{aligned} T(x,y,t) = & \iiint_{\mathcal{D}} p(\epsilon, \nu) G \, d\epsilon \, d\nu + \\ & - \int_0^\lambda \int_{\sigma_1} r_1(\epsilon, \nu, \tau) \frac{\partial G}{\partial n} \, d\ell \, d\tau + \alpha \int_0^\lambda \int_{\sigma_2} r_2(\epsilon, \nu, \tau) G \, d\ell \, d\tau + \\ & + \alpha \int_0^\lambda \int_{\sigma_3} r_3(\epsilon, \nu, \tau) \frac{h}{k} G \, d\ell \, d\tau + \int_0^\lambda \iiint_{\mathcal{D}} f(\epsilon, \nu, \tau) G \, d\epsilon \, d\nu \, d\tau \quad (3.43) \end{aligned}$$

A equação acima permite a obtenção do campo de temperaturas caso a G seja uma solução da equação diferencial eq.3.37, sujeita às condições de contorno equações 3.39, 3.40, 3.41 e 3.42.

Observamos que, de maneira geral, as equações para obtenção da G são mais simples que o problema original pois as condições de contorno são homogêneas.

3.3 - Aplicação do Método da Função de Green em Problemas com Mudança de Fase.

O método de resolução, que vamos abordar aqui, tem sido chamado, também de método, da equação integral e de método da fonte móvel de calor. A principal utilização deste método se refere aos problemas em que as fases sólida e líquida não se movimentam, em que as propriedades não variam com a temperatura, as difusividades térmicas e as densidades de fases líquida e sólida são iguais. Neste ítem iremos seguir o material abordado na referência [14] a não ser quando há menção em contrário. O problema genérico que pode ser resolvido utilizando este método, é equacionado abaixo:

$$\frac{\partial T_S}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T_S \quad \text{para } t > 0 \text{ e } z < S(x,y,t) \quad (3.44)$$

$$\frac{\partial T_L}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T_L \quad \text{para } t > 0 \text{ e } z > S(x,y,t) \quad (3.45)$$

$$\text{(CONDIÇÕES INICIAIS PARA } T_S \text{ e } T_L \text{)} \quad (4.46)$$

$$\text{(CONDIÇÕES DE CONTORNO PARA AS FRONTEIRAS QUE SEPARAM O SISTEMA DO MEIO EXTERNO)} \quad (4.47)$$

$$T_S = T_L = T_f \quad \text{para } z = S(x,y,t) \quad (4.48)$$

$$H_{S_L} \rho_S \frac{\partial S}{\partial t} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2}} = (k_S \nabla T_S - k_L \nabla T_L) \cdot \vec{n} \quad (4.49)$$

Para $z = S(x,y,t)$

Inicialmente iremos efetuar uma mudança de variáveis para que possamos analisar os casos em que $k_S \neq k_L$, porém a análise só se aplica quando $\alpha_S = \alpha_L = \alpha$, definimos então:

$$\theta_S = \frac{T_S - T_f}{\Delta T} \quad \text{e} \quad \theta_L = \frac{k_S}{k_L} \frac{T_L - T_f}{\Delta T}$$

onde: ΔT é uma variação de temperatura tomada como referência.

O problema passa a ser definido pela equações:

$$\frac{\partial \theta_S}{\partial t} = \alpha \nabla^2 \theta_S \quad (3.50)$$

$$\frac{\partial \theta_L}{\partial t} = \alpha \nabla^2 \theta_L \quad (3.51)$$

$$\text{(CONDIÇÕES INICIAIS PARA } \theta_S \text{ e } \theta_L \text{)} \quad (3.52)$$

$$\text{(CONDIÇÕES DE CONTORNO NAS FRONTEIRAS } \sigma_S \text{ e } \sigma_L \text{)} \quad (3.53)$$

$$\theta_S = \theta_L = 0 \quad \text{para } z = S(x, y, t) \quad (3.54)$$

$$\frac{H_{S\ell}}{k_S \Delta T} \frac{\partial S}{\partial t} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2}} = (\nabla \theta_S - \nabla \theta_L) \cdot \vec{n} \quad (3.55)$$

O método aqui considerado consiste em substituir as equações 3.50, 3.51 e 3.55 pela equação diferencial abaixo:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \alpha \nabla^2 \theta + \frac{H_{S\ell}}{C_S \Delta T} \frac{\frac{\partial S}{\partial t}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2}} \delta \left[\frac{z - S(x, y, t)}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2}} \right] \quad (3.56)$$

$Ste = \frac{H_{S\ell}}{C_S \Delta T}$ - é um adimensional conhecido como número de Stefan. Este caracteriza a importância relativa da entalpia associada a mudança de fase e a entalpia associada a variação da temperatura, em um determinado problema.

A equação 3.50 para a fase sólida é idêntica à eq.3.51 para a fase líquida. Na equação 3.56 temos os mesmos termos que nas equações 3.50 e 3.51, mais um termo fonte de calor que torna automaticamente satisfeita a condição de contorno eq.3.55. A posição onde atua esta fonte de calor é nos pontos onde o argumento da função δ de Dirac é nulo, o que corresponde a $z = S(x,y,t)$ ou seja os pontos da frente de mudança de fase. A intensidade da fonte é dada pelo termo que multiplica a função δ . Desta forma, o termo extra, que aparece na equação 3.56, leva em conta a entalpia de fusão e substitui a equação 3.55, como iremos constatar mais abaixo.

Vamos demonstrar que qualquer solução da equação 3.56 é uma solução da equação 3.50. Integrando a equação 3.56 em uma região D_s , contendo somente a fase sólida, teremos sempre $z < S(x,y,t)$ e desta forma o argumento da função δ não há irá se anular. Devido a propriedade dada pela equação 3.27 do item 3.2, a integral do termo que envolve a função δ será nula. Assim obtemos:

$$\iiint_{D_s} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} - \alpha \nabla^2 \theta \right) dx dy dz = 0 \quad (3.57)$$

Como a região de integração é qualquer, desde que no interior da fase sólida, então o integrando é nulo e constatamos que é válida a equação 3.50. Fazendo a integração em uma região D_l qualquer da fase líquida verificamos, de maneira análoga, que a equação 3.51 também é atendida.

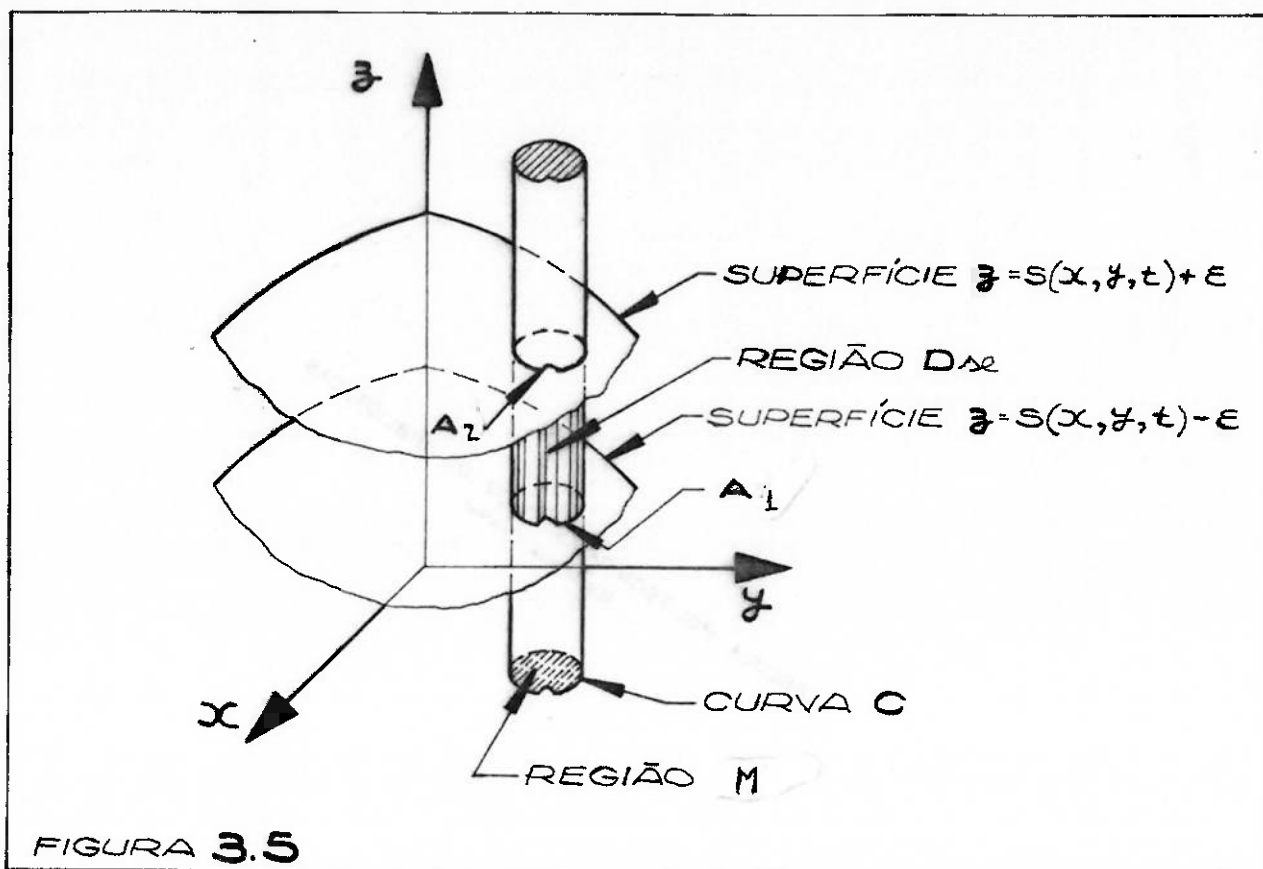
Para demonstrarmos que a condição de contorno dada pela equação 3.55 é atendida, iremos integrar a equação 3.56 na região D_{sl} que será especificada a seguir. Esta demonstração foi desenvolvida tomando como base uma sugestão apresentada na referência [14].

Para definirmos a região de integração vamos supor uma região M genérica, do plano $z = 0$, delimitada pela curva fechada C como mostra a figura 3.5. A integração será efetuada na região D_{sl} conforme especificado abaixo:

$$(x,y,z) \in \mathcal{D}_{\epsilon} \leftrightarrow \begin{cases} (x,y) \in M \\ S(x,y,t) - \epsilon \leq z \leq S(x,y,t) + \epsilon \end{cases} \quad (3.58)$$

onde: $\epsilon > 0$

A região \mathcal{D}_{ϵ} consiste, então, no cilindro paralelo ao eixo z , cuja secção transversal é a região R , limitada pelas superfícies $z = S(x,y,t) - \epsilon$ e $z = S(x,y,t) + \epsilon$



O termo da equação 3.56 que envolve o laplaciano pode ser desenvolvido utilizando o teorema da divergência:

$$\begin{aligned} \iint_M \int_{S-\epsilon}^{S+\epsilon} \nabla^2 \theta \, dz \, dx \, dy &= \iint_{A_1} \frac{\partial \theta}{\partial n} \, dA_1 + \iint_{A_2} \frac{\partial \theta}{\partial n} \, dA_2 + \\ &+ \oint_C \int_{S-\epsilon}^{S+\epsilon} \frac{\partial \theta}{\partial n} \, dz \, ds \end{aligned} \quad (3.59)$$

onde: A_1 - é a superfície inferior na fig. 3.5

A_2 - é a superfície superior

$\frac{\partial \theta}{\partial n}$ - é a derivada na direção da normal externa à região

ds - é um elemento de arco da curva C

dA_1 - é um elemento da superfície A_1

dA_2 - é um elemento da área da superfície A_2

Na equação 3.59 as integrais nas superfícies A_1 e A_2 podem ser convertidas em integrais na região M .

$$\int_{A_1} \left[\frac{\partial \theta}{\partial n} dA_1 \right] = \int_M \left[\frac{\partial \theta}{\partial n} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2} \right]_{z=S-\epsilon} dx dy \quad (3.60)$$

$$\int_{A_2} \left[\frac{\partial \theta}{\partial n} dA_2 \right] = \int_M \left[\frac{\partial \theta}{\partial n} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2} \right]_{z=S+\epsilon} dx dy \quad (3.61)$$

O termo envolvendo a função δ pode ser desenvolvido com a mudança de variáveis:

$$u = \frac{z - S(x,y,t)}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2}} = [z - s(x,y,t)] \vec{n} \cdot \vec{k} \quad (3.62)$$

Na expressão acima, a última igualdade decorre da eq. 3.13. Utilizando esta mudança de variáveis obtemos:

$$\begin{aligned}
& \iint_M \int_{S-\epsilon}^{S+\epsilon} \frac{\frac{\partial S}{\partial t}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2}} \delta \left[\frac{z - s(x,y,t)}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2}} \right] dz dx dy = \\
& = \iint_M \int_{-\epsilon(\vec{n} \cdot \vec{k})}^{+\epsilon(\vec{n} \cdot \vec{k})} \frac{\partial S}{\partial t} \delta(u) du dx dy = \\
& = \iint_M \frac{\partial S}{\partial t} dx dy \tag{3.63}
\end{aligned}$$

Utilizando as equações 3.59, 3.60, 3.61 e 3.63 podemos expressar a integral da equação 3.56, na região \mathcal{D}_{ϵ} , como:

$$\begin{aligned}
& \iint_M \int_{S-\epsilon}^{S+\epsilon} \frac{\partial \theta}{\partial t} dz dx dy = \\
& = \iint_M \left\{ \alpha \left[\frac{\partial \theta}{\partial n} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2} \right]_{z=S-\epsilon} + \alpha \left[\frac{\partial \theta}{\partial n} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2} \right]_{z=S+\epsilon} + \right. \\
& \left. + \frac{H_{S\ell}}{C_S \Delta T} \frac{\partial S}{\partial t} \right\} dx dy + \oint_C \int_{S-\epsilon}^{S+\epsilon} \frac{\partial \theta}{\partial n} dz ds \tag{3.64}
\end{aligned}$$

Levando agora ao limite para $\epsilon \rightarrow 0$ o termo, no lado esquerdo da equação 3.64, tende a zero, pois o volume de integração se

degenera em superfície e a função integrando é limitada. O último termo da equação 3.64 também tende a zero pois a superfície se degenera em uma linha e a função integrando é limitada. O termo $\frac{\partial \theta}{\partial n}$ em $z = S - \epsilon$ tende a $-\nabla \theta_s \cdot \vec{n}$ enquanto que o termo em $z = S + \epsilon$ tende a $\nabla \theta_l \cdot \vec{n}$, devido à orientação escolhida para o vetor \vec{n} na equação 3.12 do item 3.1. Assim obtivemos:

$$\iint_M \left\{ \alpha \left[\nabla \theta_l - \nabla \theta_s \right] \cdot \vec{n} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2} + \frac{H_{sl}}{C_s \Delta T} \frac{\partial S}{\partial t} \right\} dy dx = 0 \quad (3.65)$$

Como a região de integração M é arbitrária então o integrando é nulo. Desta forma demonstramos que a condição de contorno, dada pela equação 3.55, é atendida.

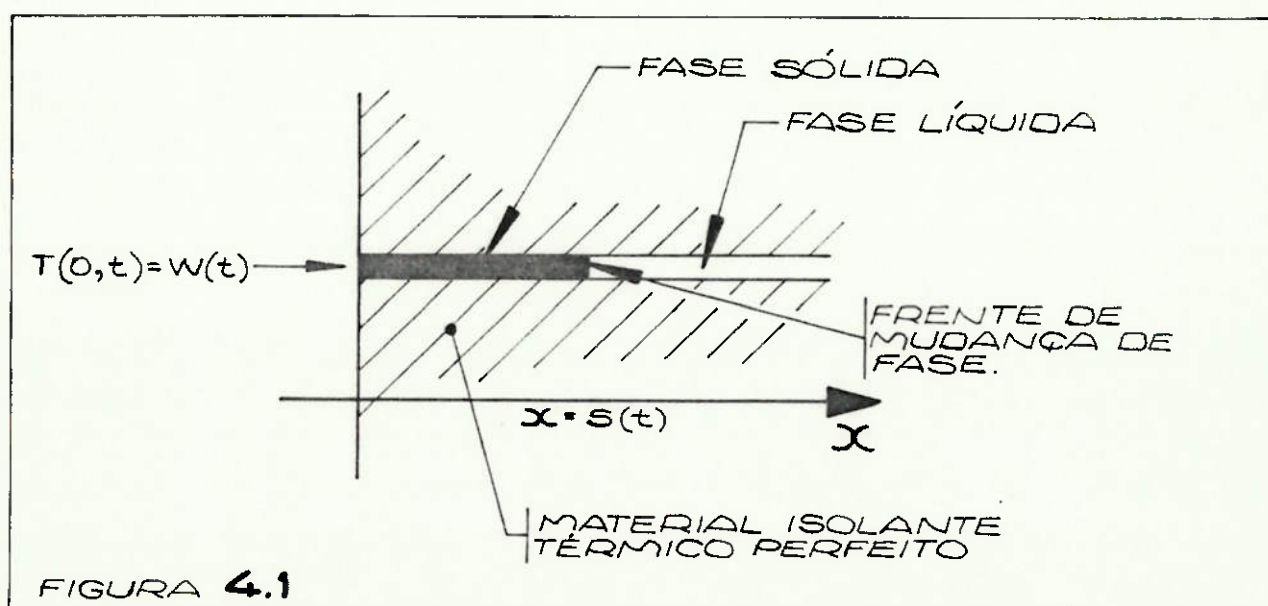
O método da função de Green consiste, inicialmente, em resolver a equação 3.56 com as condições de contorno eq. 3.52 e equação 3.53. A resolução destas equações envolve um termo não homogêneo que não é conhecido a priori, pois depende de conhecermos o comportamento da frente de solidificação, especificado pela função "S(x,y,t)". Desta forma a resolução da equação 3.56, com as condições equação 3.52 e equação 3.53, deve ser obtida por meio de um método analítico. Um método numérico não permite que o problema seja resolvido com um termo não homogêneo, não especificado. A maioria dos trabalhos tem adotado o método das funções de Green para resolver as equações. Uma vez resolvido o problema dado pela equação 3.56, com condições equações 3.52 e equação 3.53, podemos impor a condição de contorno equação 3.54. Assim iremos obter uma equação integral cuja incógnita é a função que define as posições da frente de solidificação.

4. APLICAÇÃO DO MÉTODO DA FUNÇÃO DE GREEN NA RESOLUÇÃO DO PROBLEMA

A resolução do problema será abordada em etapas de crescente complexidade. Inicialmente iremos abordar o problema com temperatura imposta em $x = 0$, depois o problema com fluxo de calor imposto e finalmente o problema com trocas de calor por convecção.

4.1- Problema com Temperatura Imposta

Iremos tratar neste ítem do problema da solidificação de uma barra semi-infinita com as superfícies laterais isoladas, contendo inicialmente em seu interior material líquido a uma temperatura inicial T_i superior a temperatura de fusão T_f . Na extremidade $x = 0$ da barra a temperatura é variada de alguma forma, de acordo com a função $T(0,t)=W(t)$, como pode ser observado na figura 4.1. Iremos supor que a temperatura em $x=0$ é sempre inferior a temperatura de fusão e que a fase líquida não se movimenta. As propriedades físicas são supostas independentes da temperatura e do estado de agregação.



A formulação do problema pode ser dada pelas seguintes equações:

$$\frac{\partial T_S}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T_S}{\partial x^2} \quad \text{para } 0 < x < S(t) \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial T_L}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T_L}{\partial x^2} \quad \text{para } x > S(t) \quad (4.2)$$

$$T(x, 0) = T_i \quad (4.3)$$

$$T_S(0, t) = W(t) \quad (4.4)$$

$$T_S[S(t), t] = T_L[S(t), t] = T_f \quad (4.5)$$

$$k \left\{ \frac{\partial T_S}{\partial x} [S(t), t] - \frac{\partial T_L}{\partial x} [S(t), t] \right\} = H_{SL} \rho \frac{dS}{dt} \quad (4.6)$$

Seguindo o procedimento delineado no ítem 3.3 do Capítulo 3, substituiremos as equações 4.1, 4.2 e 4.6 pela equação diferencial:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{H_{SL}}{C} \frac{dS}{dt} \delta[x-S(t)] \quad (4.7)$$

A solução deverá obedecer as condições de contorno dadas pelas equações 4.3 e 4.4, enquanto que o comportamento da frente de solidificação é mantido como uma incógnita e será obtido posteriormente pela aplicação da condição de contorno 4.5.

Para resolvermos a equação 4.7 com as condições 4.3 e 4.4 utilizaremos o método das funções de Green (ver ítem 3.2 do Capítulo 3). Mudamos então as variáveis x e t para ϵ e τ , multiplicamos o lado esquerdo da Eq.4.7 por uma função G e integramos no domínio de interesse como indicado no lado esquerdo da Eq.4.8 Mudando a ordem de integração e utilizando integração por partes obtemos:

$$\begin{aligned}
& \int_0^\lambda \int_0^\infty \left(\frac{\partial T}{\partial \tau} - \frac{\partial^2 T}{\partial \epsilon^2} \right) G \, d\epsilon \, d\tau = \\
& = \int_0^\infty [GT]_{\tau=0}^{\tau=\lambda} \, d\epsilon - \alpha \int_0^\lambda \left[G \frac{\partial T}{\partial \epsilon} - T \frac{\partial G}{\partial \epsilon} \right]_{\epsilon=0}^{\epsilon+\infty} \, d\tau + \\
& + \int_0^\lambda \int_0^\infty T \left(- \frac{\partial G}{\partial \epsilon} - \alpha \frac{\partial^2 G}{\partial \epsilon^2} \right) \, d\epsilon \, d\tau \quad (4.8)
\end{aligned}$$

onde: λ - um instante de tempo além do qual não há interesse na solução.

Caso a função G seja uma solução da equação diferencial 4.9 e atenda as condições 4.10, 4.11 e 4.12:

$$\frac{\partial G}{\partial \tau} + \alpha \frac{\partial^2 G}{\partial \epsilon^2} = -\delta(\epsilon-x)\delta(\tau-t) \quad (4.9)$$

$$G = 0 \quad \text{para} \quad \tau = \lambda \quad (4.10)$$

$$G = 0 \quad \text{para} \quad \epsilon = 0 \quad (4.11)$$

$$G \rightarrow 0 \quad \text{para} \quad \epsilon \rightarrow \infty$$

Então a equação 4.8 será equivalente a equação 4.13:

$$\begin{aligned}
T(x,t) = & \int_0^\infty T_1 G \Big|_{\tau=0} \, d\epsilon + \alpha \int_0^\lambda W(\tau) \frac{\partial G}{\partial \epsilon} \Big|_{\epsilon=0} \, d\tau + \\
& + \frac{H_{S\ell}}{C} \int_0^\lambda \dot{S}(\tau) G \Big|_{\epsilon=S(t)} \, d\tau \quad (4.13)
\end{aligned}$$

Segundo a referência [52], a função G dada pela equação 4.14 é uma solução da equação 4.9 e atende as condições 4.10, 4.11 e 4.12.

$$G(\epsilon, \tau; x, t) = \frac{H(t-\tau)}{2\sqrt{\alpha\pi(t-\tau)}} \left\{ e^{\frac{-(\epsilon-x)^2}{4\alpha(t-\tau)}} - e^{\frac{-(\epsilon+x)^2}{4\alpha(t-\tau)}} \right\} \quad (4.14)$$

onde: $H(t)$ é a função de Heaviside

$$H(t) = \begin{cases} 0 & \text{para } t < 0 \\ 1 & \text{para } t > 0 \end{cases}$$

Substituindo a equação 4.14 na 4.13 obtemos:

$$\begin{aligned} T(x, t) = & \int_0^\infty T_i \frac{1}{2\sqrt{\alpha\pi t}} \left\{ e^{\frac{-(\epsilon-x)^2}{4\alpha t}} - e^{\frac{-(\epsilon+x)^2}{4\alpha t}} \right\} d\epsilon + \\ & \int_0^t W(\tau) \frac{x}{2\sqrt{\alpha\pi}} \frac{e^{\frac{-x^2}{4\alpha(t-\tau)}}}{(t-\tau)^{3/2}} d\tau + \\ & + \frac{H_{Sk}}{C} \int_0^t \dot{S}(\tau) \frac{1}{2\sqrt{\alpha\pi(t-\tau)}} \left\{ e^{\frac{-[S(\tau)-x]^2}{4\alpha(t-\tau)}} - e^{\frac{-[S(\tau)+x]^2}{4\alpha(t-\tau)}} \right\} d\tau \quad (4.15) \end{aligned}$$

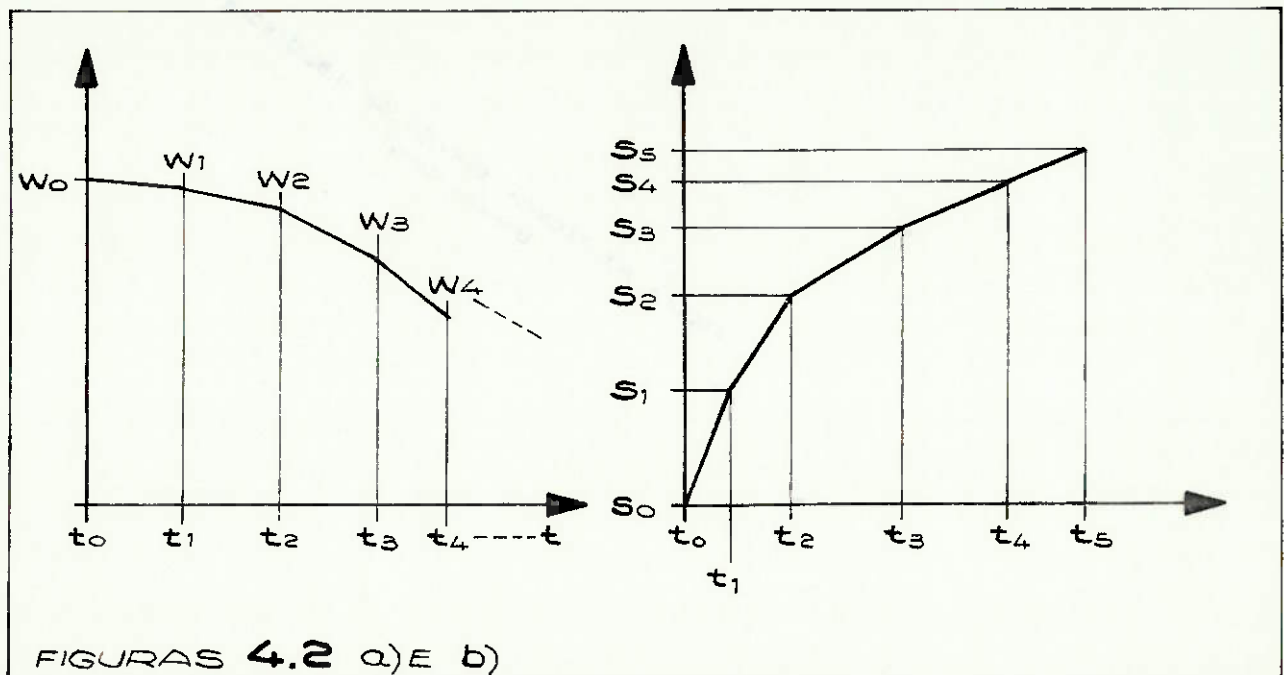
Fazendo a mudança de variáveis $T^* = T - T_i$ podemos eliminar o termo envolvendo a condição inicial na equação 4.15. Retornando posteriormente as variáveis iniciais obtemos:

$$\begin{aligned} T(x, t) - T_i = & \int_0^t [W(\tau) - T_i] \frac{x}{2\sqrt{\alpha\pi(t-\tau)}} \frac{e^{\frac{-x^2}{4\alpha(t-\tau)}}}{(t-\tau)^{3/2}} d\tau + \\ & + \frac{H_{Sk}}{C} \int_0^t \frac{S(\tau)}{2\sqrt{\alpha\pi(t-\tau)}} \left\{ e^{\frac{-[S(\tau)-x]^2}{4\alpha(t-\tau)}} - e^{\frac{-[S(\tau)+x]^2}{4\alpha(t-\tau)}} \right\} d\tau \quad (4.16) \end{aligned}$$

A particularização que foi feita para a condição inicial, considerando esta uniforme, não se constitui em uma limitação do método aqui considerado. Poderíamos considerar uma outra condição inicial, substituindo esta na equação 4.15 e efetuando a integral.

A solução completa do problema depende da obtenção da função $S(t)$. Uma vez obtida esta função podemos substituí-la na 4.16 e efetuando a integral obteremos o perfil de temperaturas.

Vamos agora considerar um método numérico para efetuar as integrais indicadas na equação 4.16. Utilizaremos o procedimento descrito na ref. [10]. Iremos sub-dividir o intervalo de integração de 0 a t em n sub-intervalos delimitados pelos instantes de tempo $t_0, t_1, t_2, \dots, t_n$ onde $t_{k-1} < t_k$ ($k=1, 2, \dots, n$), $t_0=0$ e $t_n=t$. Iremos fazer uma aproximação supondo que o comportamento das funções W e S é linear no interior de cada intervalo $[t_{k-1}, t_k]$, como mostram as figuras 4.2a) e 4.2.b).



O comportamento das funções seria, então, dado de forma aproximada pelas equações 4.17 e 4.18, onde a_k, b_k, A_k e B_k são determinados a partir dos valores de S e W nos instantes t_{k-1} e t_k .

$$S(t) \cong a_k t + b_k \quad \text{para } t_{k-1} \leq t \leq t_k \quad (4.17)$$

$$W(t) \cong A_k t + B_k \quad \text{para } t_{k-1} \leq t \leq t_k \quad (4.18)$$

Com base nas equações 4.17 e 4.18 podemos calcular de forma aproximada as integrais indicadas na equação 4.16 obtendo assim a equação 4.19.

$$T(x,t) - T_i \cong I1(x,t) + I2(x,t) \quad (4.19)$$

Na equação acima $I1$ corresponde a integral envolvendo W enquanto que $I2$ corresponde a integral envolvendo a função S . As expressões para $I1$ e $I2$ estão no apêndice 1. A medida que diminuirmos os intervalos $[t_{k-1}, t_k]$ menor será o erro cometido no cálculo das integrais, tornando menor o erro envolvido na equação 4.19.

No problema proposto, a temperatura em $x=0$ $W(t)$ é conhecida e então não seria necessário calcular a integral, envolvendo esta função, de forma aproximada. Em muitos casos esta integral poderá ser calculada de maneira exata, entretanto o cálculo aproximado será útil nos desenvolvimentos sub-sequentes.

Para obtermos as posições da frente de solidificação deveremos impor a condição de contorno equação 4.5, isto será feito de maneira aproximada utilizando o procedimento desenvolvido na ref. [10]. Iremos impor a condição equação 4.5 nos instantes t_k utilizando a equação 4.19.

Iremos inicialmente impôr a condição 4.5 no instante t_1 utilizando a equação 4.19 com $n=1$, isto é, utilizando apenas um trecho de reta para efetuar a integração.

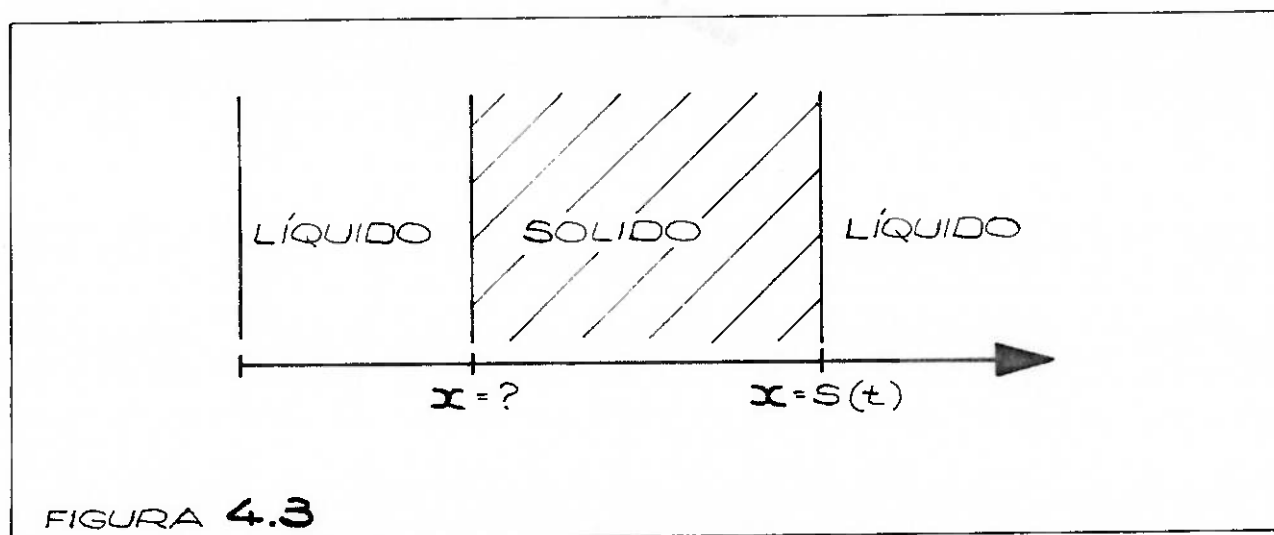
$$T_f - T_i = I1(S_1, t_1) + \frac{H_{sl}}{C} I2(S_1, t_1) \quad (4.20)$$

Esta equação não-linear envolvendo a incógnita S_1 deve ser resolvida por algum método. Após a obtenção de S_1 podemos impor a condição equação 4.5 no instante t_2 , utilizando dois trechos de reta ($n=2$) para efetuar as integrais:

$$T_f - T_i = I1(S_2, t_2) + \frac{H_{sl}}{C} I2(S_2, t_2) \quad (4.21)$$

Novamente obtivemos uma equação não-linear que agora deve ser resolvida para a incógnita S_2 . O processo pode ser repetido sucessivamente para obtermos S_3, S_4, \dots etc., cada passo utilizando os valores anteriormente determinados de S_k para calcular as integrais.

No início deste item foi imposta a condição de que a temperatura em $x=0$ $W(t)$ fosse sempre inferior a temperatura de fusão T_f . Está implícita nesta condição a ocorrência de apenas uma frente de mudança de fase, pois caso permitíssemos que esta temperatura assumisse valores acima de T_f teríamos que levar em conta a fusão de material anteriormente solidificado como mostra a fg.4.3.



O caso em que $W > T_f$ para $0 < t < t_i$ e $W < T_f$ para $t > t_i$, pode ser resolvido se mantivermos $S=0$ para $0 < t < t_i$. Desta forma a integral, envolvendo a posição da frente de solidificação, irá se anular. Para $t > t_i$ calculamos normalmente os S_k utilizando o procedimento anterior.

4.2- Problema com Fluxo de Calor Imposto

Iremos abordar o problema proposto pelas equações 4.1, 4.2, 4.3, 4.5 e 4.6. Ao invés de considerarmos a condição de temperatura imposta em $x=0$ dada pela equação 4.4, iremos levar em conta a condição de contorno de fluxo de calor imposto.

$$-k \frac{\partial T_l}{\partial x} (0,t) = \dot{q}''(t) \quad \text{para } 0 < t < t_i \quad (4.22)$$

$$-k \frac{\partial T_s}{\partial x} (0,t) = \dot{q}''(t) \quad \text{para } t > t_i \quad (4.23)$$

Novamente devemos tomar alguns cuidados para evitar o aparecimento de mais de uma frente de mudança de fase. Iremos supor que após o instante t_i em que a temperatura em $x=0$ atinge T_f \dot{q}'' é sempre negativo.

A resolução será baseada nos desenvolvimentos do item anterior. A equação 4.16 é uma solução das equações 4.1, 4.2, 4.3 e 4.6, porém neste caso além de não conhecermos $S(t)$ também não conhecemos $W(t)$.

Resolvemos o problema de forma aproximada calculando, a partir da equação 4.19, o gradiente de temperaturas:

$$\frac{\partial T}{\partial x} (x,t) \approx I6 (x,t) + \frac{H_{sl}}{c} I7(x,t) \quad (4.24)$$

onde: $I6 = \frac{\partial I1}{\partial x}$ e $I7 = \frac{\partial I2}{\partial x}$

As expressões para $I6$ e $I7$ podem ser encontradas no Apêndice 1. Podemos agora impor as condições de contorno dadas pelas equações 4.5, 4.22 e 4.23 nos instantes t_k utilizando as equações 4.19 e 4.24. Para cada instante t_k obtemos um sistema de duas equações não-lineares envolvendo como incógnitas S_k e W_k :

$$I1(S_k, t_k) + \frac{H_{sl}}{c} I2(S_k, t_k) = T_f - T_i \quad (4.25)$$

$$I6(0, t_k) + \frac{H_{sl}}{c} I7(0, t_k) = -\frac{\dot{q}''}{k} (t_k) \quad (4.26)$$

Este sistema de equações pode então ser resolvido por algum método para obtermos S_1 e W_1, S_2 e W_2, S_3 e W_3, \dots /. A cada passo utilizamos os valores anteriormente calculados para computar as integrais I1, I2, I6 e I7. Caso a solidificação não tenha se iniciado basta resolver a equação 4.26 para obter W_k pois $S_k = 0$.

4.3- Problema com Trocas de Calor por Convecção.

Iremos abordar novamente o problema dado pelas equações 4.1, 4.2, 4.3, 4.5 e 4.6, levando em conta a condição de contorno dada pelas equações 4.27 e 4.28, esta corresponde a trocas de calor por convecção com coeficiente de trocas variável.

$$k \frac{\partial T_l}{\partial x} (0, t) = h(t) [T_l(0, t) - T_\infty] \text{ para } 0 < t < t_i \quad (4.27)$$

$$k \frac{\partial T_s}{\partial x} (0, t) = h(t) [T_s(0, t) - T_\infty] \text{ para } t \geq t_i \quad (4.28)$$

Da mesma maneira que fizemos anteriormente iremos impor as condições de contorno equações 4.5, 4.27 e 4.28 nos instantes t_k utilizando as equações 4.19 e 4.24. Novamente, para cada instante t_k obtemos um sistema de duas equações não-lineares nas incógnitas S_k e W_k :

$$I1(S_k, t_k) + \frac{H_{sl}}{c} I2(S_k, t_k) = T_f - T_i \quad (4.29)$$

$$\frac{h(t_k)}{k} [W_k - T_\infty] = I6(0, t_k) + \frac{H_{sl}}{c} I7(0, t_k) \quad (4.30)$$

Da mesma forma como no item anterior, este sistema de equações pode ser resolvido para obtermos S_1 e W_1 , S_2 e W_2 , S_3 e W_3 , .../. A cada passo utilizamos os valores anteriormente obtidos para calcular as integrais. Caso a solidificação não tenha se iniciado basta resolver a equação 4.30 para W_k , mantendo $S_k = 0$.

5 - RESULTADOS

Todos os resultados, aqui apresentados, foram obtidos em uma CPU IBM-3090 Modelo 18E, com sistema operacional VM/CMS versão 4.2 (IBM). O compilador para FORTRAN IV, utilizado, foi o G1 versão 2.0 (IBM). Todos os tempos de processamento estão em segundos.

5.1- Método da Função de Green

Iremos abordar uma especialização do problema descrito na introdução, considerando a temperatura inicial da fase líquida T_i igual a temperatura de fusão T_f e levando em conta um coeficiente de transmissão de calor por convecção constante. Para este problema, não é necessário calcular as temperaturas na fase líquida pois estas serão sempre iguais a temperatura de fusão T_f . Iremos efetuar uma adimensionalização das variáveis como indicado abaixo:

$$x^* = \frac{hx}{k} ; \quad t^* = \frac{h^2}{k^2} \alpha t ; \quad \theta = \frac{T - T_\infty}{T_f - T_\infty}$$

O equacionamento do problema será dado por:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t^*} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^{*2}} \quad (5.1)$$

$$\theta = 1 \quad \text{para} \quad t^* = 0 \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x^*} = \theta \quad \text{para} \quad x^* = 0 \quad (5.3)$$

$$\theta(S^*, t^*) = 1 \quad (5.4)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x^*} = Ste \frac{dS^*}{dt^*} \quad \text{para } x^* = S^* \quad (5.5)$$

onde

$$Ste = \frac{H_{sl}}{C(T_f - T_\infty)} \quad \text{e} \quad S^* = \frac{hs}{k}$$

Foi elaborado um programa de computador implementando o método de resolução apresentado no item 4.3. Os sistemas de equações não-lineares foram resolvidos utilizando o método de Newton Raphson, descrito no apêndice 2. A estimativa inicial para as raízes foi obtida da solução aproximada de London & Seban [25], para o primeiro par de raízes, para as outras raízes a estimativa inicial foi obtida por extrapolação linear com base nas raízes anteriores. O programa FORTRAN está apresentado no apêndice 3.

O programa de computador foi utilizado para obtermos as posições da frente de solidificação S^* e as temperaturas em $x^* = 0$ θ_0 , para $Ste = 0,5$, que corresponde aproximadamente ao caso de lingotamento contínuo de aço. Foram obtidos os resultados para t^* variando de 0 a 10. Foram considerados 5 valores diferentes para os intervalos de tempo entre cada avaliação das raízes Δt^* . Caso 1: $\Delta t^* = 1.0$; caso 2: $\Delta t^* = 0.5$; Caso 3: $\Delta t^* = 0.25$; Caso 4: $\Delta t^* = 0.125$; e Caso 5: $\Delta t^* = 0.0625$. Cada caso corresponde a um Δt^* igual a metade do caso anterior. Os erros percentuais máximos admitidos na obtenção das raízes foram de 0,05%, nos casos 1 e 2, e 0,01% nos casos 3, 4 e 5. Na tabela 5.1 temos os resultados para S^* e na tabela 5.2 temos os resultados para θ_0 . Nestas tabelas, a coluna a direita dos resultados para cada caso, com exceção do caso 1, corresponde a variação percentual em relação ao caso anterior. Podemos notar que esta variação percentual é sempre menor, a cada novo processamento, sendo aproximadamente a metade do valor anterior. Isto é uma indicação de que está ocorrendo convergência. A medida que diminuimos o intervalo Δt^* estamos nos aproximando da solução real do problema. Iremos utilizar a variação percentual, em relação ao caso anterior, como uma medida da precisão dos resultados obtidos.

TABELA 5.1

METODO DA FUNCAO DE GREEN
(METODO DE NEWTON P/ RESOLUCAO DOS SIST. N LINEARES)

POSICAO DA FRENTE DE SOLIDIFICACAO PARA STEE=0.5

CASO 1: DT= 1.0000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.13 S
 CASO 2: DT= 0.5000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.43 S
 CASO 3: DT= 0.2500 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 1.63 S
 CASO 4: DT= 0.1250 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 5.73 S
 CASO 5: DT= 0.0625 TEMPO DE PROCESSAMENTO=23.80 S

TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2(%)	CASO 3	(2-3)/3(%)	CASO 4	(3-4)/4(%)	CASO 5	(4-5)/5(%)
1.00	0.7739	0.2756	-11.515	0.9343	-5.283	0.9530	-2.980	0.9757	-1.302
2.00	1.3721	1.4303	-6.935	1.5311	-3.285	1.5540	-1.474	1.5638	-0.627
3.00	1.9504	1.9520	-4.771	2.0050	-2.145	2.0244	-0.958	2.0328	-0.413
4.00	2.2904	2.3734	-3.331	2.4110	-1.560	2.4282	-0.708	2.4355	-0.300
5.00	2.6503	2.7336	-2.337	2.7722	-1.212	2.7878	-0.560	2.7942	-0.229
6.00	2.9987	3.0704	-2.335	3.1010	-0.937	3.1153	-0.459	3.1210	-0.183
7.00	3.3099	3.3757	-1.973	3.4040	-0.825	3.4131	-0.319	3.4233	-0.152
8.00	3.5893	3.6527	-1.717	3.6355	-0.702	3.7003	-0.330	3.7058	-0.135
9.00	3.8724	3.9313	-1.511	3.9559	-0.609	3.9675	-0.292	3.9721	-0.116
10.00	4.1303	4.1069	-1.352	4.2034	-0.535	4.2193	-0.246	4.2244	-0.109

TABELA 5.2

METODO DA FUNCAO DE GREEN
(METODO DE NEWTON P/ RESOLUCAO DOS SIST. N LINEARES)

TEMPERATURAS PARA STE=0.5

CASO 1: DT= 1.0000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.13 S
 CASO 2: DT= 0.5000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.43 S
 CASO 3: DT= 0.2500 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 1.63 S
 CASO 4: DT= 0.1250 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 5.73 S
 CASO 5: DT= 0.0625 TEMPO DE PROCESSAMENTO=23.80 S

TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2(%)	CASO 3	(2-3)/3(%)	CASO 4	(3-4)/4(%)	CASO 5	(4-5)/5(%)
1.00	0.62081	0.58459	5.196	0.56680	3.139	0.55906	1.384	0.55581	0.585
2.00	0.47746	0.45643	4.607	0.44761	1.970	0.44382	0.854	0.44221	0.364
3.00	0.40183	0.38854	3.394	0.38333	1.385	0.38097	0.619	0.37995	0.268
4.00	0.35374	0.34476	2.605	0.34115	1.058	0.33949	0.489	0.33880	0.204
5.00	0.31985	0.31324	2.110	0.31061	0.947	0.30937	0.401	0.30890	0.152
6.00	0.29428	0.29913	1.791	0.29715	0.690	0.29617	0.342	0.28580	0.129
7.00	0.27407	0.26971	1.541	0.26835	0.578	0.26764	0.259	0.26734	0.112
8.00	0.25756	0.25410	1.362	0.25287	0.486	0.25230	0.226	0.25197	0.131
9.00	0.24374	0.24080	1.221	0.23981	0.413	0.23938	0.180	0.23905	0.138
10.00	0.23194	0.22940	1.107	0.22859	0.354	0.22823	0.158	0.22797	0.114

Posteriormente, foi elaborado um outro programa de computador, utilizando o método da secante para obtenção das raízes. Este método requer apenas uma avaliação das funções envolvidas nas equações não-lineares, para cada iteração, enquanto que o método de Newton, devido ao cálculo numérico das derivadas, requer três avaliações para cada função envolvida nas equações não-lineares. Cada avaliação das funções é um passo que consome tempo de computação. Esperava-se então que a utilização do método da secante resultasse em economia de tempo de processamento.

O método da secante, descrito no apêndice 2, foi então implementado, resultando no programa de computador apresentado no apêndice 4. As três estimativas iniciais necessárias para a utilização deste método, para o primeiro par de raízes, foram obtidas da solução aproximada de London & Seban[25] com incrementos correspondentes aos erros máximos permitidos para as duas raízes. Para as outras raízes foram utilizados os valores obtidos por extrapolação linear, com base nas raízes anteriores, também com incrementos correspondentes aos erros máximos permitidos para as raízes. Este programa foi utilizado para obter os resultados para os mesmos casos abordados anteriormente com o método de Newton. Os erros máximos admissíveis para as raízes foram os mesmos que nos casos abordados com o método de Newton. Os resultados para S^* estão apresentados na tabela 5.3 e os resultados para θ_0 estão apresentados na tabela 5.4.

Uma comparação entre os resultados apresentados nas tabelas 5.1 e 5.3, bem como os resultados apresentados nas tabelas 5.2 e 5.4, mostra que houve boa concordância entre estes. As diferenças que ocorreram são compatíveis com os erros admitidos para o cálculo das raízes. Os tempos de processamento obtidos, com a utilização do método de Newton, foram de 1,6 a 2,2 vezes maiores que os obtidos com o método da secante. Segundo Rice [53] deve-se tomar cuidado ao generalizar resultados obtidos em um ambiente computacional para outros ambientes. Podem ocorrer grandes diferenças mesmo quando são usadas diferentes versões de um mesmo compilador. Entretanto a semelhança entre os procedimentos utilizados nos dois programas fornece uma indicação de que a tendência de ganho de tempo computacional, quando da utilização do método da secante, deverá se manter.

TABELA 5.3

METODO DA FUNCAO DE GREEN
(METODO DA SECANTE PARA RESOLUCAO SIST. NAO LINEARES)

POSICOES ADIMENSIONAIS DA FRENTE DE SOLIDIFICACAO
STE=0.5

CASO 1: DT= 1.0000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.08 S
CASO 2: DT= 0.5000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.23 S
CASO 3: DT= 0.2500 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.33 S
CASO 4: DT= 0.1250 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 3.24 S
CASO 5: DT= 0.0625 TEMPO DE PROCESSAMENTO=10.82 S

TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2(%)	CASO 3	(2-3)/3(%)	CASO 4	(3-4)/4(%)	CASO 5	(4-5)/5(%)
1.00	0.7745	0.8757	-11.556	0.9343	-6.272	0.9630	-2.980	0.9757	-1.302
2.00	1.3783	1.4809	-6.928	1.5311	-3.279	1.5540	-1.474	1.5638	-0.627
3.00	1.8686	1.9621	-4.765	2.0050	-2.140	2.0244	-0.958	2.0328	-0.413
4.00	2.2885	2.3734	-3.577	2.4110	-1.560	2.4282	-0.708	2.4356	-0.304
5.00	2.6610	2.7386	-2.834	2.7722	-1.212	2.7878	-0.560	2.7944	-0.236
6.00	2.9933	3.0705	-2.335	3.1010	-0.984	3.1153	-0.459	3.1211	-0.186
7.00	3.3099	3.3768	-1.981	3.4048	-0.822	3.4181	-0.389	3.4232	-0.152
8.00	3.5999	3.6627	-1.715	3.6986	-0.702	3.7011	-0.338	3.7059	-0.130
9.00	3.8724	3.9319	-1.513	3.9559	-0.607	3.9678	-0.300	3.9722	-0.111
10.00	4.1304	4.1870	-1.352	4.2094	-0.532	4.2206	-0.265	4.2246	-0.095

TABELA 5.4

METODO DA FUNCAO DE GREEN
(METODO DA SECANTE PARA RESOLUCAO SIST. NAU LINEARES)

TEMPERATURAS ADIMENSIONAIS EM X=0
STE=0.5

CASO 1: DT= 1.0000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.08 S
CASO 2: DT= 0.5000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.23 S
CASO 3: DT= 0.2500 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.93 S
CASO 4: DT= 0.1250 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 3.24 S
CASO 5: DT= 0.0625 TEMPO DE PROCESSAMENTO=10.82 S

TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2(%)	CASO 3	(2-3)/3(%)	CASO 4	(3-4)/4(%)	CASO 5	((4-5)/5(%)
1.00	0.62072	0.59453	6.191	0.56679	3.130	0.55976	1.383	0.55581	0.585
2.00	0.47741	0.45641	4.601	0.44760	1.968	0.44382	0.852	0.44221	0.364
3.00	0.40181	0.38863	3.391	0.38333	1.383	0.38097	0.619	0.37995	0.268
4.00	0.35372	0.34475	2.602	0.34115	1.055	0.33949	0.489	0.33890	0.174
5.00	0.31984	0.31323	2.110	0.31061	0.843	0.30937	0.401	0.30895	0.136
6.00	0.29427	0.28913	1.778	0.28715	0.690	0.28617	0.342	0.28586	0.108
7.00	0.27407	0.26991	1.541	0.26836	0.578	0.26757	0.295	0.26729	0.105
8.00	0.25756	0.25410	1.362	0.25287	0.486	0.25220	0.266	0.25202	0.071
9.00	0.24373	0.24080	1.217	0.23981	0.413	0.23928	0.221	0.23914	0.059
10.00	0.23193	0.22940	1.103	0.22859	0.354	0.22815	0.193	0.22802	0.057

Foram obtidos também os resultados para $Ste = 1,0$ e $Ste = 0,1$, utilizando o método da secante para obter as raízes. Os erros percentuais máximos para as raízes foram os mesmos que nos casos anteriores. Os resultados para S^* e θ_0 , com $Ste=1,0$, são apresentados nas tabelas 5.5 e 5.6 respectivamente. Observa-se que os erros, estimados pela variação percentual, em relação ao caso anterior, foram menores que os obtidos para $Ste = 0,5$. Os tempos de computação foram ligeiramente inferiores que os obtidos para $Ste = 0,5$, com o mesmo método. Nas computações para $Ste = 0,1$ ocorreram uma série de problemas. Para $\Delta t^* = 1,0$ e $\Delta t^* = 0,5$ a utilização do método da secante não permitiu a obtenção do primeiro par de raízes. Aparentemente a causa disto foi que a estimativa inicial, fornecida pela solução aproximada de London & Seban, não estava suficientemente próxima das raízes. A utilização de valores mais adequados, obtidos com a utilização do método de diferenças finitas, permitiu que a computação fosse realizada sem problemas, fornecendo os resultados apresentados nas tabelas 5.7 para S^* e 5.8 para θ_0 . A computação para $\Delta t^* = 0,25$ ocorreu sem problemas. Os resultados para $\Delta t^* = 0,125$ e $\Delta t^* = 0,0625$ não puderam ser obtidos pois após a computação de uma série de raízes os resultados passaram a não convergir. A causa desta ocorrência não foi investigada. Os resultados apresentados nas tabelas 5.7 e 5.8, quando comparados com os resultados das tabelas 5.3 e 5.4 para $Ste = 0,5$, indicaram tempos de computação ligeiramente maiores com erros também maiores.

5.2- Método de Diferenças Finitas

Foi desenvolvido um programa de computador, utilizando um método de diferenças finitas explícito, para resolver o problema dado pelas equações de 5.1 a 5.5. Desta forma, poderemos verificar a adequação dos resultados obtidos anteriormente e efetuar comparações entre os tempos computacionais.

O método de diferenças finitas, utilizado, levou em conta uma malha com espaçamento Δx^* uniforme como mostra a figura 5.1.

TABELA 5.5

METODO DA FUNCAO DE GREEN
(METODO DA SECANTE PARA RESOLUCAO SIST. NAO LINEARES)

POSICOES ADIMENSIONAIS DA FONTE DE SOLIDIFICACAO
STE=1.0

CASO 1: DT= 1.0000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.07 S
CASO 2: DT= 0.5000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.22 S
CASO 3: DT= 0.2500 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.73 S
CASO 4: DT= 0.1250 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 2.96 S
CASO 5: DT= 0.0625 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 10.16 S

TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2(%)	CASO 3	(2-3)/3(%)	CASO 4	(3-4)/4(%)	CASO 5	(4-5)/5(%)
1.00	0.5330	0.5907	-9.692	0.6229	-5.250	0.6337	-2.474	0.6450	-1.069
2.00	0.9620	1.0256	-6.220	1.0569	-2.943	1.0705	-1.270	1.0761	-0.520
3.00	1.3215	1.3922	-4.392	1.4095	-1.937	1.4213	-0.830	1.4262	-0.344
4.00	1.6342	1.6904	-3.375	1.7147	-1.417	1.7253	-0.614	1.7296	-0.249
5.00	1.9137	1.9500	-2.550	1.9378	-1.097	1.9475	-0.436	2.0015	-0.200
6.00	2.1637	2.2175	-2.261	2.2374	-0.889	2.2453	-1.395	2.2498	-1.156
7.00	2.4045	2.4504	-1.873	2.4035	-0.737	2.4770	-0.339	2.4800	-0.121
8.00	2.6249	2.6683	-1.626	2.6051	-0.626	2.6931	-0.297	2.6957	-0.096
9.00	2.8325	2.8730	-1.437	2.8894	-0.540	2.8970	-0.262	2.8993	-0.079
10.00	3.0294	3.0638	-1.264	3.0334	-0.473	3.0903	-0.230	3.0927	-0.071

TABELA 5.6

METODO DA FUNCAO DE GREEN
(METODO DA SECANTE PARA RESOLUCAO SIST. NAO LINEARES)

TEMPERATURAS ADIMENSIONAIS EM X=0
STE=1.0

CASO 1: DT= 1.0000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.07 S
 CASO 2: DT= 0.5000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.22 S
 CASO 3: DT= 0.2500 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.78 S
 CASO 4: DT= 0.1250 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 2.96 S
 CASO 5: DT= 0.0625 TEMPO DE PROCESSAMENTO=10.16 S

TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2(%)	CASO 3	(2-3)/3(%)	CASO 4	(3-4)/4(%)	CASO 5	(4-5)/5(%)
1.00	0.69017	0.65447	3.927	0.64133	2.049	0.63556	0.908	0.63327	0.362
2.00	0.54228	0.52468	3.354	0.51720	1.446	0.51416	0.591	0.51292	0.242
3.00	0.46343	0.45175	2.586	0.44710	1.040	0.44511	0.447	0.44429	0.185
4.00	0.41166	0.40330	2.073	0.40006	0.810	0.39862	0.361	0.39802	0.151
5.00	0.37421	0.36796	1.699	0.36555	0.659	0.36444	0.305	0.36398	0.126
6.00	0.34556	0.34055	1.438	0.33878	0.555	0.33790	0.260	0.33756	0.101
7.00	0.32271	0.31872	1.252	0.31722	0.473	0.31649	0.231	0.31626	0.073
8.00	0.30392	0.30056	1.118	0.29935	0.404	0.29874	0.204	0.29858	0.054
9.00	0.28809	0.28522	1.006	0.28422	0.352	0.28370	0.183	0.28357	0.046
10.00	0.27452	0.27202	0.919	0.27120	0.302	0.27077	0.159	0.27063	0.052

TABELA 5.7

METODO DA FUNCAO DE GREEN (METODO DA SECANTE PARA RESOLUCAO SIST. NAO LINEARES)						
POSICOES ADIMENSIONAIS DA FRENTE DE SOLIDIFICACAO STE=0.1						
	CASO 1: DT= 1.0000	CASO 2	(1-2)/2(%)	CASO 3	(2-3)/3(%)	
	TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.09 S					
	CASO 2: DT= 0.5000					
	TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.27 S					
	CASO 3: DT= 0.2500					
	TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.91 S					
TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2(%)	CASO 3	(2-3)/3(%)	
1.00	1.4679	1.6713	-12.170	1.7886	-6.558	
2.00	2.5101	2.6918	-6.750	2.7870	-3.416	
3.00	3.3212	3.4801	-4.566	3.5615	-2.286	
4.00	4.0022	4.1466	-3.482	4.2217	-1.779	
5.00	4.6016	4.7343	-2.803	4.8056	-1.484	
6.00	5.1438	5.2651	-2.304	5.3320	-1.255	
7.00	5.6416	5.7583	-2.027	5.8173	-1.014	
8.00	6.1043	6.2187	-1.940	6.2706	-0.828	
9.00	6.5383	6.6450	-1.606	6.6974	-0.782	
10.00	6.9453	7.0494	-1.477	7.1026	-0.749	

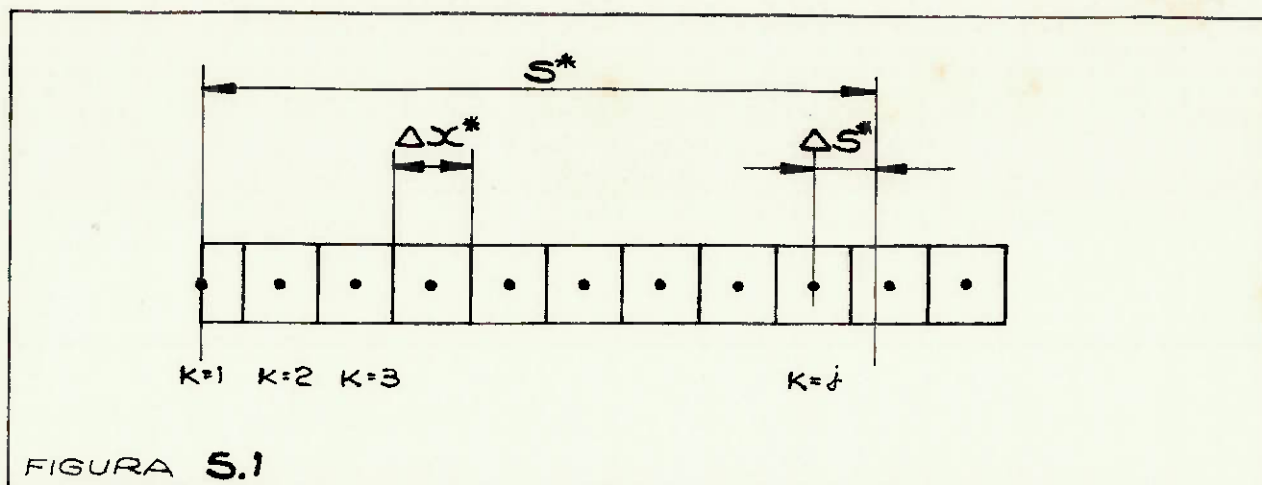
TABELA 5.8

METODO DA FUNCAO DE GREEN
(METODO DA SECANTE PARA RESOLUCAO SIST. NAO LINEARES)

TEMPERATURAS ADIMENSIONAIS EM X=0
STE=0.1

CASO 1: DT= 1.0000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.09 S
CASO 2: DT= 0.5000 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.27 S
CASO 3: DT= 0.2500 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.91 S

TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2(%)	CASO 3	(2-3)/3(%)
1.00	0.52265	0.5319	9.529	0.47593	5.054
2.00	0.40681	0.36125	6.704	0.37045	2.913
3.00	0.33574	0.32054	4.644	0.31457	1.993
4.00	0.29201	0.28233	3.458	0.27850	1.518
5.00	0.26296	0.25590	2.735	0.25300	1.170
6.00	0.24094	0.23503	2.254	0.23323	1.029
7.00	0.22374	0.21953	1.918	0.21783	0.780
8.00	0.20981	0.20030	1.672	0.20491	0.701
9.00	0.19802	0.19514	1.703	0.19416	0.505
10.00	0.18849	0.18503	1.541	0.18470	0.504



O cálculo das temperaturas para os nós $k=1, k=2, \dots, k=j-1$ não apresenta nenhuma diferença em relação aos métodos convencionais [52]. Foram utilizadas as seguintes equações para estes nós:

$$\theta_1^{t+\Delta t} = 2Fo \theta_2^t + (1 - 2Fo - 2BiFo) \theta_1^t \quad (5.6)$$

$$\theta_k^{t+\Delta t} = Fo(\theta_{k+1}^t + \theta_{k-1}^t) + (1 - 2Fo) \theta_k^t \quad (5.7)$$

para $k=2, 3, \dots, j-1$

onde: $Fo = \frac{\Delta t^*}{(\Delta x^*)^2}$ - número de Fourier.

$Bi = \Delta x^*$ - número de Biot.

θ_j^t - Temperatura adimensional do nó j no instante t .

Para calcularmos a temperatura em $k=j$ e a nova posição da frente de solidificação em relação ao nó $k=j$ foram utilizadas as equações apresentadas por Crank [55]:

$$\theta_j^{t+\Delta t} = \left(\frac{\theta_{j-1}}{\Delta x^*} + \frac{\theta_f}{\Delta S^*} \right) \frac{2 \Delta t^*}{(\Delta x^* + \Delta S^*)} + \left(1 - \frac{2 \Delta t^*}{\Delta x^* \Delta S^*} \right) \theta_j^t \quad (5.8)$$

$$\Delta S^{*t+\Delta t} = \Delta S^{*t} + \frac{(\theta_f - \theta_j) \Delta t^*}{Ste \Delta S^{*t}} \quad (5.9)$$

onde: $\theta_f = 1$

ΔS^* - Distância da frente de solidificação ao nó j .

Após o cálculo de $\Delta S^* t + \Delta t$ iremos verificar se $\Delta S^* > \frac{3\Delta x^*}{2}$. Caso isto ocorra, o nó $j+1$ poderá ser introduzido na malha, passando a ser o mais próximo a frente de solidificação, ao invés do nó j . Iremos então subtrair Δx^* de ΔS^* e inicializar a temperatura do nó $j+1$ interpolando linearmente, com base nas temperaturas do nó j e da frente de solidificação. Desta forma poderemos prosseguir os cálculos utilizando as equações 5.8 e 5.9 para o nó $j+1$ ao invés do nó j . Devido a este procedimento teremos sempre $\frac{\Delta x^*}{2} < \Delta S^* < \frac{3\Delta x^*}{2}$.

O incremento de tempo Δt^* deverá ser escolhido de forma a atender as condições de estabilidade. Para o nó $k=1$ esta será dada pela equação 5.10, para os nós de $k=2$ até $k=j-1$ esta será dada pela equação 5.11 e para o nó $k=j$ a condição de estabilidade é dada pela equação 5.12.

$$\Delta t^* < \frac{1}{2} \frac{\Delta x^{*2}}{1 + \Delta x^*} \quad (5.10)$$

$$\Delta t^* < \frac{1}{2} \Delta x^{*2} \quad (5.11)$$

$$\Delta t^* < \frac{1}{2} \Delta x^* \cdot \Delta S^* \quad (5.12)$$

Pode-se verificar que a condição, equação 5.10, é sempre mais crítica que a condição 5.11. A condição, dada pela equação 5.12, é mais crítica quando $\Delta S^* = \Delta x^*/2$. O incremento Δt^* será tomado como sendo o mais crítico entre os obtidos nas equações 5.10 e 5.12 (com $\Delta S^* = \Delta x^*/2$), com um fator de segurança igual a 0,75.

Para que não fosse necessário estabelecer equações especiais para o nó $k=1$, nos instantes iniciais da solidificação, utilizamos a solução aproximada de London & Seban [25] para calcular o instante de tempo em que a posição da frente de solidificação se encontra entre os nós $k=2$ e $k=3$. Esta solução foi utilizada também para obtermos a temperatura em $k=1$ neste instante de tempo.

A temperatura em $k=2$ foi obtida por interpolação linear. Os cálculos a partir deste instante de tempo prosseguiram normalmente, utilizando as equações 5.6, 5.7, 5.8 e 5.9.

O programa de computador, em linguagem FORTRAN, implementando o algoritmo acima descrito, está apresentado no apêndice 5.

Os resultados para $Ste = 1,0$, $Ste = 0,5$ e $Ste = 0,1$ estão apresentados nas tabelas de 5.9 a 5.14. Do mesmo modo que foi feito anteriormente para o método das funções de Green, para cada situação foram analisados vários casos. Caso 1: $\Delta x^* = 0,24$, Caso 2: $\Delta x^* = 0,12$, Caso 3: $\Delta x^* = 0,06$, Caso 4: $\Delta x^* = 0,03$ e Caso 5: $\Delta x^* = 0,015$. Cada caso corresponde a um intervalo Δx^* igual a metade do caso anterior. A variação percentual em relação ao caso anterior também é apresentada nestas tabelas. Podemos observar que a tendência destas diferenças percentuais caírem pela metade, a cada novo processamento, é mais consistente nestes resultados que nos obtidos com o método da função de Green. Os tempos de computação apresentaram a tendência de aumentar a medida que o número de Stefan diminui. Os erros, estimados a partir da variação percentual em relação ao caso anterior, apresentaram a tendência de aumentar a medida que o número de Stefan diminui.

TABELA 5.9

METODO DAS DIFERENCAS FINITAS

POSICOES ADIMENSIONAIS DA FRENTE DE SOLIDIFICACAO

STE=1.0

CASO 1:	DX=0.24	DT=0.0105	TEMPO DE PROCESSAMENTO=	0.03 S
CASO 2:	DX=0.12	DT=0.0027	TEMPO DE PROCESSAMENTO=	0.10 S
CASO 3:	DX=0.06	DT=0.000675	TEMPO DE PROCESSAMENTO=	0.54 S
CASO 4:	DX=0.03	DT=0.00016875	TEMPO DE PROCESSAMENTO=	3.78 S
CASO 5:	DX=0.015	DT=0.0000421875	TEMPO DE PROCESSAMENTO=	28.44 S

TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2 (%)	CASO 3	(2-3)/3 (%)	CASO 4	(3-4)/4 (%)	CASO 5	(4-5)/5 (%)
1.00	0.6915	0.6693	3.240	0.6591	1.523	0.6543	0.734	0.6520	0.353
2.00	1.1292	1.1029	2.385	1.0906	1.128	1.0343	0.535	1.0821	0.250
3.00	1.4321	1.4543	1.912	1.4410	0.923	1.4348	0.432	1.4317	0.217
4.00	1.7301	1.7536	1.677	1.7446	0.802	1.7381	0.374	1.7349	0.184
5.00	2.0513	2.0308	1.592	2.0166	0.704	2.0098	0.338	2.0064	0.169
6.00	2.3167	2.2793	1.355	2.2632	0.645	2.2582	0.310	2.2548	0.151
7.00	2.5420	2.5105	1.255	2.4957	0.593	2.4835	0.289	2.4850	0.141
8.00	2.7585	2.7256	1.170	2.7115	0.557	2.7043	0.266	2.7007	0.133
9.00	2.9524	2.9306	1.085	2.9153	0.525	2.9079	0.254	2.9043	0.124
10.00	3.1560	3.1240	1.024	3.1097	0.492	3.1013	0.239	3.0976	0.119

TABELA 5.10

METODO DAS DIFERENCAS FINITAS

TEMPERATURAS ADIMENSIONAIS EM X=0
STE=1.0

CASO 1:	DX=0.24	DT=0.0108	TEMPO DE PROCESSAMENTO=	0.03 S
CASO 2:	DX=0.12	DT=0.0027	TEMPO DE PROCESSAMENTO=	0.10 S
CASO 3:	DX=0.06	DT=0.000675	TEMPO DE PROCESSAMENTO=	0.54 S
CASO 4:	DX=0.03	DT=0.00016875	TEMPO DE PROCESSAMENTO=	3.78 S
CASO 5:	DX=0.015	DT=0.0000421875	TEMPO DE PROCESSAMENTO=	29.44 S

TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2 (%)	CASO 3	(2-3)/3 (%)	CASO 4	(3-4)/4 (%)	CASO 5	(4-5)/5 (%)
1.00	0.61813	0.62528	-1.191	0.62893	-0.533	0.63045	-0.241	0.63117	-0.114
2.00	0.50189	0.50739	-1.084	0.50992	-0.496	0.51109	-0.229	0.51164	-0.108
3.00	0.43563	0.43998	-0.989	0.44200	-0.457	0.44295	-0.214	0.44341	-0.104
4.00	0.39089	0.39449	-0.913	0.39618	-0.427	0.39698	-0.202	0.39737	-0.098
5.00	0.35790	0.36100	-0.859	0.36245	-0.400	0.36314	-0.190	0.36347	-0.091
6.00	0.33223	0.33494	-0.809	0.33622	-0.381	0.33683	-0.181	0.33712	-0.086
7.00	0.31149	0.31390	-0.768	0.31504	-0.362	0.31559	-0.174	0.31585	-0.082
8.00	0.29426	0.29644	-0.735	0.29747	-0.340	0.29796	-0.164	0.29820	-0.080
9.00	0.27965	0.28163	-0.713	0.28257	-0.333	0.28302	-0.159	0.28324	-0.078
10.00	0.26704	0.26837	-0.631	0.26973	-0.319	0.27014	-0.152	0.27035	-0.078

TABELA 5.11

METODO DAS DIFERENCAS FINITAS

POSICOES ADIMENSIONAIS DA FRENTE DE SOLIDIFICACAO
STE=0.5

CASO 1: DX=0.240 DT=0.0109 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.03 S
 CASO 2: DX=0.120 DT=0.0027 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.12 S
 CASO 3: DX=0.060 DT=0.000675 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.71 S
 CASO 4: DX=0.030 DT=0.00016875 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 5.11 S
 CASO 5: DX=0.015 DT=0.0000421875 TEMPO DE PROCESSAMENTO=39.01 S

TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2(%)	CASO 3	(2-3)/3(%)	CASO 4	(3-4)/4(%)	CASO 5	(4-5)/5(%)
1.00	1.0650	1.0214	4.269	1.0015	1.987	0.9925	0.907	0.9882	0.435
2.00	1.6573	1.6111	2.868	1.5395	1.359	1.5795	0.633	1.5747	0.305
3.00	2.1286	2.0806	2.307	2.0582	1.083	2.0477	0.513	2.0427	0.245
4.00	2.5336	2.4837	2.009	2.4608	0.931	2.4500	0.441	2.4448	0.213
5.00	2.8921	2.8427	1.738	2.8195	0.923	2.8036	0.398	2.8032	0.193
6.00	3.2202	3.1699	1.587	3.1464	0.747	3.1352	0.357	3.1298	0.173
7.00	3.5227	3.4722	1.454	3.4487	0.681	3.4374	0.329	3.4319	0.160
8.00	3.8054	3.7550	1.342	3.7312	0.638	3.7198	0.306	3.7142	0.151
9.00	4.0718	4.0215	1.251	3.9975	0.600	3.9860	0.289	3.9804	0.141
10.00	4.3246	4.2741	1.182	4.2500	0.567	4.2385	0.271	4.2328	0.135

TABELA 5.12

METODO DAS DIFERENCAS FINITAS

TEMPERATURAS ADIMENSIONAIS EM X=0
STE=0.5

CASO 1: DX=0.240 DT=0.0108 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.03 S
 CASO 2: DX=0.120 DT=0.0027 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.12 S
 CASO 3: DX=0.060 DT=0.000675 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.71 S
 CASO 4: DX=0.030 DT=0.00016875 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 5.11 S
 CASO 5: DX=0.015 DT=0.0000421875 TEMPO DE PROCESSAMENTO=39.01 S

TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2(%)	CASO 3	(2-3)/3(%)	CASO 4	(3-4)/4(%)	CASO 5	(4-5)/5(%)
1.00	0.53727	0.54622	-1.639	0.55021	-0.725	0.55202	-0.328	0.55286	-0.152
2.00	0.43008	0.43609	-1.378	0.43881	-0.620	0.44006	-0.284	0.44066	-0.136
3.00	0.37089	0.37545	-1.215	0.37753	-0.551	0.37849	-0.254	0.37895	-0.121
4.00	0.33152	0.33521	-1.101	0.33690	-0.502	0.33769	-0.234	0.33807	-0.112
5.00	0.30278	0.30588	-1.013	0.30731	-0.465	0.30797	-0.214	0.30829	-0.104
6.00	0.28055	0.28323	-0.946	0.28446	-0.432	0.28504	-0.203	0.28532	-0.098
7.00	0.26268	0.26503	-0.887	0.26612	-0.410	0.26663	-0.191	0.26683	-0.094
8.00	0.24788	0.24998	-0.840	0.25096	-0.391	0.25142	-0.183	0.25164	-0.087
9.00	0.23537	0.23726	-0.797	0.23814	-0.370	0.23856	-0.176	0.23876	-0.084
10.00	0.22460	0.22622	-0.760	0.22713	-0.357	0.22751	-0.167	0.22770	-0.083

TABELA 5.13

METODO DAS DIFERENCAS FINITAS

POSICOES ADIMENSIONAIS DA FRENTE DE SOLIDIFICACAO
STE=0.1

CASO 1: DX=0.240 DT=0.0108 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.04 S
 CASO 2: DX=0.120 DT=0.0027 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.17 S
 CASO 3: DX=0.060 DT=0.000675 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 1.14 S
 CASO 4: DX=0.030 DT=0.00016875 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 8.56 S
 CASO 5: DX=0.015 DT=0.0000421375 TEMPO DE PROCESSAMENTO=63.03 S

TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2(%)	CASO 3	(2-3)/3(%)	CASO 4	(3-4)/4(%)	CASO 5	(4-5)/5(%)
1.00	2.0976	1.9880	5.513	1.9426	2.337	1.9230	1.019	1.9140	0.470
2.00	3.0586	2.9556	3.435	2.9117	1.503	2.8920	0.681	2.8829	0.316
3.00	3.8133	3.7139	2.676	3.6710	1.169	3.6515	0.534	3.6422	0.255
4.00	4.4591	4.3607	2.257	4.3180	0.989	4.2986	0.451	4.2893	0.217
5.00	5.0297	4.9341	1.938	4.8920	0.861	4.8725	0.400	4.8633	0.189
6.00	5.5493	5.4553	1.723	5.4132	0.778	5.3938	0.360	5.3845	0.173
7.00	6.0291	5.9361	1.567	5.8942	0.711	5.8748	0.330	5.8655	0.159
8.00	6.4768	6.3845	1.445	6.3431	0.653	6.3238	0.305	6.3144	0.149
9.00	6.8988	6.8069	1.350	6.7656	0.610	6.7463	0.286	6.7370	0.138
10.00	7.2987	7.2070	1.272	7.1659	0.574	7.1466	0.270	7.1373	0.130

TABELA 5.14

METODO DAS DIFERENCAS FINITAS

TEMPERATURAS ADIMENSIONAIS EM X=0
STE=0.1

CASO 1: DX=0.240 DT=0.0108 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.04 S
 CASO 2: DX=0.120 DT=0.0027 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 0.17 S
 CASO 3: DX=0.060 DT=0.000675 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 1.14 S
 CASO 4: DX=0.030 DT=0.00016975 TEMPO DE PROCESSAMENTO= 8.56 S
 CASO 5: DX=0.015 DT=0.0000421975 TEMPO DE PROCESSAMENTO=63.03 S

TEMPO	CASO 1	CASO 2	(1-2)/2 (%)	CASO 3	(2-3)/3 (%)	CASO 4	(3-4)/4 (%)	CASO 5	(4-5)/5 (%)
1.00	0.44416	0.45356	-2.072	0.45726	-0.909	0.45880	-0.336	0.45948	-0.148
2.00	0.35301	0.35844	-1.515	0.36062	-0.605	0.36155	-0.257	0.36197	-0.116
3.00	0.30330	0.30711	-1.241	0.30966	-0.502	0.31933	-0.217	0.30964	-0.100
4.00	0.27047	0.27339	-1.068	0.27460	-0.441	0.27513	-0.193	0.27537	-0.087
5.00	0.24661	0.24897	-0.948	0.24996	-0.396	0.25039	-0.172	0.25059	-0.080
6.00	0.22821	0.23020	-0.864	0.23103	-0.359	0.23140	-0.160	0.23157	-0.073
7.00	0.21345	0.21516	-0.795	0.21588	-0.334	0.21620	-0.148	0.21635	-0.069
8.00	0.20126	0.20276	-0.740	0.20339	-0.310	0.20367	-0.137	0.20381	-0.069
9.00	0.19097	0.19230	-0.692	0.19286	-0.290	0.19312	-0.135	0.19324	-0.062
10.00	0.18212	0.18332	-0.655	0.18383	-0.277	0.18406	-0.125	0.18417	-0.060

5.3 - Comparações entre os Resultados obtidos com os dois Métodos

Pode-se verificar, mediante comparação das tabelas de 5.3 a 5.8 para o método das funções de Green e de 5.9 a 5.14 para o método das diferenças finitas, que houve boa concordância entre os resultados obtidos com os dois métodos. As diferenças que ocorreram são compatíveis com os erros estimados pela variação em relação aos casos anteriores.

Os tempos de computação em função dos erros estimados estão plotados na figura 5.2 para $Ste = 0,5$ e na figura 5.3 para $Ste = 1,0$. Nestas figuras temos 2 curvas para o método das funções de Green, correspondendo aos erros para S^* e θ_0 , e 2 curvas para o método de diferenças finitas. Estas curvas foram obtidas mediante regressão linear logarítmica dos dados, resultando desta forma no ajuste de uma curva do tipo $y = ax^b$. Nos dois gráficos observa-se o mesmo comportamento. O método das diferenças finitas apresenta melhor performance nas faixas de erro maior. A medida que os erros admissíveis diminuem o quadro se modifica, passando o método das funções de Green a ter melhor performance. Os pontos de igual performance são os pontos onde se cruzam as curvas para S^* e θ_0 . Para $Ste = 0,5$ estes corresponderam a um erro de 0,53% e tempo de computação de 0,95s nas curvas para S^* e erro de 0,5% com um tempo de computação igual a 1,2s nas curvas para θ_0 . Para $Ste = 1,0$ os pontos de igual performance corresponderam a um erro de 0,37% e tempo computacional de 1,2s nas curvas para S^* e um erro de 0,23%, com tempo computacional de 1,4s nas curvas para θ_0 .

Segundo Rice [53] a performance relativa de dois programas de computador pode mudar muito quando é utilizado outro ambiente computacional. Os dois programas comparados utilizam recursos de computação de natureza diferente. O programa baseado no método das funções de Green utiliza muito as funções e^x , $\text{erf}(x)$ etc. O programa com base no método das diferenças finitas utiliza muito a chamada de dados da memória e operações simples como somas, subtrações e multiplicações. Esperamos portanto uma razoável mudança na performance relativa entre os dois programas quando da utilização de outro ambiente computacional.

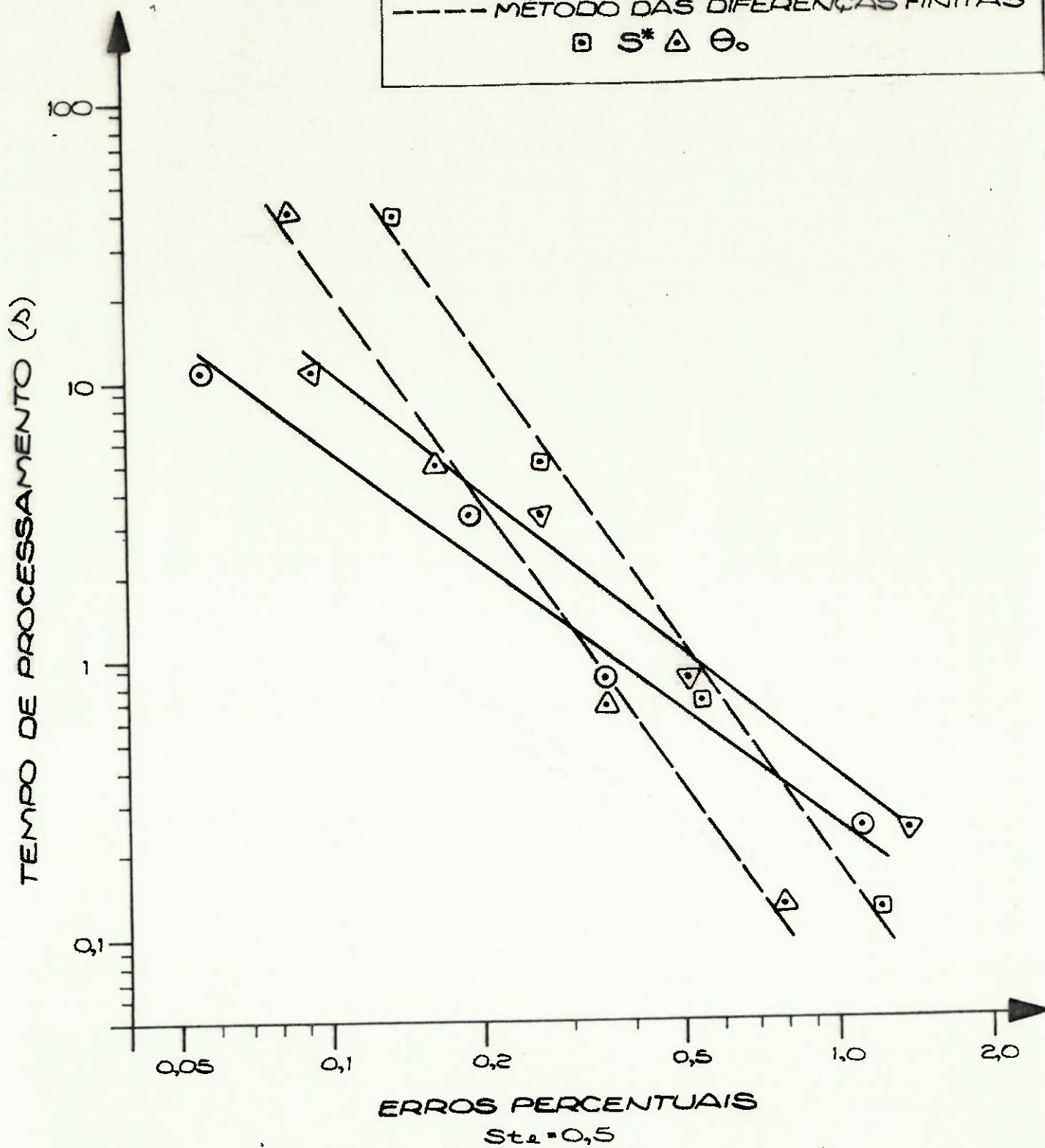
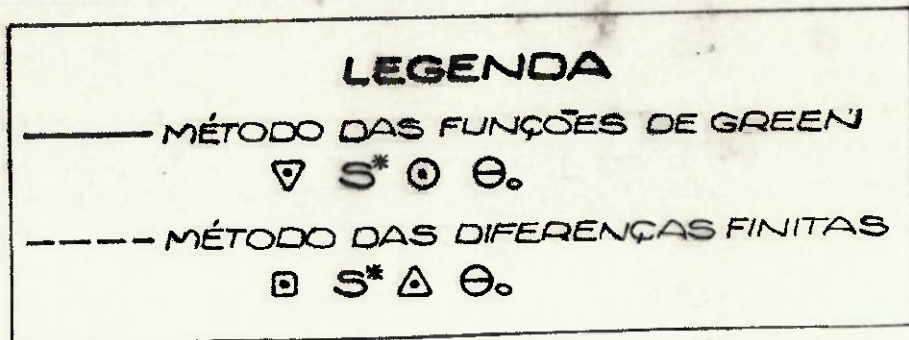


FIGURA 5.2

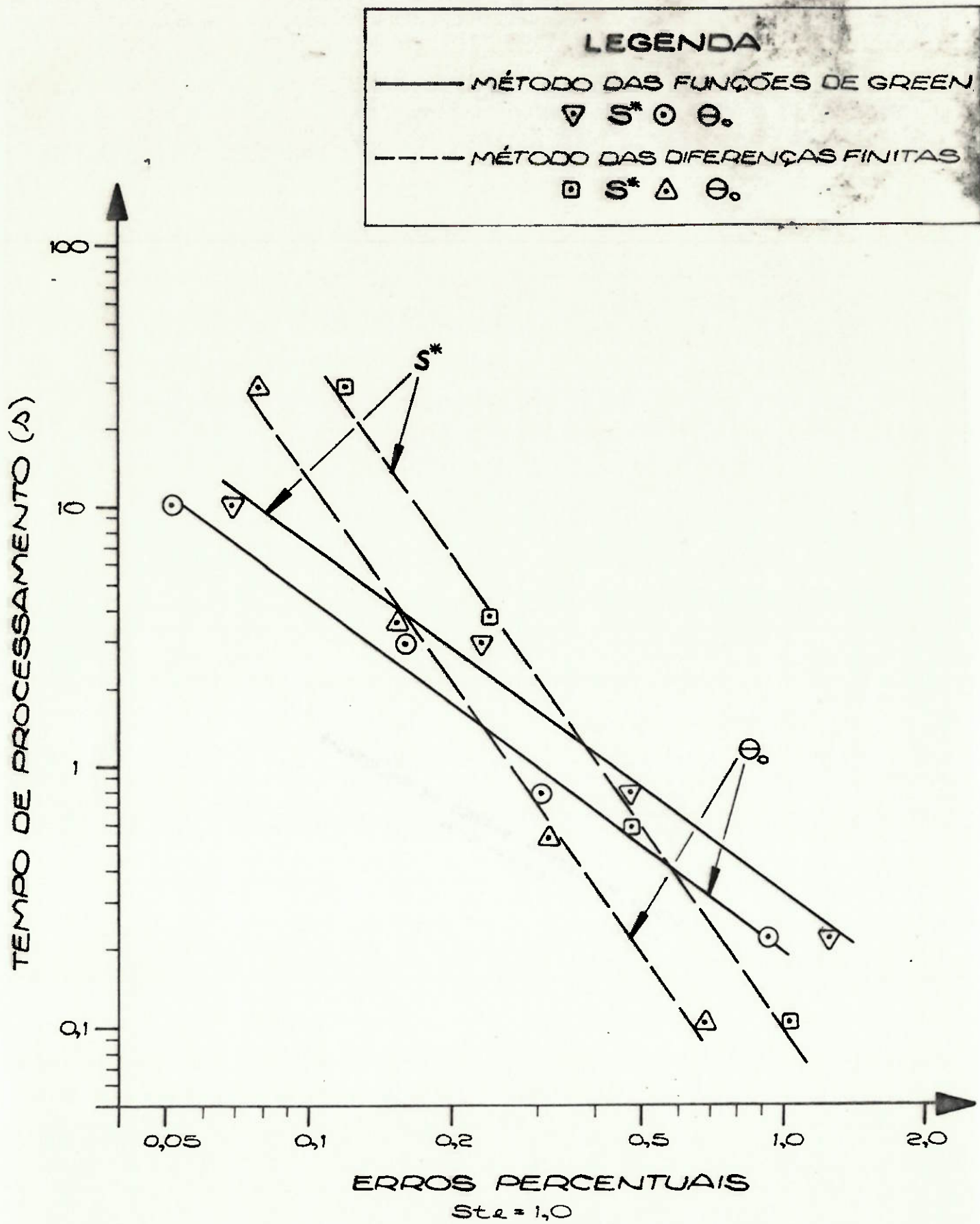


FIGURA 5.3

6 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS

Apresentamos a formulação geral para problemas de condução de calor com mudança de fase sólido-líquido, envolvendo substâncias puras, e particularizamos a formulação para um problema uni-dimensional. O método das funções de Green ou método das fontes móveis de calor foi apresentado e aplicado na resolução do problema proposto.

Foram desenvolvidos programas de computador implementando o método das funções de Green e o método das diferenças finitais para resolução de uma particularização do problema. Os resultados quando da utilização dos dois métodos foram compatíveis entre si, nos casos considerados, fornecendo uma indicação de que os dois métodos estão fornecendo resultados corretos.

As comparações entre os tempos de processamento para os casos analisados indicaram que na faixa de erros de 0,2% a 0,5% a performance dos dois programas é semelhante. Para faixas de êrros maiores o método das diferenças finitas mostrou melhor performance que o método das funções de Green, enquanto que para faixas de erros menores ocorreu o inverso.

Na faixa de erros de 1%, que é bastante razoável na resolução de problemas de engenharia, o método das diferenças finitais apresentou melhor performance. O método da função de Green envolve maiores dificuldades na sua implementação em programas de computador e para justificar sua utilização acreditamos que sua performance deveria ser muito melhor do que a verificada.

Uma série de outras investigações poderiam ter sido feitas para avaliar a utilidade do método das funções de Green em problemas com mudança de fase sólido-líquido poderíamos citar:

- 1) Investigar a causa da não-convergência, durante a obtenção das raízes, que ocorreu em alguns casos em que $St_e = 0,1$.

- 2) Investigar a performance dos programas desenvolvidos em outras faixas de t^* e St_e .
- 3) Utilizar rotinas para resolução de sistemas não-lineares desenvolvidas por outros autores, por exemplo os algoritmos 314, 315, 316, 378 e 554 da ACM (Association for Computing Machinery) e os programas ZSCNT e ZSPOW da Biblioteca IMSL (International Mathematical & Statistical Libraries).
- 4) Investigar a possibilidade de efetuar as integrais no método das funções de Green utilizando método de Gauss ou outro método de integração numérica.
- 5) Elaborar um programa de computador implementando o método descrito no item 4.3 para resolver um problema em que a temperatura inicial da fase líquida é maior que a temperatura de fusão T_f e um programa para resolver o mesmo problema utilizando o método das diferenças finitas.
- 6) Comparar a performance dos dois métodos quando o coeficiente de transmissão de calor h é variável.
- 7) Verificar a performance dos dois programas em outro ambiente computacional.
- 8) Utilizar diretamente a função de Green para problemas com coeficiente de transmissão de calor h constante, para obter um método que envolve somente a posição da frente de solidificação como incógnita.
- 9) Desenvolver uma teoria para os erros quando da utilização do método descrito no item 4.3.
- 10) Aplicar o método das funções de Green para resolução de problemas envolvendo a solidificação de ligas metálicas, utilizando várias fontes de calor para modelar o comportamento das ligas entre as temperaturas de início e fim da solidificação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] - LUIKOV, A.V. Analytical Heat Difusion Theory. New York, Academic Press, 1968, Cap.11, p. 443-459.
- [2] - MUEHLBAUER, J.C. & SUNDERLAND, J.E. Heat Conduction with Freezing or Melting. Applied Mechanics Review, 18(12): 951-958, dez. 1965.
- [3] - ÖZIŞIK, N.M. Heat Conduction. New York, John Wiley and Sons, 1980. Cap.11, p.397-438.
- [4] - RUBINSTEIN, L.I. The Stefan Problem. Providence, American Mathematical Society, 1971.
- [5] - OCKENDON, J.R. & HODGKINS, W.R. (Eds.). Moving Boundary Problems in Heat Flow and Difusion. Oxford, Clarendon Press, 1974.
- [6] - WILSON, D.G.; SOLOMON, A.D. & BOGS, P.T. (Eds.). Moving Boundary Problems. New York, Academic Press, 1978.
- [7] - LIGHTFOOT, M.N. The Solidification of Steel. Proc. London Math. Soc., 31: 97-116. 1929.
- [8] - MILES, J.W. A Note on Rieman's Method Applied to the Difusion Equation. Quart. Appl. Math., 8(1): 95-101, Jan. 1950.
- [9] - RATHJEN, K.A. & JIJI, L.M. Heat Conduction with Melting or Freezing in a Corner. J. of Heat Transfer, 93C(1):101-109, Fev. 1971,

- [10] - CHUANG, Y.K. & SZEKELY, J. On the Use of Green's Functions for Solving Melting or Solidification Problems. Int. J. Heat Mass Transfer, 14: 1285-1294, 1971.
- [11] - CHUANG, Y.K. & SZEKELY, J. The Use of Green's Function for Solving Melting or Solidification Problems in the Cylindrical Coordinate System. Int. J. Heat Mass Transfer, 15: 1171-1174, 1972.
- [12] - CHUANG, Y.K. & EHRICH, O. On the Integral Technique for Spherical Growth Problems. Int. J. Heat Mass Transfer, 17: 945-953, 1974.
- [13] - BUDHIA, H. & KREITH, F. Heat Transfer with Melting on a Wedge. Int. J. Heat Mass Transfer, 16: 195-211, 1973.
- [14] - ÖZİŞİK, M.N. A Note on the General Formulation of Phase Change Problems as a Heat Conduction Problem with Moving Source. J. Heat Transfer, 100: 370-371, 1978.
- [15] - KARTASHOV, E.M. A Green's Function Method in the Solution of Boundary-Value Problems for a Generalized Type of Heat-Conduction Equation.
- [16] - BANERJEE, P.K. & SHAW, R.P. Boundary Element Formulation for Melting and Solidification Problems. in: _____ (Eds.) Developments in Boundary Element Methods, London, Applied Science Publishers, 1982, Vol.2, p.1-18.
- [17] - LANDAU, H.G. Heat Conduction in a Melting Solid. Quart. Appl. Math., 8(1): 81-94, 1950
- [18] - LAZARIDIS, A. A Numerical Solution of the Multidimensional Solidification (or Melting) Problem. Int. J. Heat Mass Transfer, 13: 1459-1477, 1970.

- [19] - KROEGER, P.G. & OSTRACH, S. The Solution of a Two-Dimensional Freezing Problem Including Convection Effects in the Liquid Region. Int. J. Heat Mass Transfer, 17: 1191-1207, 1974.
- [20] - SHAMSUNDAR, N. & SPARROW, E.M. Analysis of Multidimensional Conduction Phase Change Via the Enthalpy Model. J. Heat Transfer, 97: 333-340, 1975.
- [21] - SPARROW, E.M. et alii. Convective Instability in a Melt Heated from Below. J. Heat Transfer, 98: 88-94, 1976.
- [22] - CROWLEY, A.B. Numerical Solution of Stefan Problems. Int. J. Heat Mass Transfer, 21: 215-218, 1978.
- [23] - CRANK, J. & CROWLEY, A.B. Isotherm Migration Along Orthogonal Flow Lines in Two Dimensions. Int. J. Heat Transfer, 21: 393-398, 1978.
- [24] - GUPTA, R.S. & KUMAR, A. Treatment of Multi-Dimensional Moving Boundary Problems by Coordinate Transformation. Int. J. Heat Mass Transfer, 28: 1355-1366, 1985.
- [25] - LONDON, A.L. & SEBAN, R.A. Rate of Ice Formation, Trans. of ASME, 65: 771-778, Oct., 1943.
- [26] - GOODMAN, T.R. The Heat Balance Integral and its Application to Problems Involving a Change of Phase. Trans. of ASME, 80: 335-342, Feb. 1958.
- [27] - MUEHLBAUER, J.C. et alii. Transient Heat Transfer Analysis of Alloy Solidification. J. Heat Transfer, 95
- [28] - GARCIA, A. & PRATES, M. Mathematical Model for Unidirectional Solidification of Metals: I. Cooled Molds. Metallurgical Transactions, 9B: 449-457, Set. 1978.

- [29] - GARCIA,A. et alii . Mathematical Model for Unidirectional Solidification of Metals. II Massive Molds. Metallurgical Transactions, 10B: 85-91, Mar. 1979.
- [30] - CLYNE,T.W. & GARCIA,A. Assesment of a New Model for Heat Flow During Unidirectional Solidification of Metals, Int. J. Heat Mass Transfer, 23: 773-782, 1980.
- [31] - EL-GENK,M.S. & CRONEMBERG,A.W. Solidification in a Semi-Infinite Region with Boundary Conditions of the Second Kind ; An Exact Solution. Letters in Heat and Mass Transfer, 6: 321-327, 1979.
- [32] - CHO,S.H. & SUNDERLAND,J.E. Aproximate Temperature Distribution for Phase Change of a Semi-Infinite Body. Journal of Heat Transfer, 103: 401-403, 1981.
- [33] - SHAMSUNDAR,N. Approximate Calculation of Multidimensional Solidification by Using Conduction Shape Factors. J.Heat Transfer, 104: 8-12, Fev. 1982.
- [34] - LUNARDINI,V.J. Freezing and Thawing: Heat Balance Approximations. J.Energy Resources Technology, 105: 30-37, Mar. 1983.
- [35] - BARRY,G.W. & GOODLING,J.S. A Stefan Problem with Contact Resistance. J.Heat Transfer, 109: 820-825, Nov. 1987
- [36] - EVANS,G. et alii. Stefan Like Problems. Quart. Appl. Math. 8: 312-319, 1950.
- [37] - WESTPHAL,K.O. Series Solution of Freezing Problem with the Fixed Surface Radiating into a Medium or Arbitrary Varying Temperature. Int.J.Heat Mass Transfer, 10: 195-205, 1967.

- [38] - CHO, S.H. & SUNDERLAND, J.E. Heat-Conduction Problems with Melting or Freezing, J.Heat Transfer, 91: 421-426, Ago. 1969.
- [39] - PEDROSO, R.I. & DOMOTO, G.A. Exact Solution by Perturbation Method for Planar Solidification of a Saturated Liquid with Convection at the Wall. Int.J.heat Mass Transfer, 16: 1816-1819, 1973.
- [40] - PEDROSO, R.I. & DOMOTO, G.A. Technical Note on Planar Solidification with Fixed Wall Temperature and Variable Thermal Properties. J.Heat Transfer, 95: 553-555, 1973.
- [41] - TAO, L.N. The Stefan Problem with Arbitrary Initial and Boundary Conditions. Quart. Appl. Math., 36: 223-233, 1978.
- [42] - TAO, L.N. On Free Boundary Problems with Arbitrary Initial and Flux Conditions. J.Appl. Math. Physics (ZAMP), 30: 416-426, 1979.
- [43] - TAO, L.N. Free Boundary Problems with Radiation Boundary Conditions. Quart. Appl. Math., 37: 1-10, 1979.
- [44] - BECKETT, P.M. & HODSON, N.J. The Effect of Shrinkage on the Rate of Solidification of a Cylindrical Ingot. Int. J. Heat Mass Transfer, 23: 433-436, 1980.
- [45] - LOZANO, C.J. & REEMSTEIN, R. On a Stefan Problem with an Emerging Free Boundary. Numerical Heat Transfer, 4: 239-243, 1981.
- [46] - GUPTA, S.C. Two-Dimensional Heat Conduction with Phase Change in a Semi-Infinite Mould. Int. J. Engng. Sci., 19: 137-146, 1981.
- [47] - BLACKWELL, J.H. & OCKENDON, J.R. Exact Solution of a Stefan Problem Relevant to Continuous Casting. Int. J. Heat Mass Transfer, 25: 1059-1060, 1982

- [48] - HONG,C.P. et alii. Numerical Models for Casting Solidification: Part I. The Coupling of the Boundary Element Method and Finite Diference Methods for Solidification Problems. Metallurgical Transactions, 15B: 91-99,1984
- [49] - HONG,C.P. et alii. Numerical Models for Casting Solidification: Part II. Application of the Boundary Element Method to Solidification Problems. Metallurgical Transactions, 15B: 101-107, 1984.
- [50] - ARPACI,V.S. Conduction Heat Transfer. Addison-Wesley Publishing Co. Reading Mass., 1966.
- [51] - HILDEBRAND,F.B. Advanced Calculus for Applications. Englewood Cliffs, N.J., Prentice-Hall Inc., 1976.
- [52] - GREENBERG,M.D. Application of Green's Function in Science and Engineering. Englewood Cliffs N.J., Prentice-hall Inc., 1971.
- [53] - RICE,J.R. Numerical Methods, Software and Analysis. Singapore, McGraw-Hill Book Co., 1983.
- [54] - HOLMAN,J.P. Transferência de Calor. São Paulo, McGraw-Hill do Brasil, 1983.
- [55] - CRANK,J. How to Deal with Moving Boundaries in Thermal Problems. In: Lewis,R.W.; Morgan,K. & Zienkiewicz,O.C. (Eds.) Numerical Methods in Heat Transfer. John Wiley & Sons Ltd., 1981.

A.1 - FÓRMULAS PARA O CÁLCULO NUMÉRICO DAS INTEGRAIS INDICADAS NO CAPÍTULO 4

A.1.1- Fórmulas para o Cálculo de I1.

A integral I1 pode ser sub-dividida em n integrais cada uma para um trecho (t_{k-1} - t_k). Em cada um destes trechos o comportamento da função $w(t)$ é dado pela equação 4.18 do capítulo 4.

$$I1(x, t) = \sum_{k=1}^n I1_k(x, t) \quad (A1.1)$$

$$\text{onde } I1_k(x, t) = \int_{t_{k-1}}^{t_k} \frac{(A_k + B_k - T_i)x}{2\sqrt{\alpha\pi} [t-\tau]^{3/2}} e^{-x^2 / 4\alpha(t-\tau)} d\tau \quad (A1.2)$$

Por sua vez estas integrais podem ser calculadas pela fórmula de integração equação A1.3, cuja validade pode ser verificada por derivação.

$$\int \frac{(A\tau + B)}{(t-\tau)^{3/2}} e^{-c^2/(t-\tau)} d\tau =$$

$$= (At+B+2Ac^2) \frac{\sqrt{\pi}}{c} \operatorname{erf}\left(\frac{c}{\sqrt{t-\tau}}\right) + 2A e^{-c^2/(t-\tau)} \sqrt{t-\tau} \quad (A1.3)$$

Assim obtemos:

$$I1_k(x, t) = F1_k(x, t) \left[F2(x, t-t_k) - F2(x, t-t_{k-1}) \right] +$$

$$+ F3_k(x, t-t_k) - F3_k(x, t-t_{k-1}) \quad (A1.4)$$

onde por conveniência definimos:

$$F1_k(x, t) = \left[A_k(t-t_{k-1} + x^2/2\alpha) + W_{k-1} - T_i \right] \quad (A1.5)$$

$$F2(x, t) = \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha t}}\right) \quad (A1.6)$$

$$F3_k(x, t) = \frac{A_k x}{\sqrt{\alpha \pi}} \sqrt{t} e^{-\frac{x^2}{4\alpha t}} \quad (A1.7)$$

No caso específico em que $k=n$ devemos calcular o limite para $t_k \rightarrow t^-$ na equação 4 desta forma obteremos:

$$I1_n(x, t) = F1_n(x, t) \left[1 - F2(x, t - t_{n-1}) \right] - F3_n(x, t - t_{n-1}) \quad (A1.8)$$

A1.2 - Fórmulas para o Cálculo de I2

Iremos sub-dividir a integral I2 em n integrais, cada uma em um trecho $[t_{k-1}, t_k]$. Em cada um destes trechos o comportamento da função $S(t)$ é descrito pela equação 4.17 do Capítulo 4.

$$I2(x, t) = \sum_{k=1}^n I2_k(x, t) \quad (A1.9)$$

$$\text{onde } I2_k(x, t) = \int_{t_{k-1}}^{t_k} \frac{a_k}{2\sqrt{\alpha\pi(t-\tau)}} \left[e^{-\frac{[a_k\tau + b_k - x]^2}{4\alpha(t-\tau)}} + e^{-\frac{[a_k + b + x]^2}{4\alpha(t-\tau)}} \right] d\tau \quad (A1.10)$$

Podemos definir

$$I3_k(x, t) = \int_{t_{k-1}}^{t_k} \frac{a_k}{2\sqrt{\alpha\pi(t-\tau)}} e^{-\frac{[a_k\tau + b_k - x]^2}{4\alpha(t-\tau)}} d\tau \quad (A1.11)$$

$$\text{Desta forma: } I2_k(x, t) = I3_k(x, t) - I3_k(-x, t) \quad (A1.12)$$

Utilizando a fórmula de integração A1.13 podemos calcular $I3_k$:

$$\int \frac{2a}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{t-\tau}} e^{-(a\tau+b)^2/(t-\tau)} d\tau = \operatorname{erf}\left(\frac{a\tau+b}{\sqrt{t-\tau}}\right) +$$

$$- \operatorname{erf}\left(\frac{a\tau+b}{\sqrt{t-\tau}} + 2a\sqrt{t-\tau}\right) \quad (\text{A1.13})$$

$$I3_k(x,t) = \frac{1}{2} \left\{ F2(S_k-x, t-t_k) - F2(S_{k-1}-x, t-t_{k-1}) + \right.$$

$$\left. + F4_k(x,t) \left[F5_k(S_{k-1}-x, t-t_{k-1}) - F5_k(S_k-x, t-t_k) \right] \right\} \quad (\text{A1.14})$$

onde $F4_k(x,t) = e^{a_k/\alpha \left[a_k(t-t_{k-1}) + S_{k-1}-x \right]}$ (A1.15)

$$F5_k(x,t) = \operatorname{erf}\left[\frac{x}{2\sqrt{\alpha t}} + \frac{a_k\sqrt{t}}{\sqrt{\alpha}} \right] \quad (\text{A1.16})$$

No caso em que $k=n$ é necessário calcular o limite para $t_k \rightarrow t^-$ na equação A1.14. O limite por sua vez irá depender da posição de x em relação à posição da frente de solidificação no instante t .

Caso: $x \leq S_n$

$$I3_n(x,t) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - F2(S_{n-1}-x, t-t_{n-1}) + \right.$$

$$\left. + F4_n(x,t) \left[F5_n(S_{n-1}-x, t-t_{n-1}) - 1 \right] \right\} \quad (\text{A1.17})$$

Caso: $x \geq S_n$

$$I3_n(x,t) = \frac{1}{2} \left\{ -1 - F2(S_{n-1}-x, t-t_{n-1}) + \right.$$

$$\left. + F4_n(x,t) \left[F5_n(S_{n-1}-x, t-t_{n-1}) + 1 \right] \right\} \quad (\text{A1.18})$$

Pode-se constatar que quando $x=S_n$ as equações A1.17 e A1.18 fornecem o mesmo resultado. Quando formos calcular $I3(-x, t)$ devemos utilizar sempre a equação A1.17, pois devido às características do problema $S(t) > 0$ e $-x < 0$.

Quando efetuamos a soma dos $I3_k$ para calcular $I3$ observamos que uma série de termos irão se cancelar pois:

$$\sum_{k=1}^{n-1} \left\{ F2(S_k - x, t - t_k) - F2(S_{k-1} - x, t - t_{k-1}) \right\} =$$

$$= F2(S_{n-1} - x, t - t_{n-1}) - F2(S_0 - x, t - t_0) \quad (A1.19)$$

Levando em conta a equação A1.19, será conveniente realizarmos o cálculo de $I3$ de outra maneira:

$$I3(x, t) = I4(x, t) + I5(x, t) \quad (A1.20)$$

$$\text{onde: } I4(x, t) = \begin{cases} \frac{1}{2} [1 - F2(S_0 - x, t - t_0)] & \text{caso } x \leq S_n \\ \frac{1}{2} [-1 - F2(S_0 - x, t - t_0)] & \text{caso } x > S_n \end{cases} \quad (A1.21)$$

$$I5(x, t) = \sum_{k=1}^n I5_k(x, t) \quad (A1.23)$$

$$\text{e } I5_k(x, t) = \frac{F4_k(x, t)}{2} [F5_k(S_{k-1} - x, t - t_{k-1}) - F5(S_k - x, t - t_k)] \quad (A1.24)$$

$$\text{com } I5_n(x, t) = \begin{cases} \frac{F4_n(x, t)}{2} [F5_n(S_{n-1} - x, t - t_{n-1}) - 1] & \text{caso } x \leq S_n \\ \frac{F4_n(x, t)}{2} [F5_n(S_{n-1} - x, t - t_{n-1}) + 1] & \text{caso } x > S_n \end{cases} \quad (A1.25)$$

$$\frac{F4_n(x, t)}{2} [F5_n(S_{n-1} - x, t - t_{n-1}) + 1] \text{ caso } x > S_n \quad (A1.26)$$

A1.3 - FÓRMULAS PARA O CÁLCULO DE I6.

Como $I6 = \frac{\partial I1}{\partial x}$, da equação A1.1 obtemos:

$$I6(x,t) = \sum_{k=1}^n \frac{\partial I1_k}{\partial x}(x,t) = \sum_{k=1}^n I6_k(x,t) \quad (A1.27)$$

onde definimos $I6_k = \frac{\partial I1_k}{\partial x}$ (A1.28)

Calculando $\frac{\partial I1_k}{\partial x}$ obtemos:

$$I6_k(x,t) = \frac{A_k x}{\alpha} \left[F2(x,t-t_k) - F2(x,t-t_{k-1}) \right] + F6_k(x,t,t_k) - F6_k(x,t,t_{k-1}) \quad (A1.29)$$

onde definimos:

$$F6_k(x,t,\tau) = \frac{e^{-\frac{x^2}{4\alpha(t-\tau)}}}{\sqrt{\alpha\pi(t-\tau)}} \left[A_k (2t-t_{k-1}-\tau) + W_{k-1} T_i \right] \quad (A1.30)$$

No caso em que $k=n$ obtemos da equação A1.8

$$I6_n(x,t) = \frac{A_n x}{\alpha} \left[1 - F2(x,t-t_{n-1}) \right] - F6_n(x,t-t_{n-1}) \quad (A1.31)$$

A1.4- Fórmulas para o Cálculo de I7.

Para calcular $\frac{\partial I2}{\partial x}$ podemos utilizar as equações A1.9 e A1.12 desta maneira obtemos:

$$I7(x,t) = \frac{\partial}{\partial x} I2(x,t) = \sum_{k=1}^n \frac{\partial I2_k}{\partial x}(x,t) = \sum_{k=1}^n \left[\frac{\partial I3_k}{\partial x}(x,t) + \frac{\partial I3_k}{\partial x}(-x,t) \right] \quad (A1.32)$$

Derivando a equação A1.14 iremos obter:

$$\frac{\partial I3_k}{\partial x}(x,t) = \frac{-a_k}{\alpha} I5_k(x,t) \quad (A1.33)$$

A equação acima poderá também ser utilizada para $k=n$, contanto que $I5_n$ seja calculado pela equação A1.25 quando $x < S_n$ e pela equação A1.26 quando $x > X_n$. Ao calcularmos $\frac{\partial I3_n}{\partial x}(-x,t)$ deveremos utilizar sempre a equação A1.25 para calcular $I5_n(-x,t)$ devido aos mesmos motivos expostos após a apresentação da equação A1.18.

A2 - MÉTODO PARA RESOLUÇÃO DOS SISTEMAS NÃO-LINEARES

A2.1 - Método de Newton-Raphson [51], [53]

Para resolvermos um sistema de duas equações a duas incógnitas, definido de maneira genérica pelas equações A2.1 e A2.2, a utilização do método de Newton depende de conhecermos uma primeira estimativa para as raízes, por exemplo x_0 e y_0 .

$$f(x,y) = 0 \quad (\text{A2.1})$$

$$g(x,y) = 0 \quad (\text{A2.2})$$

Partindo da estimativa inicial desejamos obter Δx e Δy tais que:

$$f(x_0 + \Delta x, y_0 + \Delta y) = 0 \quad (\text{A2.3})$$

$$g(x_0 + \Delta x, y_0 + \Delta y) = 0 \quad (\text{A2.4})$$

Desenvolvendo em séries de Taylor e mantendo somente os termos lineares iremos obter:

$$f(x_0, y_0) + \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) \Delta x + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) \Delta y = 0 \quad (\text{A2.5})$$

$$g(x_0, y_0) + \frac{\partial g}{\partial x}(x_0, y_0) \Delta x + \frac{\partial g}{\partial y}(x_0, y_0) \Delta y = 0 \quad (\text{A2.6})$$

O sistema acima pode ser resolvido para Δx e Δy :

$$\Delta x = - \frac{(f_0 \frac{\partial g_0}{\partial y} - g_0 \frac{\partial f_0}{\partial y})}{\frac{\partial f_0}{\partial x} \frac{\partial g_0}{\partial y} - \frac{\partial g_0}{\partial x} \frac{\partial f_0}{\partial y}} \quad (\text{A2.7})$$

onde $f_0 = f(x_0, y_0)$; $g_0 = g(x_0, y_0)$; $\frac{\partial f_0}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)$; etc:

$$\Delta y = - \frac{\left(\frac{\partial f_0}{\partial x} g_0 - \frac{\partial g_0}{\partial x} f_0 \right)}{\frac{\partial f_0}{\partial x} \frac{\partial g_0}{\partial y} - \frac{\partial g_0}{\partial x} \frac{\partial f_0}{\partial g}} \quad (\text{A2.8})$$

Assim obtemos uma nova aproximação para as raízes:

$$x_1 = x_0 + \Delta x \quad (\text{A2.9})$$

$$y_1 = y_0 + \Delta y \quad (\text{A2.10})$$

Este processo pode ser repetido sucessivas vezes e a cada iteração teremos valores cada vez mais próximos das raízes. O sucesso na utilização deste método irá depender da escolha da estimativa inicial e do comportamento das funções f e g próximo às raízes.

Quando as funções envolvidas são de difícil manipulação podemos calcular as derivadas numericamente:

$$\frac{\partial f_0}{\partial x} \approx \frac{f(x_0 + h, y_0) - f(x_0, y_0)}{h} \quad (\text{A2.11})$$

$$\frac{\partial f}{\partial g} \approx \frac{f(x_0, y_0 + k) - f(x_0, y_0)}{k} \quad (\text{A2.12})$$

Expressões semelhantes podem ser utilizadas para calcular as derivadas de g .

Para estabelecermos um critério de convergência iremos definir os erros percentuais máximos para as raízes x e y que serão designados por $ex(\%)$ e $ey(\%)$. Após o cálculo dos incrementos Δx e Δy pelas equações A2.7 e A2.8 iremos verificar se algum destes é inferior ao incremento correspondente ao erro percentual máximo, caso isto ocorra iremos substituir o incremento calculado pela equação A2.7 ou A2.8 pelo incremento relativo ao erro percentual máximo. Este procedimento irá amenizar situações de convergência lenta e além disto quando as novas estimativas para as raízes, calculadas pelas equações A2.9 e A2.10, já tiveram atingido a pre-

cisão necessária os valores começarão a se repetir a cada duas iterações, isto é (x_{k+2}, y_{k+2}) será igual a (x_k, y_k) .

Os valores de h e k para o cálculo numérico das derivadas serão tomados como iguais aos Δx e Δy obtidos na iteração anterior.

A2.2 - Método da Secante

Para resolvermos o sistema, dado pelas equações A2.1 e A2.2, utilizando o método da secante, necessitamos de três estimativas iniciais para as raízes por ex.: (x_1, y_1) , (x_2, y_2) e (x_3, y_3) .

Obtemos então o plano que interpola a $f(x, y)$ passando pelos pontos $P_1 = (x_1, y_1, z_1)$, $P_2 = (x_2, y_2, z_2)$ e $P_3 = (x_3, y_3, z_3)$ onde $z_i = f(x_i, y_i)$. O plano interpolador será dado pela equação A2.13:

$$a_1x + b_1y + c_1z = d_1 \quad (\text{A2.13})$$

O vetor (a_1, b_1, c_1) é normal ao plano interpolador. Este poderá ser calculado pelo produto vetorial entre $(P_2 - P_1)$ e $(P_3 - P_1)$ assim obteremos:

$$a_1 = (y_2 - y_1)(z_3 - z_1) - (y_3 - y_1)(z_2 - z_1) \quad (\text{A2.14})$$

$$b_1 = -(x_2 - x_1)(z_3 - z_1) + (x_3 - x_1)(z_2 - z_1) \quad (\text{A2.15})$$

$$c_1 = (x_2 - x_1)(y_3 - y_1) - (x_3 - x_1)(y_2 - y_1) \quad (\text{A2.16})$$

Podemos obter d_1 pela substituição de qualquer um dos pontos P_1 , P_2 ou P_3 na equação A2.13. Utilizando P_3 obtemos:

$$d_1 = a_1 x_3 + b_1 y_3 + c_1 z_3 \quad (\text{A2.17})$$

O mesmo procedimento é realizado para obter o plano que interpola a função g , passando pelos pontos $P_1=(x_1, y_1, w_1)$, $P_2=(x_2, y_2, w_2)$ e $P_3=(x_3, y_3, w_3)$, onde $w_i = g(x_i, y_i)$. Desta forma iremos obter a equação A2.18:

$$a_2x + b_2y + c_2z = d_2 \quad (\text{A2.18})$$

A nova estimativa x_4, y_4 para as raízes é dada pelo ponto em que a reta, intersecção entre o plano A2.13 e o plano $z = 0$, cruza com a reta, intersecção entre o plano dado pela equação A2.18 e o plano $z=0$. Para obtermos esta nova estimativa deveremos resolver o sistema abaixo:

$$a_1x + b_1y = d_1 \quad (\text{A2.19})$$

$$a_2x + b_2y = d_2 \quad (\text{A2.20})$$

Assim obtemos:

$$x_4 = \frac{d_1 b_2 - d_2 b_1}{a_1 b_2 - a_2 b_1} \quad (\text{A2.21})$$

$$y_4 = \frac{a_1 d_2 - a_2 d_1}{a_1 b_2 - a_2 b_1} \quad (\text{A2.22})$$

O processo, acima indicado, pode ser repetido sucessivas vezes, utilizando os três últimos pontos obtidos para determinar os planos interpoladores. O sucesso na utilização deste método irá depender da escolha das estimativas iniciais, do comportamento das funções f e g , próximo às raízes e de que os três pontos utilizados determinem um plano, isto é, não sejam co-lineares.

Do mesmo modo como foi feito no item anterior, podemos definir os máximos erros percentuais $ex(\%)$ e $ey(\%)$ para as raízes. Ao obtermos um novo par de raízes pelas equações A2.21 e A2.22 verificamos se algum dos incrementos em relação às raízes anteriores não são menores que o relativo ao máximo erro percentual. Caso algum dos incrementos seja inferior ao incremento relativo ao erro máximo permitido substituiremos o valor calculado pela equação A2.21 ou A2.22, pelo valor obtido com incremento igual ao máximo

erro permitido. Da mesma forma que no ítem anterior, este procedimento irá evitar situações de convergência lenta e quando as raízes já estiverem dentro da precisão desejada os valores começarão a se repetir a cada 2 passos.

A.3 - PROGRAMA MFGN.

Programa em linguagem FORTRAN utilizando o método das funções de Green, com o método de Newton para obtenção das raízes.

A3.1 - Instruções para Utilização do Programa.

Os dados de entrada a serem fornecidos são:

- a) O número de Stefan.
- b) Número de pares de raízes a ser obtido.
- c) Intervalo de tempo Δt^* .
- d) Erro percentual na obtenção dos S_k .
- e) Erro percentual na obtenção dos W_k .
- f) Primeiro instante de tempo para impressão dos resultados.
- g) Incremento de tempo para impressão dos resultados.

Os dados acima deverão ser fornecidos em um cartão ou arquivo de dados no seguinte formato:

dados: $\underbrace{\text{nnn.n}}_a \underbrace{\text{nnnnn}}_b \underbrace{\text{nnn.nnnnn}}_c \underbrace{\text{nnn.nnn}}_d \underbrace{\text{nnn.nnn}}_e \underbrace{\text{nn.nnnn}}_f \underbrace{\text{nn.nnnn}}_g$

n - Caractere numérico.

∅ - Caractere em branco.

. - Posição do ponto decimal.

A unidade de leitura de dados é a unidade 2 e a unidade de impressão de resultados é a número 3. A unidade 1 indica dados a serem enviados a tela do terminal. Caso o sistema, utilizado, exija outros números para identificar estas unidades será necessário modificar todos os comandos READ e WRITE.

O número máximo de raízes que este programa permite obter é 300. Caso haja necessidade de um número maior deve-se alterar os comandos COMMON e DIMENSION.

A3.2 - Listagem do Programa.

```

C*****
C  PROGRAMA UTILIZANDO METODO DA FUNCAO DE GREEN
C  METODO DE NEWTON PARA RESOLVER OS SISTEMAS
C  NAO LINEARES
C
C  DISPOSITIVOS DE ENTRADA E SAIDA UTILIZADOS
C  1 - TERMINAL
C  2 - ARQUIVO PARA ENTRADA DE DADOS EM DISCO
C  3 - ARQUIVO PARA SAIDA DE DADOS EM DISCO
C*****
C          LISTA DE VARIAVEIS
C          -----
C  TK(I)  - INSTANTES DE TEMPO TK
C  SK(I)  - S NOS INSTANTES TK
C  WK(I)  - W NOS INSTANTES TK
C  STE    - NUMERO DE STEFAN
C  NT     - NUMERO DE TRECHOS PARA AVALIAR AS INTEGRAIS
C  NL     - NUMERO DE RAIZES A SEREM CALCULADAS
C  DT     - INTERVALO ENTRE CADA AVALIACAO DAS RAIZES
C  EPS    - ERRO PERCENTUAL MAXIMO PARA S
C  EPW    - ERRO PERCENTUAL MAXIMO PARA W
C  TIMP   - INSTANTE DE TEMPO PARA IMPRESSAO
C  DTIMP  - INCREMENTO EM TIMP
C  SO     - ESTIMATIVA PARA S
C  WO     - ESTIMATIVA PARA W
C  N      - NL+1
C  I      - INDICE
C*****
C*****
C  PROGRAMA UTILIZANDO DUPLA PRECISAO
C*****
C          IMPLICIT REAL*(A-H,O-Z)
C          EXTERNAL EO1,EO2
C*****
C  O NUMERO MAXIMO DE RAIZES QUE ESTE PROGRAMA
C  PERMITE OBTER E 300. CASO SEJA NECESSARIO UM
C  NUMERO MAIOR ALTERAR A INSTRUCAO ABAIXO
C*****
C          COMMON TK(300),WK(300),SK(300),STE,NT
C*****
C          LEITURA DOS DADOS
C*****
C          READ(2,60) STE,NL,DT,EPS,EPW,TIMP,DTIMP
C*****
C          IMPRESSAO DO CABECALHO
C*****
C          WRITE(3,70) STE,DT
C*****
C          INICIALIZACAO DE VARIAVEIS
C*****
C          N=NL+1
C          DO 10 I=1,N
10  TK(I)=FLD(1)*DT
C          NT=2
C          SK(I)=0.0

```

```

      WK(1)=1.0
C*****
C ESTIMATIVAS INICIAIS PARA O PRIMEIRO PAR DE RAIZES *
C*****
      SO=-1.0+DSQRT(1.0+2.0*TK(2)/STE)
      WO=1.0/(SO+1.0)
C*****
C CHAMDA DA SUBROTINA NEWTON PARA OBTER AS RAIZES *
C*****
      20 CALL NEWTON(EQ1,EQ2,SO,WO,EPS,EPW,SK(NT),WK(NT))
C*****
C VERIFICA SE JA FOI ATINGIDO O INSTANTE PARA *
C IMPRESSAO DOS RESULTADOS *
C*****
      IF(TK(NT).LT.TIMP) GO TO 30
      WRITE(3,80) TK(NT),WK(NT),SK(NT)
      TIMP=TIMP+DTIMP
      30 WRITE(1,*) NT
C*****
C VERIFICA SE O ULTIMO PAR DE RAIZES JA FOI OBTIDO *
C*****
      IF(NT.EQ.N) GO TO 40
C*****
C ESTIMATIVAS INICIAIS PARA AS RAIZES *
C*****
      SO=SK(NT)+(SK(NT)-SK(NT-1))/(TK(NT)-TK(NT-1))*
      *(TK(NT+1)-TK(NT))
      WO=WK(NT)+(WK(NT)-WK(NT-1))/(TK(NT)-TK(NT-1))*
      *(TK(NT+1)-TK(NT))
      NT=NT+1
      GO TO 20
      40 STOP
      60 FORMAT(1X,F5.1
      *,1X,I4,1X,F9.5,1X,F7.3,1X,F7.3,1X,F7.4,1X,F7.4)
      70 FORMAT(10X,'STE=',F5.3,' DT=',F6.4)
      80 FORMAT(1X,F8.2,1X,F8.5,1X,F8.4)
      END

```

```

SUBROUTINE NEWTON(F,G,X0,Y0,EPX,EPY,XR,YR)
C*****
C      SUBROTINA QUE UTILIZA O METODO DE
C      NEWTON PARA RESOLVER O SISTEMA
C      DE EQUACOES NAO LINEARES
C      F(X,Y)=0
C      G(X,Y)=0
C*****
C      LISTA DE VARIAVEIS
C      -----
C      XO      - ESTIMATIVA PARA X
C      YO      - ESTIMATIVA PARA Y
C      EPX     - ERRO PERCENTUAL ADMITIDO PARA X
C      EPY     - ERRO PERCENTUAL ADMITIDO PARA Y
C      XR,YR   - RAIZES OBTIDAS
C      IND     - INDICADOR PARA A PRIMEIRA ITERACAO
C      TOLX    - INCREMENTO EM X CORRESPONDENTE AO ERRO MAXIMO
C      TOLY    - INCREMENTO EM Y CORRESPONDENTE AO ERRO MAXIMO
C      FO      - F CALCULADA EM XO E YO
C      GO      - G CALCULADA EM XO E YO
C      H       - INCREMENTO EM X PARA O CALCULO DAS DERIVADAS
C      K       - INCREMENTO EM Y PARA O CALCULO DAS DERIVADAS
C      FODX    - F CALCULADA EM XO+H E YO
C      DFDXO   - DERIVADA DE F EM RELACAO A X
C      GODX    - G CALCULADA EM XO+H E YO
C      DGD XO  - DERIVADA DE G EM RELACAO A X
C      FODY    - F CALCULADA EM XO E YO+K
C      DFDYO   - DERIVADA DE F EM RELACAO A Y
C      GODY    - G CALCULADA EM XO E YO+K
C      DGDYO   - DERIVADA DE G EM RELACAO A Y
C      JACOB   - JACOBIANO
C      XI      - NOVA ESTIMATIVA PARA X
C      YI      - NOVA ESTIMATIVA PARA Y
C      DX      - INCREMENTO EM X
C      DY      - INCREMENTO EM Y
C      DXA     - INCREMENTO ANTERIOR PARA X
C      DYA     - INCREMENTO ANTERIOR PARA Y
C*****
      IMPLICIT REAL*8(A-H,K-Z)
      REAL*8 JACOB
C*****
C      PREPARACAO PARA A PRIMEIRA ITERACAO
C*****
      TOLX=DABS(EPX*X0/100.0)
      TOLY=DABS(EPY*Y0/100.0)
      H=0.0003
      K=0.0003
      IND=1
C*****
C      INICIO DO CALCULO ITERATIVO
C*****
10  F0=F(X0,Y0)
      G0=G(X0,Y0)

```

```

C*****
C  CALCULO DAS DERIVADAS
C*****
      FODX=F(X0+H,Y0)
      DFDX0=(FODX-F0)/H
      GODX=G(X0+H,Y0)
      DGDY0=(GODX-G0)/H
      FODY=F(X0,Y0+K)
      DFDY0=(FODY-F0)/K
      GODY=G(X0,Y0+K)
      DGDY0=(GODY-G0)/K
      JACOB=DFDX0*DGDY0-DGDY0*DFDY0
      IF(JACOB.EQ.0) GO TO 50
      DX=(F0*DGDY0-G0*DFDY0)/JACOB
      DY=(G0*DFDX0-F0*DGDY0)/JACOB
      IF(DABS(DX).LT.TOLX) DX=DSIGN(TOLX,DX)
      IF(DABS(DY).LT.TOLY) DY=DSIGN(TOLY,DY)
C*****
C  OBTENCAO DA NOVA ESTIMATIVA PARA AS RAIZES
C*****
      X1=X0-DX
      Y1=Y0-DY
C*****
C  VERIFICA SE ESTAMOS NA PRIMEIRA ITERACAO
C*****
      IF(IND.EQ.1) GO TO 30
C*****
C  VERIFICA SE HOUVE CONVERGENCIA
C*****
      IF(DX+DXA.EQ.0.AND.DY+DYA.EQ.0) GO TO 40
C*****
C  PREPARACAO PARA NOVA ITERACAO
C*****
20  DXA=DX
     DYA=DY
     X0=X1
     Y0=Y1
     H=DX
     K=DY

30  IND=0
     GO TO 20

40  XR=(X0+X1)/2.0
     YR=(Y0+Y1)/2.0
     RETURN

50  WRITE(1,60)
     STOP

60  FORMAT('JACOBIANO NULO')
     END

```

FUNCTION EQ1(VS,VW)

```

C*****
C  FUNCAO RELATIVA A PRIMEIRA EQUACAO
C  W=DUDX(O,T)
C*****
C          LISTA DE VARIAVEIS
C  1
C  -----
C  VS      - S NO INSTANTE DE TEMPO T
C  VW      - W NO INSTANTE DE TEMPO T
C  PI      - PI
C  TA      - INSTANTE DE TEMPO ANTERIOR
C  SA      - S EM TA
C  WA      - W EM TA
C  TN      - INSTANTE DE TEMPO ATUAL
C  SN      - S EM TN
C  WN      - W EM TN
C  DSDT    - DERIVADA DE S EM RELACAO A T
C  DWDT    - DERIVADA DE W EM RELACAO A T
C  T       - INSTANTE DE TEMPO
C  I6      - I6(O,T)
C  I7      - I7(O,T)
C  I6K     - TERMO PARA O CALCULO DA INTEGRAL I6
C  I7K     - TERMO PARA O CALCULO DA INTEGRAL I7
C  DUDX    - DERIVADA DA TEMPERATURA EM RELACAO A X
C  I       - INDICE
C*****
C          IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C          REAL*8 I6,I7,I6K,I7K
C*****
C  O NUMERO MAXIMO DE RAIZES QUE ESTE PROGRAMA
C  PERMITE OBTER E 300. CASO SEJA NECESSARIO UM
C  NUMERO MAIOR ALTERAR A INSTRUCAO ABAIXO
C*****
C          COMMON TK(300),WK(300),SK(300),STE,NT
C*****
C          DEFINICAO DE FUNCOES AUXILIARES
C*****
C          F1K(XV,TV)=DWDT*(TV-TA+XV*XV/2.0)+WA-1.0
C          F2(XV,TV)=DERF(XV/(2.0*DSQRT(TV)))
C          F3K(XV,TV)=DWDT*XV*DSQRT(TV/PI)*DEXP(-(XV*XV)/(4.0*TV))
C          F4K(XV,TV)=DEXP(DSDT*(DSDT*(TV-TA)+SA-XV))
C          F5K(XV,TV)=DERF(XV/(2.0*DSQRT(TV))+DSDT*DSQRT(TV))
C          F6K(XV,TV,TAU)=DEXP(-XV*XV/(4.0*(TV-TAU)))/
C          *DSQRT(PI*(TV-TAU))*(DWDT*(2.0*TV-TA-TAU)+WA-1.0)
C*****
C          INICIALIZACAO DE VARIAVEIS
C*****
C          PI=3.141592654
C          T=TK(NT)
C          SK(NT)=VS
C          WK(NT)=VW
C          I6=0.0
C          I7=0.0
C          WN=WK(1)
C          SN=SK(1)

```

```

      TN=TK(I)
      DO 5 I=2,NT
C*****
C  CALCULO DAS INTEGRAIS I6 E I7
C*****
      WA=WN
      WN=WK(I)
      SA=SN
      SN=SK(I)
      TA=TN
      TN=TK(I)
      DWDT=(WN-WA)/(TN-TA)
      DSST=(SN-SA)/(TN-TA)
      IF(I.EQ.NT) GO TO 10
C*****
C  PARCELAS PARA O CALCULO DE DUDX(O,T) (I DIFERENTE DE N)
C*****
      I6K=F6K(0.0,T,TN)-F6K(0.0,T,TA)
      I7K=F4K(0.0,T)*(F5K(SN,T-TN)-F5K(SA,T-TA))*DSST
15  I6=I6+I6K
      I7=I7+I7K
5   CONTINUE
      DUDX=I6+STE*I7
      EQ1=VW-DUDX
      RETURN
C*****
C  PARCELAS PARA O CALCULO DE DUDX(O,T) (I = N)
C*****
10  I6K=-F6K(0.0,T,TA)
      I7K=F4K(0.0,T)*(1.0-F5K(SA,T-TA))*DSST
      GO TO 15
      END

```

FUNCTION EQ2(VS,VW)

```

C*****
C  FUNCAO RELATIVA A SEGUNDA EQUACAO
C  U(S,T)
C*****
C          LISTA DE VARIAVEIS
C          -----
C  VS      - S NO INSTANTE DE TEMPO T
C  VW      - W NO INSTANTE DE TEMPO T
C  PI      - PI
C  TA      - INSTANTE DE TEMPO ANTERIOR
C  SA      - S EM TA
C  WA      - W EM TA
C  TN      - INSTANTE DE TEMPO ATUAL
C  SN      - S EM TN
C  WN      - W EM TN
C  DSDT    - DERIVADA DE S EM RELACAO A T
C  DWDT    - DERIVADA DE W EM RELACAO A T
C  T        - INSTANTE DE TEMPO
C  I1      - I1(S,T)
C  I2      - I2(S,T)
C  I1K     - TERMO PARA O CALCULO DA INTEGRAL I1
C  I5KP    - TERMO PARA O CALCULO DA INTEGRAL I5(X,T)
C  I5KN    - TERMO PARA O CALCULO DA INTEGRAL I5(-X,T)
C  U        - TEMPERATURA
C  I        - INDICE
C*****
C          IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
C          REAL*8 I1,I2,I5N,I5P,I1K,I5KN,I5KP
C*****
C          O NUMERO MAXIMO DE RAIZES QUE ESTE PROGRAMA
C          PERMITE OBTER E 300. CASO SEJA NECESSARIO UM
C          NUMERO MAIOR ALTERAR A INSTRUCAO ABAIXO
C*****
C          COMMON TK(300),WK(300),SK(300),STE,NT
C*****
C          DEFINICAO DE FUNCOES AUXILIARES
C*****
C          F1K(XV,TV)=DWDT*(TV-TA+XV*XV/2.0)+WA-1.0
C          F2(XV,TV)=DERF(XV/(2.0*DSQRT(TV)))
C          F3K(XV,TV)=DWDT*XV*DSQRT(TV/PI)*DEXP(-(XV*XV)/(4.0*TV))
C          F4K(XV,TV)=DEXP(DSDT*(DSDT*(TV-TA)+SA-XV))
C          F5K(XV,TV)=DERF(XV/(2.0*DSQRT(TV))+DSDT*DSQRT(TV))
C          F6K(XV,TV,TAU)=DEXP(-XV*XV/(4.0*(TV-TAU)))/
C          *DSQRT(PI*(TV-TAU))*(DWDT*(2.0*TV-TA-TAU)+WA-1.0)
C*****
C          INICIALIZACAO DE VARIAVEIS
C*****
C          PI=3.141592654
C          T=TK(NT)
C          SK(NT)=VS
C          WK(NT)=VW
C          X=VS
C          I1=0.0
C          I5N=0.0

```

```

ISP=0.0
WN=WK(1)
SN=SK(1)
TN=TK(1)
DO 5 I=2,NT
C*****
C  CALCULO DAS INTEGRAIS I1 E I2 *
C*****
WA=WN
WN=WK(I)
SA=SN
SN=SK(I)
TA=TN
TN=TK(I)
DWDT=(WN-WA)/(TN-TA)
DSDT=(SN-SA)/(TN-TA)
IF(I.EQ.NT) GO TO 10
C*****
C  PARCELAS PARA O CALCULO DE U(S,T) (I DIFERENTE DE N) *
C*****
I1K=F1K(X,T)*(F2(X,T-TN)-F2(X,T-TA))+
      *F3K(X,T-TN)-F3K(X,T-TA)
I5KN=0.5*F4K(X,T)*(F5K(SA-X,T-TA)-F5K(SN-X,T-TN))
I5KP=0.5*F4K(-X,T)*(F5K(SA+X,T-TA)-F5K(SN+X,T-TN))
15  I1=I1+I1K
    I5N=I5N+I5KN
    I5P=I5P+I5KP
5   CONTINUE
    I2=I5N-I5P+F2(X,T)
    U=I1+STE*I2
    EQ2=U
    RETURN
C*****
C  PARCELAS PARA O CALCULO DE U(S,T) (I = N) *
C*****
10  I1K=F1K(X,T)*(1.0-F2(X,T-TA))-F3K(X,T-TA)
    I5KN=0.5*F4K(X,T)*(F5K(SA-X,T-TA)-1.0)
    I5KP=0.5*F4K(-X,T)*(F5K(SA+X,T-TA)-1.0)
    GO TO 15
END

```


A.4 - PROGRAMA MFGS.

Programa em linguagem FORTRAN utilizando o método das funções de Green, com o método das secantes para obtenção das raízes.

A4.1 - Instruções para Utilização do Programa.

Os dados de entrada a serem fornecidos são os mesmos que no programa do apêndice 3. As mesmas observações, feitas para o programa anterior, são válidas para este programa.

As sub-rotinas tipo função EQ1 e EQ2, utilizadas no programa anterior, deverão ser acrescentadas a este programa.

A4.2 - Listagem do Programa.

```

C*****
C  PROGRAMA UTILIZANDO METODO DA FUNCAO DE GREEN
C  METODO DA SECANTE PARA RESOLUCAO DOS SISTEMAS
C  NAO LINEARES
C
C  DISPOSITIVOS DE ENTRADA E SAIDA UTILIZADOS
C  1 - TERMINAL
C  2 - ARQUIVO PARA ENTRADA DE DADOS EM DISCO
C  3 - ARQUIVO PARA SAIDA DE DADOS EM DISCO
C*****
C          LISTA DE VARIABEIS
C          -----
C  TK(I)  - INSTANTES DE TEMPO TK
C  SK(I)  - S NOS INSTANTES TK
C  WK(I)  - W NOS INSTANTES TK
C  STE    - NUMERO DE STEFAN
C  NT     - NUMERO DE TRECHOS PARA AVALIAR AS INTEGRAIS
C  NL     - NUMERO DE RAIZES A SEREM CALCULADAS
C  DT     - INTERVALO ENTRE CADA AVALIACAO DAS RAIZES
C  EPS    - ERRO PERCENTUAL MAXIMO PARA S
C  EPW    - ERRO PERCENTUAL MAXIMO PARA W
C  TIMP   - INSTANTE DE TEMPO PARA IMPRESSAO
C  DTIMP  - INCREMENTO EM TIMP
C  S1,S2,S3 - TRES ESTIMATIVAS PARA S
C  W1,W2,W3 - TRES ESTIMATIVAS PARA W
C  N      - NL+1
C  I      - INDICE
C*****
C*****
C  PROGRAMA UTILIZANDO DUPLA PRECISAO
C*****
C          IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C          EXTERNAL EQ1,EQ2
C*****
C  O NUMERO MAXIMO DE RAIZES QUE ESTE PROGRAMA
C  PERMITE OBTER E 300. CASO SEJA NECESSARIO UM
C  NUMERO MAIOR ALTERAR A INSTRUCAO ABAIXO
C*****
C          COMMON TK(300),WK(300),SK(300),STE,NT
C*****
C  LEITURA DOS DADOS
C*****
C          READ(2,60) STE,NL,DT,EPS,EPW,TIMP,DTIMP
C*****
C  IMPRESSAO DO CABECALHO
C*****
C          WRITE(3,70) STE,DT
C*****
C  INICIALIZACAO DE VARIABEIS
C*****
C          N=NL+1
C          DO 10 I=1,N
10  TK(I)=FLOAT(I-1)*DT
C          SK(I)=0.0
C          WK(I)=1.0

```

NT=2

C*****
 C ESTIMATIVAS INICIAIS PARA O PRIMEIRO PAR DE RAIZES *

C*****

S3=(-1.0+DSQRT(1.0+2.0*TK(2)/STE))

W3=1.0/(S3+1.0)

S1=S3+S3*EPS/100.0

S2=S3

W1=W3

W2=W3+W3*EPW/100.0

C*****
 C CHAMADA DA SUBROTINA SECANT PARA OBTEN AS RAIZES *

C*****

20 CALL SECANT(EQ1,EQ2,S1,S2,S3,W1,W2,W3

*,EPS,EPW,SK(NT),WK(NT))

C*****

C VERIFICA SE JA FOI ATINGIDO O INSTANTE PARA *

C IMPRESSAO DOS RESULTADOS *

C*****

IF(TK(NT).LT.TIMP) GO TO 30

WRITE(3,80) TK(NT),WK(NT),SK(NT)

TIMP=TIMP+DTIMP

30 WRITE(1,*) NT

C*****

C VERIFICA SE O ULTIMO PAR DE RAIZES JA FOI OBTIDO *

C*****

IF(NT.EQ.N) GO TO 40

C*****

C ESTIMATIVAS INICIAIS PARA AS RAIZES *

C*****

S3=SK(NT)+(SK(NT)-SK(NT-1))/(TK(NT)-TK(NT-1))*
 *(TK(NT+1)-TK(NT))

W3=WK(NT)+(WK(NT)-WK(NT-1))/(TK(NT)-TK(NT-1))*
 *(TK(NT+1)-TK(NT))

S1=S3+S3*EPS/100.0

S2=S3

W1=W3

W2=W3+W3*PW/100.0

NT=NT+1

GO TO 20

40 STOP

60 FORMAT(1X,F5.1,1X,

*I4,1X,F9.5,1X,F7.3,1X,F7.3,1X,F7.4,1X,F7.4)

70 FORMAT(10X,'STE=',F5.3,' DT=',F6.4)

80 FORMAT(1X,F8.2,1X,F8.5,1X,F8.4)

END

```

SUBROUTINE SECANT(F,G,X1,X2,X3,Y1,Y2,Y3,EPX,EPY,XR,YR)
C*****
C      SUB-ROTINA QUE UTILIZA O METODO DA
C      SECANTE PARA RESOLVER O SISTEMA
C      DE EQUACOES NAO LINEARES
C      F(X,Y)=0
C      G(X,Y)=0
C*****
C      LISTA DE VARIAVEIS
C      -----
C      X1,X2,X3  - TRES ESTIMATIVAS PARA X
C      Y1,Y2,Y3  - TRES ESTIMATIVAS PARA Y
C      EPX      - ERRO PERCENTUAL ADMITIDO PARA X
C      EPY      - ERRO PERCENTUAL ADMITIDO PARA Y
C      XR,YR    - RAIZES OBTIDAS
C      IND      - INDICADOR PARA A PRIMEIRA ITERACAO
C      TOLX     - INCREMENTO EM X CORRESPONDENTE AO ERRO MAXIMO
C      TOLY     - INCREMENTO EM Y CORRESPONDENTE AO ERRO MAXIMO
C      Z1      - F CALCULADA COM X1 E Y1
C      Z2      - F CALCULADA COM X2 E Y2
C      Z3      - F CALCULADA COM X3 E Y3
C      W1      - G CALCULADA COM X1 E Y1
C      W2      - G CALCULADA COM X2 E Y2
C      W3      - G CALCULADA COM X3 E Y3
C      A1,B1,C1,D1 - DEFINEM O PLANO QUE INTERPOLA A F
C      A2,B2,C2,D2 - DEFINEM O PLANO QUE INTERPOLA A G
C      X4      - NOVA ESTIMATIVA PARA X
C      Y4      - NOVA ESTIMATIVA PARA Y
C      DX      - INCREMENTO EM X
C      DY      - INCREMENTO EM Y
C      DXA     - INCREMENTO ANTERIOR PARA X
C      DYA     - INCREMENTO ANTERIOR PARA Y
C*****
C      IMPLICIT REAL*8(A-H,K-Z)
C*****
C      PREPARACAO PARA A PRIMEIRA ITERACAO
C*****
      TOLX=DABS(X3*EPX/100.0)
      TOLY=DABS(Y3*EPY/100.0)
      IND=1
      Z1=F(X1,Y1)
      Z2=F(X2,Y2)
      W1=G(X1,Y1)
      W2=G(X2,Y2)
C*****
C      INICIO DO CALCULO ITERATIVO
C*****
      10  Z3=F(X3,Y3)
      W3=G(X3,Y3)
C*****
C      OBTENCAO DO PLANO QUE INTERPOLA A F
C*****
      A1=(Y2-Y1)*(Z3-Z1)-(Y3-Y1)*(Z2-Z1)
      B1=-(X2-X1)*(Z3-Z1)+(X3-X1)*(Z2-Z1)
      C1=(X2-X1)*(Y3-Y1)-(X3-X1)*(Y2-Y1)

```

```

D1=A1*X3+B1*Y3+C1*Z3
C*****
C OBTENCAO DO PLANO QUE INTERPOLA A G *
C*****
A2=(Y2-Y1)*(W3-W1)-(Y3-Y1)*(W2-W1)
B2=-(X2-X1)*(W3-W1)+(X3-X1)*(W2-W1)
C2=C1
D2=A2*X3+B2*Y3+C2*W3
C*****
C OBTENCAO DA NOVA ESTIMATIVA PARA AS RAIZES *
C*****
X4=(D1*B2-D2*B1)/(A1*B2-A2*B1)
Y4=(A1*D2-A2*D1)/(A1*B2-A2*B1)
DX=X3-X4
DY=Y3-Y4
IF(DABS(DX).LT.TOLX) DX=DSIGN(TOLX,DX)
IF(DABS(DY).LT.TOLY) DY=DSIGN(TOLY,DY)
X4=X3-DX
Y4=Y3-DY
C*****
C VERIFICA SE ESTAMOS NA PRIMEIRA ITERACAO *
C*****
IF(IND.EQ.1) GO TO 30
C*****
C VERIFICA SE HOVE CONVERGENCIA *
C*****
IF(DX+DXA.EQ.0.AND.DY+DYA.EQ.0) GO TO 40
C*****
C PREPARACAO PARA NOVA ITERACAO *
C*****
20 DXA=DX
DYA=DY
X1=X2
X2=X3
X3=X4
Y1=Y2
Y2=Y3
Y3=Y4
Z1=Z2
Z2=Z3
W1=W2
W2=W3
GO TO 10
30 IND=0
GO TO 20
40 XR=(X3+X4)/2.0
YR=(Y3+Y4)/2.0
RETURN
END

```

A.5 - PROGRAMA SOLDF.

Programa em linguagem FORTRAN utilizando o método das diferenças finitas.

A5.1 - Instruções para Utilização do Programa.

Os dados de entrada a serem fornecidos são:

- a) Número de Stefan.
- b) Incremento Δx^* .
- c) Fator de segurança para Δt^* .
- d) Primeiro instante de tempo para impressão dos resultados.
- e) Incremento de tempo para impressão dos resultados.
- f) Instante de tempo final.

Os dados acima deverão ser fornecidos em um cartão ou arquivo no seguinte formato:

$\underbrace{\text{nn.nnn}}_a \underbrace{\text{nnnnnnnn}}_b \underbrace{\text{.nn}}_c \underbrace{\text{nn.nn}}_d \underbrace{\text{nn.nn}}_e \underbrace{\text{nnn.nn}}_f$
 dados: a b c d e f

n - Caractere numérico.

∅ - Caractere em branco.

. - Posição do ponto decimal.

A unidade 3 é de impressão dos resultados. A unidade 2 é a de leitura de dados. A unidade 1 é o terminal. O número máximo de nós espaciais que este programa permite utilizar é 300. Caso seja necessário utilizar um número maior deve-se alterar o comando DIMENSION.

A5.2 - Listagem do Programa.

```

C*****
C SOLUCAO PELO METODO DE DIFENCAS FINITAS *
C NOVA ABORDAGEM *
C*****
C LISTA DE VARIAVEIS
C -----
C STE -NUMERO DE STEFAN
C DX -INCREMENTO NA DIRECAO X
C FSEG -FATOR DE SEGURANCA PARA DT
C TIMP -TEMPO PARA INICIO DE IMPRESSAO
C DTIMP -INTERVALO DE TEMPO PARA IMPRESSAO
C TFIN -TEMPO PARA TERMINO DO PROCESSAMENTO
C DT1 -INCREMENTO DE TEMPO
C DT -INCREMENTO DE TEMPO
C TEMPO -TEMPO
C TF -TEMPERATURA DE FUSAO
C FO -NUMERO DE FOURIER
C BI -NUMERO DE BIOT
C SA -POSICAO DA FRENTE NO INSTANTE ANTERIOR
C TOA -TEMP. EM X=0 NO INSTANTE ANTERIOR
C TEMPOA-INSTANTE DE TEMPO ANTERIOR
C DS -DISTANCIA DA FRENTE EM RELACAO AO NODO I=NFS
C TA -VARIAVEL AUXILIAR P/ NOVA TEMPERATURA DO NODO I-1
C TN -VARIAVEL AUXILIAR P/ NOVA TEMPERATURA DO NODO I
C S -POSICAO DA FRENTE DE SOLIDIFICACAO
C TOI -TEMP. EM X=0 PARA IMPRESSAO
C NFS -INDICE DO NODO MAIS PROXIMO A FRENTE
C NFSA -NFS-1
C I -INDICE
C T -TEMPERATURAS
C*****
C O PROGRAMA UTILIZA DUPLA PRECISAO
C*****
C IMPLICIT REAL*(A-H,O-Z)
C*****
C NUMERO MAXIMO DE NODOS=300
C CASO SEJA NECESSARIO UM
C NUMERO MAIOR ALTERAR A
C INSTRUCAO ABAIXO
C*****
C DIMENSION T(300)
C-----
C LEITURA DOS DADOS
C-----
C READ(2,5) STE,DX,FSEG,TIMP,DTIMP,TFIN
C-----
C CONDICAO DE ESTABILIDADE P/ NODO 1
C-----
C DT1=FSEG*0.5*DX**2.0/(1.0+DX)
C-----
C CONDICAO DE ESTABILIDADE P/ NFS
C-----
C DT=FSEG*DX**2.0/4.0
C
C

```

```

C-----
C      ESCOLHA DO MENOR DT
C-----
C      IF(DT1.LT.DT) DT=DT1
C-----
C      IMPRESSAO DOS DADOS DE ENTRADA E DT
C-----
C      WRITE(3,10) STE,DX,DT
C-----
C      CONDICAO INICIAL SEGUNDO SOLUCAO DE SEBAN
C-----
C      TEMPO=(9.0*DX**2.0/4.0+3.0*DX)*STE/2.0
C      T(1)=(2.0/(3.0*DX))/(1.0+2.0/(3.0*DX))
C      T(2)=2.0*(1.0-T(1))/3.0+T(1)
C-----
C      INICIALIZACAO DE VARIAVEIS
C-----
C      TF=1.0
C      FO=DT/(DX**2.0)
C      BI=DX
C      NFS=2
C      SA=3.0*DX/2.0
C      TOA=T(1)
C      TEMPOA=TEMPO
C      DS=DX/2.0
C*****
C      CALCULO DAS TEMPERATURAS NO INSTANTE T+DT
C*****
C      20 NFSA=NFS-1
C      TEMPO=TEMPO+DT
C-----
C      CALCULO DA TEMPERATURA DO NODO 1
C-----
C      TA=2.0*T(2)*FO+(1.0-2.0*FO-2.0*FO*BI)*T(1)
C      IF(NFSA.EQ.2) GO TO 50
C-----
C      CALCULO DAS TEMPERATURAS P/ OS NOS DE 2 A NFS-1
C-----
C      DO 40 I=2,NFSA
C      TN=FO*(T(I+1)+T(I-1))+(1.0-2.0*FO)*T(I)
C      T(I-1)=TA
C      TA=TN
C      40 CONTINUE
C-----
C      CALCULO DA TEMPERATURA PARA O NODO NFS
C-----
C      50 TN=(T(NFSA-1)/DX+TF/DS)*2.0*DT/(DX+DS)+
C      +(1.0-2.0*FO*DX/DS)*T(NFSA)
C-----
C      5
C      CALCULO DE DS
C-----
C      DS=DS+(1.0-T(NFSA))/(DS*STE)*DT
C      T(NFSA-1)=TA
C      T(NFSA)=TN
C

```



```

C
C-----
C      ' CASO DS SEJA MAIOR QUE 3DX/2
C      INTRODUIZIR UM NOVO NODO NA MALHA
C-----
      IF(DS.LE.3.0*DX/2.0) GO TO 70
      NFS=NFS+1
C-----
C      INICIALIZACAO DA TEMPERATURA DO
C      DO NODO NFS, INTERPOLACAO LINEAR
C-----
      T(NFS)=(TF-T(NFS-1))*DX/DS+T(NFS-1)
      DS=DS-DX
70  S=FLOAT(NFS-1)*DX+DS
C-----
C      VERIFICA SE O INSTANTE DE
C      TEMPO PARA IMPRESSAO JA FOI ALCANCADO
C-----
      IF(TEMPO.GE.TIMP) GO TO 100
C*****
C      NUMERO MAXIMO DE NODOS=300
C      CASO SEJA NECESSARIO UM
C      NUMERO MAIOR ALTERAR A
C      INSTRUCAO ABAIXO
C*****
130  IF(NFS.GT.300) GO TO 115
C-----
C      VERIFICA SE O INSTANTE DE
C      TEMPO PARA FINAL DE PROCESSAMENTO
C      JA FOI ALCANCADO
C-----
      IF(TEMPO.GT.TFIN) GO TO 120
C-----
C      PREPARACAO P/ NOVA ITERACAO
C-----
      TEMPOA=TEMPO
      TOA=T(1)
      SA=S
      GO TO 20
C-----
C      IMPRESSAO DE RESULTADOS
C-----
100  SI=(S-SA)*(TIMP-TEMPOA)/(TEMPO-TEMPOA)+SA
      TOI=(T(1)-TOA)*(TIMP-TEMPOA)/(TEMPO-TEMPOA)+TOA
      WRITE(3,110) TIMP,TOI,SI
      TIMP=TIMP+DTIMP
      GO TO 130
115  WRITE(1,140)
120  STOP
C-----
C      FORMATOS DE IMPRESSAO E LEITURA
C-----
5   FORMAT(1X,F6.3,1X,F10.8,1X,F4.2,1X,F5.2,1X,F5.2,1X,F6.2)
10  FORMAT(1X,'STE=',F4.2,' DX=',F5.3,' DT=',F14.12,'/,1X,
      *' TEMPO TO S')

```

```
110 FORMAT(1X,F8.3,1X,F8.5,1X,F8.4)
140 FORMAT(1X,'S ALCANCOU O FINAL DA MALHA')
END
```