

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA

**RESOLUÇÃO DOS MODELOS UNIDIMENSIONAL
E BIDIMENSIONAL DE SOLIDIFICAÇÃO DE
METAIS PUROS E LIGAS EUTÉTICAS
ATRAVÉS DA TRANSFORMADA DE LAPLACE**

POR
ALICE DE JESUS KOZAKEVICIUS

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA
COMO REQUISITO PARCIAL PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE

Orientador
Prof. Dr. Marco Túlio Menna Barreto de Vilhena

Porto Alegre, Dezembro de 1994.

A g r a d e c i m e n t o s

Agradeço ao Professor Marco Sebastiani não apenas pelos ensinamentos desde os tempos de graduação, mas também pelo incentivo e pelo grande exemplo como profissional e ser humano; ao meu querido orientador, Professor Marco Túlio, pela dedicação e atenção; ao Professor Milton Zaro pelas explicações sobre solidificação, pelas valiosas sugestões e conselhos; aos colegas do PROMEC, em especial, às amigas Ângela e Magda; ao Nick pela grande ajuda no aprendizado do *software Reduce*; ao pessoal da biblioteca do Departamento de Matemática, Jane, Erica e Adriana; à Jane da Secretaria de Pós-Graduação da Matemática; ao Leco pela ajuda no árduo trabalho de digitação e pelo carinho e a minha amada mãe pelo infinito apoio e amizade.

16412

DISSERT./MAT
K88R
1994

MAT
1996/142253-2
1996/07/29
7668

Resumo

Este trabalho tem como objetivo apresentar uma solução em forma fechada para uma modelagem, tanto unidimensional quanto bidimensional, do processo de solidificação.

Esta modelagem, proposta por Kanetkar *et al*, aborda a solidificação em termos de dois processos: o macroscópico e o microscópico. O primeiro descreve a transferência de calor do metal para o molde e do sistema metal-molde para o meio ambiente; já o segundo descreve a formação e o desenvolvimento de grãos no metal durante sua mudança de fase. O acoplamento desses processos se dá através da inclusão do termo fonte, representante da cinética de solidificação, na equação de conservação de energia para condução do calor.

Ao invés de utilizar o método de diferenças finitas na resolução das equações do modelo unidimensional, aplica-se a transformada de Laplace com respeito à variável t e resolve-se analiticamente, via *software* REDUCE, o sistema de equações gerado pelas condições de contorno para a obtenção dos coeficientes da solução transformada.

No caso bidimensional, utiliza-se um método nodal para transformar o problema novamente em uma modelagem unidimensional. Integram-se as equações em uma das direções, no caso, em z , passando-se a calcular o fluxo médio de calor. Uma extensão possível é subdividir o domínio de integração e calcular o fluxo médio em cada uma das novas regiões interligadas através de condições de contorno.

Abstract

The modeling of solidification, proposed by Kanetkar *et al*, treats the solidification as a process involving macroscopic and microscopic features. The macroscopic aspect describes the heat transfer from the metal to the cylindrical body and from the system "metal-mold" to the surroundings. The second describes the formation and development of grains in the metal during its phase changing. The coupling of these two features of the process is made with the inclusion of a source term, that represents the nucleation, in the conservation equation for the heat transfer.

Instead of using finite difference methods for solving the equations of the unidimensional model, Laplace transform with respect to the temporal variable (t) is applied in the equations, and for solving analytically the system of equations generated by the boundary conditions from the model, the software REDUCE is used.

In the two dimensional model is used a nodal method to transform the problem again in a unidimensional modeling. The equations are integrated in a chosen direction, here z . After that they were solved for a mean heat flux. It is also possible to divide the domain of integration and to calculate the mean heat flux in each new region considering that each one is connected with the others by new boundary conditions.

Índice

1	Introdução	4
2	Uma Modelagem para Solidificação	7
2.1	Aspectos Micro-Estruturais	7
2.2	Formulação Analítica do Problema	11
2.3	O Método do Calor Latente	12
2.3.1	Cálculo da Fração de Sólido pela Curva de Resfriamento	12
2.3.2	Cálculo da Fração de Sólido via Nucleação e Leis de Crescimento	17
2.4	Hipóteses Simplificativas desta Modelagem	20
3	Inversão da Transformada de Laplace	22
3.1	Definição	22
3.2	Inversão via Teorema de Resíduos	23
3.3	Inversão via Métodos Numéricos	24
3.3.1	Métodos que utilizam seqüências	25
3.3.2	Métodos que expandem $F(t)$ em funções exponenciais	26
3.3.3	Método de Quadratura de Gauss	29
3.3.4	Métodos que usam Aproximações Bilineares para s	30
3.3.5	Representação por Série de Fourier	33
4	Modelo Unidimensional	36
4.1	Formulação	36
4.2	Solução Analítica	37
4.2.1	Determinação de uma Solução Particular	39

4.2.2	Determinação da Solução Homogênea	41
4.2.3	Solução do Problema Transformado	44
4.2.4	Solução do Problema Unidimensional	50
4.3	Inversão Numérica da Temperatura Transformada	51
4.3.1	Expressão Final	53
5	Modelo Bidimensional	55
5.1	Formulação	55
5.2	Solução Analítica	58
5.2.1	Métodos Nodais	58
6	Conclusão	65
7	Bibliografia	67
A	Funções de Bessel	71
B	Programa em REDUCE	76

Capítulo 1

Introdução

A solidificação de metais, principalmente ligas, tem sido exaustivamente estudada, e, apesar de toda a evolução, o problema ainda está longe de ser considerado resolvido [1], [2].

Os pioneiros na abordagem científica do assunto foram Neumann (1860) e Stefan (1891), embora Kelvin já houvesse tratado a questão do cálculo da idade da Terra em função da espessura da crosta como um problema de solidificação da bola de magma.

Neumann resolveu analiticamente o problema de mudança de fase de um material, considerando uma região semi-infinita ($x > 0$), inicialmente a uma temperatura constante maior do que o seu ponto de fusão e com a superfície $x = 0$ mantida a zero grau de temperatura. Posteriormente, considerou o material a uma temperatura inicial inferior à sua temperatura de fusão, abordando, com isso, a questão da distribuição de temperaturas.

Stefan resolveu analiticamente os problemas de solidificação e fusão de um metal em uma geometria retangular, considerando fluxo de calor unidirecional, desprezando a convecção natural e assumindo interface sólido-líquido plana; no entanto, foi com seu estudo sobre a espessura das calotas polares que se tornou reconhecido e, por esta razão, problemas de resfriamento são freqüentemente chamados de "problemas de Stefan" [3].

Em 1933, Schwarz, utilizando a solução geral da equação do calor em uma dimensão e em regime transiente, concebeu o modelo físico, considerado por Carslaw e Jaeger (1959) de fundamental relevância para metalurgia, uma vez que permite determinar a temperatura em qualquer ponto (molde, metal, interface) em determinado instante de

tempo.

A partir desses resultados houve uma série de avanços tanto na compreensão da física do problema quanto na sua modelagem (Vielmo [1]). Com o advento da computação, a questão de simular numericamente o fenômeno da solidificação tornou-se relevante.

Henkel e Keverian [4], em 1965, descreveram a aplicação de um programa, baseado no método de diferenças finitas, para resolver as equações de transferência de calor para fundidos. Seguiram-se os trabalhos de Pehlke, Marrone e Wilkers [5], Brody e Apelian [6], Dantzig e Berry [7] e Fredricksson [8], utilizando diferentes métodos numéricos na solução do mesmo problema.

Oldfield [9], em 1966, teve a idéia de incluir nucleação e cinética de crescimento de grão em simulações para gerar informações sobre a microestrutura de ligas e para tratar mais corretamente o problema de geração de calor, porém tais tópicos só foram abordados em 1974 no trabalho de Stefanescu e Trufinescu [10], e apenas na década de oitenta foram plenamente difundidos. (vide Kanetkar, Chen, Stefanescu e El-Kaddah [11], Fazzi Jr. [12] e Rappaz [13])

Foi também na década de oitenta que Faghr *et al.* (1984) e Cao *et al.* (1989) usaram modelos incorporando o movimento na fase líquida, e portanto a convecção natural, na simulação do processo de mudança de fase, não só para metais puros como também para ligas de diferentes tipos: eutéicas, binárias, etc. As pesquisas mais recentes na área de simulação procuram resolver o problema de solidificação sob o ponto de vista de transferência de calor, massa e quantidade de movimento. Esta formulação é considerada, até o momento, como sendo a mais completa, no entanto, devido a sua não-linearidade, pode ser resolvida apenas numericamente (Vielmo [1]).

Este trabalho, apesar de não considerar a modelagem mais completa possível, propõe a resolução em forma fechada dos modelos unidimensional e bidimensional apresentados e resolvidos numericamente por Kanetkar, Chen, Stefanescu e El-Kaddah [11], onde a equação do balanço de energia possui como termo fonte o calor latente de solidificação, supondo a fração de sólido formada como sendo uma função do tempo e levando em

consideração aspectos da nucleação e crescimento cinético para o cálculo da mesma.

A modelagem considerada por Kanetkar, as simplificações feitas no modelo a ser resolvido em uma e em duas dimensões e alguns aspectos importantes sobre nucleação e fração de sólido são apresentados no capítulo dois.

No capítulo três, apresentam-se métodos analíticos e numéricos para a inversão da transformada de Laplace de uma função e, em particular, o método que será utilizado para a expressão obtida como solução do problema transformado unidimensional. Os métodos numéricos são apresentados em classes de acordo com as hipóteses utilizadas e o tratamento que a função a ser invertida recebe. Também aspectos relevantes na inversão numérica da solução do problema transformado unidimensional são comentados neste capítulo.

No capítulo quatro, resolve-se a formulação matemática para o problema unidimensional através da aplicação da transformada de Laplace à variável tempo, (Kozakevicius [14]). Como o termo fonte da equação é dado em função da fração de sólido, apresenta-se uma linearização deste termo para que possua transformada de Laplace. A solução do problema transformado é apresentada da forma: solução homogênea mais solução particular, sendo que a primeira é uma combinação linear de funções de Bessel Modificada e a segunda depende do termo fonte. Os coeficientes da combinação linear são determinados através da aplicação da solução às condições de contorno, gerando um sistema de equações, que é resolvido analiticamente pelo *software Reduce*.

O modelo bidimensional é, então, apresentado e resolvido por um método linear nodal no capítulo cinco. Este método, muito utilizado na solução das equações de transporte de neutrons [15], pela primeira vez é utilizado na solução de um problema de solidificação. A característica fundamental deste método é permitir a solução das equações do modelo bidimensional em termos da solução obtida para o modelo unidimensional, podendo ainda ser refinado, como é mostrado no final do capítulo .

As demais observações sobre o programa escrito utilizando comandos do *software Reduce* , bem como sobre as funções de Bessel Modificada, são apresentadas nos apêndices.

Capítulo 2

Uma Modelagem para Solidificação

O processo de solidificação, segundo Stefanescu, Upadhyaya e Bandyopadhyay [10], para ser representado o mais próximo da realidade possível, deve ser descrito através da combinação de dois modelos fundamentais: o macroscópico e o microscópico.

O modelo macroscópico descreve a transferência de calor do metal para o molde, do sistema metal-molde para o meio e o escoamento do fluido de metal líquido durante o seu vazamento no molde.

Já os modelos microscópicos devem incluir características mais intrínsecas do metal nas suas diferentes fases. Têm-se como exemplos a cinética de solidificação e o escoamento de fluido na região onde existe a presença de metal líquido e metal solidificando .

Uma das maneiras de combinar uma modelagem macroscópica à uma microscópica é fazendo o acoplamento entre aspectos referentes à cinética de solidificação e um modelo de transferência de calor. Isto é o que será discutido a seguir.

2.1 Aspectos Micro-Estruturais

Na interface metal-molde, a taxa de resfriamento é maior devida à baixa temperatura do molde em relação à temperatura do metal no instante inicial. Por isso, a nucleação, isto é, a formação randômica e equi-axial (em todas as direções) dos primeiros grãos ocorre próximo à superfície do molde, gerando a chamada zona externa equi-axial. O início da nucleação depende de um certo grau de super-resfriamento, definido por [16] como sendo

a diferença entre a temperatura de equilíbrio do sistema e a temperatura real do mesmo.

Os grãos formados se transformam rapidamente desenvolvendo "braços" em várias direções. Estas novas estruturas são chamadas de dendritas. Existe um crescimento competitivo entre elas, pois aquelas que crescem preferencialmente em direção paralela e com sentido oposto ao fluxo de calor absorvem as estruturas menores existentes ao redor. As estruturas dominantes dão origem a uma nova zona, chamada zona colunar que, ao se desenvolver, separa o metal em três regiões distintas: uma formada apenas por sólido; outra, por metal líquido e a terceira, por líquido e sólido. Esta terceira região é chamada de *mushy zone*, ver *fig. 2.1*. Nesta região existe a interface sólido-líquido, onde uma zona equiaxial interna co-existe devida à formação de dendritas que ainda não se agregaram a estruturas da região sólida. Todas as características micro-estruturais do metal são determinadas na *mushy zone*, isto é, a densidade, a forma do grão, o tamanho do grão, a distribuição da variação de concentração e a porosidade.

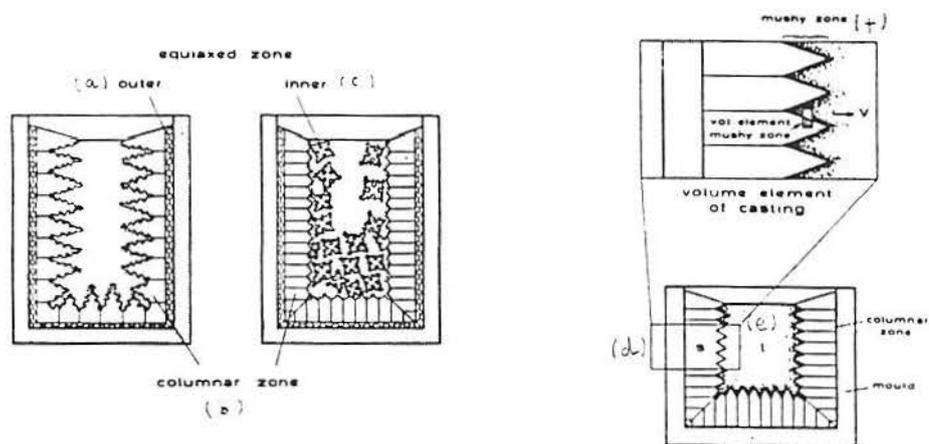


fig.2.1 (a) zona equiaxial externa, (b) zona colunar, (c) zona equiaxial interna
(d) região sólida (e) região líquida e (f) *mushy zone*

No caso de metais puros, os grãos da zona colunar formam uma interface plana e crescem na direção antiparalela ao fluxo de calor. Na zona equiaxial interna, os cristais são dendritas que crescem na mesma direção do fluxo de calor.

Já para o caso de ligas ou quando existem impurezas no metal, a morfologia da zona colunar é geralmente dendrítica, sendo quase igual àquelas dos metais puros existentes na

zona equiaxial interna. A única diferença está na escala relativa das dendritas. Isto ocorre porque o crescimento do grão em metais puros é controlado pelo fluxo de calor, enquanto que para as ligas, esse crescimento é controlado principalmente pela difusão de soluto. Sendo assim, a composição da liga desempenha papel importante na da micro-estrutura de solidificação.

Há essencialmente duas morfologias básicas de crescimento que podem ocorrer durante a solidificação de uma liga: a dendrítica e a eutética. Sendo que a mistura das duas também pode ocorrer.

As dendritas, elementos de morfologia dendrítica, pertencem ao grupo dos cristais primários e possuem uma forma que se assemelha a uma árvore. As morfologias eutéticas são caracterizadas por estruturas polifásicas, onde existe o crescimento simultâneo de duas ou mais fases do líquido, ver *fig. 2.2*.

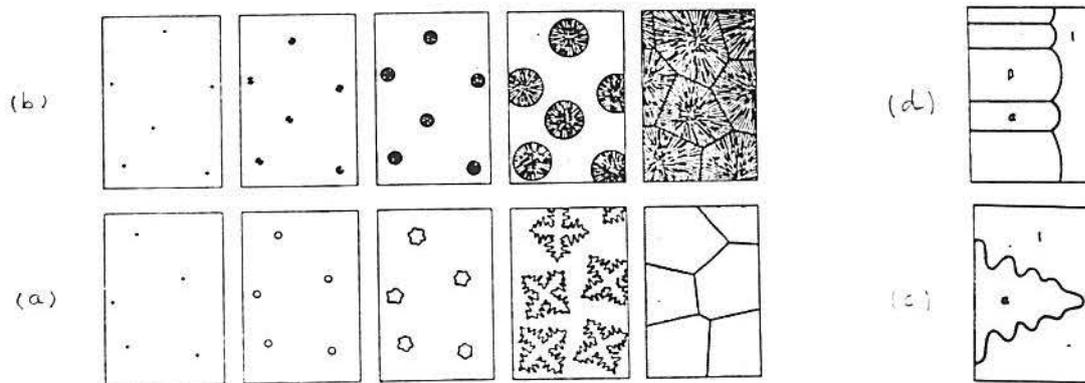


fig.2.2 (a) desenvolvimento de estrutura dendrítica a partir do núcleo,

(b) desenvolvimento de estrutura eutética a partir do núcleo,

(c) representação de interface dendrítica, (d) representação de interface eutética

Por liga eutética se entende uma liga que possua comportamento similar a um metal puro durante sua mudança de fase, isto é, a curva de resfriamento de uma liga eutética é similar à curva de um metal puro. A temperatura de fusão da liga eutética é mais baixa que a temperatura de fusão de cada uma das componentes da mesma. Ver *fig. 2.3*.

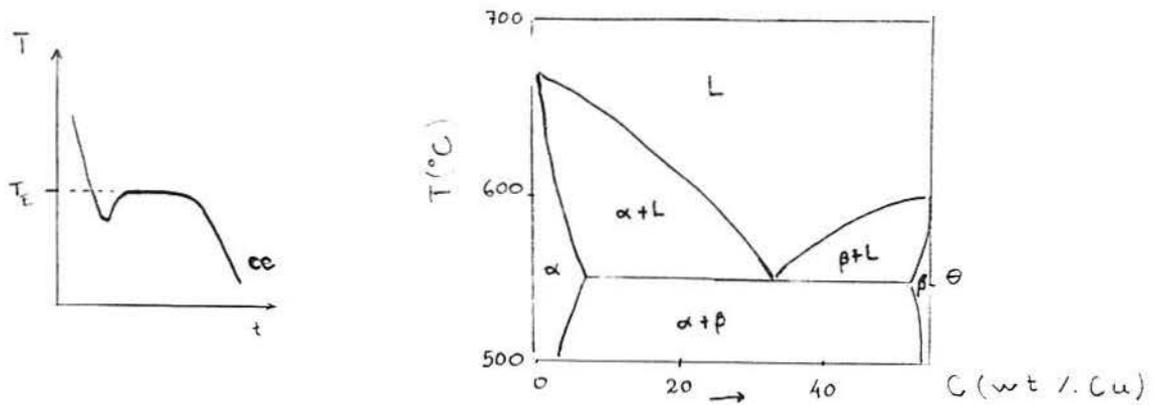


fig.2.3 (a) curva de resfriamento de uma liga eutética

(b) diagrama de fase para liga eutética bifásica, isto é, com dois componentes (α, β)

A transformação de líquido em sólido envolve a criação de uma interface sólido - líquido curva e a existência de um fluxo microscópico de calor e soluto, no caso de ligas.

A interface é dita morfologicamente instável, se uma perturbação é amplificada com o decorrer do tempo, caso contrário, é dita morfologicamente estável. Ver fig. 2.4.

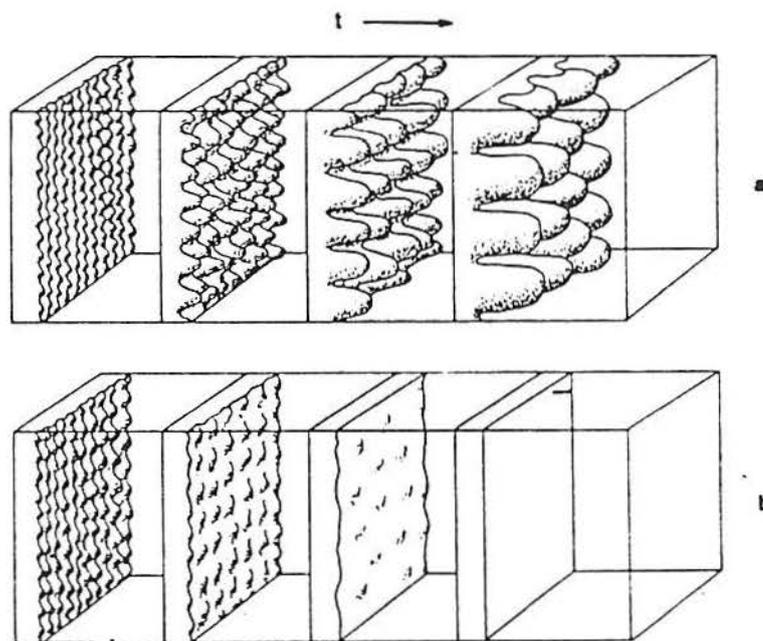


fig.2.4. (a) Evolução inicial de interface instável e (b) de interface estável

Segundo [16], durante a fundição de ligas, a interface sólido-líquido é usualmente instável. Uma interface estável é somente obtida em casos especiais tais como solidi-

ficação de metais puros ou solidificação direcional de ligas sob gradientes de temperaturas suficientemente altos.

No caso de metais puros, a interface sólido- líquido será estável sempre que o gradiente de temperatura for positivo e instável, se o gradiente de temperatura for negativo. E no caso de ligas, a instabilidade ocorre quando a o gradiente de temperatura na interface no líquido for menor do que o gradiente de temperatura *liquidus* .

2.2 Formulação Analítica do Problema

Uma modelagem da transferência de calor para um dado conjunto (sistema) ” fundido - molde ”, que englobe aspectos macroscópicos e microscópicos, requer a solução da equação de conservação de energia para condução do calor não homogênea

$$\nabla[k(T)\nabla T(x, t)] + \dot{Q} = \rho C_p(T) \frac{\partial T}{\partial t}(x, t), \quad (2.1)$$

onde x é a variável espacial, t é a variável temporal e as propriedades térmicas do metal, ρ , C_p e k , dependem de $T(x, t)$, assumindo os valores de uma fase particular ou mistura de fases prevaletentes para cada temperatura dada, e o termo fonte, \dot{Q} , representa as propriedades microestruturais do metal enquanto ocorrer a mudança de fase. Este termo descreve a taxa de evolução de calor latente durante a transformação líquido-sólido e é escrito como:

$$\dot{Q} = L \frac{\partial f_s}{\partial t}(x, t), \quad (2.2)$$

onde L é o calor latente volumétrico constante de fusão durante a transformação de fase e f_s é a fração de sólido, termo que indica a proporção de sólido gerado durante o processo de solidificação em relação a massa de metal líquido no sistema para cada instante t ou intervalo de tempo Δt considerado.

2.3 O Método do Calor Latente

Este método consiste em utilizar relações obtidas através de resultados experimentais ou utilizar as leis de nucleação e crescimento, aspectos que fazem parte da cinética de solidificação, para o cálculo de $f_s(x, t)$.

A fração de sólido $f_s(x, t)$, apenas para o caso de metais puros e ligas eutéicas, ainda poderia ser calculada assumindo-se a variação de $f_s(x, t)$ como função linear da temperatura com uma taxa de solidificação fictícia (*Implicit Enthalpy Method* e *Specific Heat Method*), o que segundo Stefanescu [10], não aborda tão diretamente a solução do problema da evolução do calor, se comparado com o método do Calor Latente.

2.3.1 Cálculo da Fração de Sólido pela Curva de Resfriamento

Para um dado fundido solidificando, o balanço da taxa de escoamento de calor pode ser escrito como: "taxa de geração de calor devido à solidificação menos taxa de mudança do calor específico do metal igual à taxa de calor perdido do metal".

Assumindo que o calor é perdido para o meio ambiente pelo metal apenas por convecção, o balanço feito acima pode ser escrito como:

$$\frac{dQ_L}{dt} - V\rho C_p \left(\frac{dT}{dt} \right)_{cc} = h_{cc}A(T_{cc} - T_0) \quad (2.3)$$

onde h_{cc} representa o coeficiente de transferência de calor efetivo que descreve a perda de calor por resfriamento Newtoniano do metal através do molde para o meio ambiente, e o subíndice cc denota a curva de resfriamento, obtida através de dados experimentais.

Ver *fig. 2.5*.

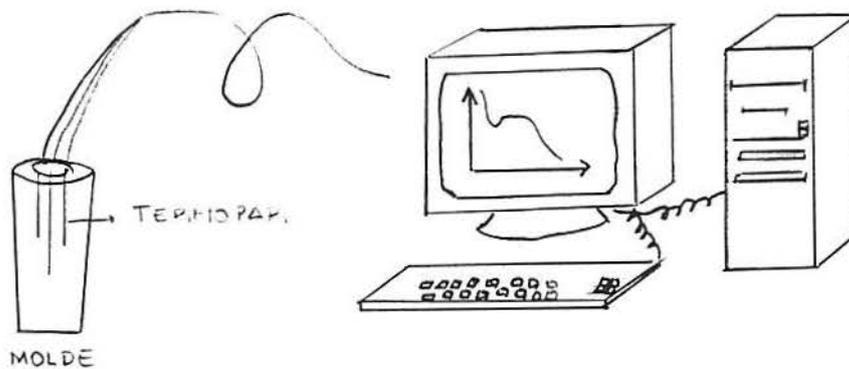


fig.2.5 A partir de termopares colocados em contato com o metal dentro do molde, a temperatura do metal é enviada a uma microcomputador a cada instante e a plotagem dos dados gera a curva desejada

A equação (2.3) é válida quando não existe gradiente de temperatura no metal. Com a notação

$$q_{cc} = h_{cc}A(T_{cc} - T_0),$$

a equação (2.3) se transforma em

$$\left(\frac{dT}{dt}\right)_{cc} = \frac{1}{V\rho C_p} \left(\frac{dQ_L}{dt} - q_{cc}\right). \quad (2.4)$$

Esta representa a derivada da curva de resfriamento.

Caso não ocorra mudança de fase durante o resfriamento, a curva temperatura x tempo que se obtém, denominada curva zero, tem a forma apresentada na *fig. 2.6*.

Esta curva pode ser facilmente calculada através da interpolação de dados experimentais da curva de resfriamento, sendo necessários apenas dois pontos.

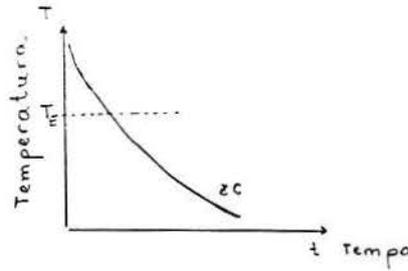


fig.2.6 A curva zero é a curva de um metal amorfo

O balanço da taxa de escoamento de calor também pode ser calculado sem a consideração da mudança de fase, e sua formulação é então dada por:

$$-V\rho C_p \left(\frac{dT}{dt} \right)_{zc} = h_{zc} A (T_{zc} - T_0),$$

ou seja,

$$\left(\frac{dT}{dt} \right)_{zc} = -\frac{h_{zc}}{V\rho C_p} A (T_{zc} - T_0),$$

onde zc representa a curva zero. Denotando, agora,

$$q_{zc} = h_{zc} A (T_{zc} - T_0),$$

a equação se torna

$$\left(\frac{dT}{dt} \right)_{zc} = -\frac{q_{zc}}{V\rho C_p}. \quad (2.5)$$

Subtraindo (2.4) de (2.5), pode-se calcular a taxa de calor perdido durante a transformação de fase.

$$\frac{dQ_L}{dt} = V\rho C_p \left[\left(\frac{dT}{dt} \right)_{cc} + q_{cc} - \left(\frac{dT}{dt} \right)_{zc} - q_{zc} \right].$$

Desprezando-se ($q_{cc} - q_{zc}$), segundo [10], obtém-se

$$\frac{dQ_L}{dt} = V\rho C_p \left[\left(\frac{dT}{dt} \right)_{cc} - \left(\frac{dT}{dt} \right)_{zc} \right]. \quad (2.6)$$

Integrando a equação (2.6), tem-se

$$Q_L = V\rho C_p \int_0^t \left[\left(\frac{dT}{dt} \right)_{cc} - \left(\frac{dT}{dt} \right)_{zc} \right] dt, \quad (2.7)$$

ou seja,

$$L' = \frac{Q_L}{V\rho} = C_p \left[\text{área sob} \left(\frac{dT}{dt} \right)_{cc} - \text{área sob} \left(\frac{dT}{dt} \right)_{zc} \right], \quad (2.8)$$

como mostra a *fig. 2.7* a seguir.

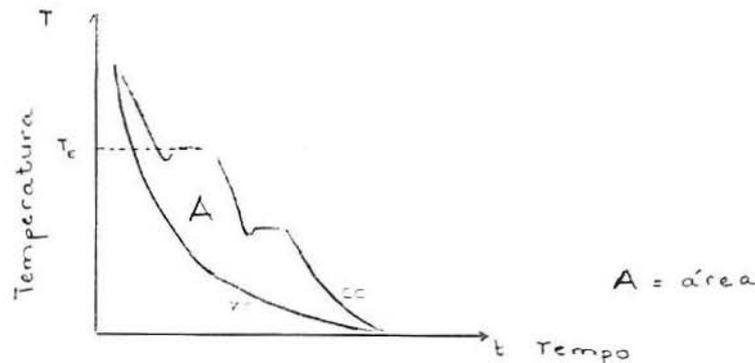


fig.2.7 A área entre a curva de resfriamento de um metal e a sua respectiva curva zero representa o calor latente de fusão do metal

Caso a curva zero seja conhecida, o calor latente pode ser obtido por integração numérica da equação (2.8). A integração da equação (2.5) indica que a temperatura varia exponencialmente com o tempo. Portanto, a curva zero pode ser simulada não somente escolhendo-se dois pontos na curva de resfriamento, como também através de suas derivadas, desprezando-se a mudança de fase.

Uma vez conhecido o calor latente de solidificação, a fração de sólido no tempo t pode

ser calculada, segundo Stefanescu [10], por:

$$f_s = \frac{L'_s}{L'}, \quad (2.9)$$

onde L' é dado pela equação (2.8). Utilizando esta técnica, o termo \dot{Q} , na equação (2.2), pode ser calculado em cada espaço de tempo para uma dada curva de resfriamento correspondente a uma dada taxa de resfriamento.

Já que a taxa de resfriamento determina a temperatura num dado instante de tempo para cada localização no fundido, o termo fonte pode ser expresso por

$$\dot{Q}(x, t) = L \frac{\partial f_s}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial t}, t \right). \quad (2.10)$$

Fica claro, então, que valores experimentais para f_s devem ser determinados não somente como função de t , mas também como função de $\frac{\partial T}{\partial t}$ (que representa a taxa de resfriamento), permitindo o cálculo da evolução do calor em diferentes nós (pontos do sistema metal-molde). Deve-se mencionar ainda que as temperaturas em diferentes nós são distintas devido às diferentes taxas de resfriamento.

Caso $\frac{\partial f_s}{\partial t}$ seja determinado por experimentos para diferentes valores de $\frac{\partial T}{\partial t}$, \dot{Q} na equação (2.1) pode ser calculado via equação (2.10), ocorrendo, desta forma, o acoplamento do modelo de cinética de solidificação ao modelo de transferência de calor.

As curvas de fração de sólido em função do tempo podem ser também consideradas polinômios de segunda ordem. Conseqüentemente, para cada taxa de resfriamento, $\frac{\partial f_s}{\partial t}$ se torna $\frac{df_s}{dt}$ e pode ser expressa através de um polinômio de primeira ordem.

$$\frac{df_s}{dt} = at + b, \quad (2.11)$$

com a e b funções de $\frac{dT}{dt}$, e portanto, constantes para cada $\frac{dT}{dt}$ considerado.

Por interpolação de dados experimentais para várias curvas de resfriamento, tem-se que o coeficiente a representa uma variação linear e b , parabólica com relação a $\frac{dT}{dt}$. Então

uma equação final para a taxa de evolução da fração de sólido pode ser escrita, segundo Stefanescu [10], por:

$$\frac{df_s}{dt} = \left(a_0 \frac{dT}{dt} + b_0 \right) t + c_0 \left(\frac{dT}{dt} \right)^2 + d_0 \left(\frac{dT}{dt} \right) + e_0 \quad (2.12)$$

onde o valor das constantes a_0 , b_0 , c_0 , d_0 e e_0 é retirado de um conjunto de curvas experimentais correspondente a várias taxas de resfriamento. Desta forma, utiliza-se a equação (2.12) para calcular $\dot{Q}(x, t)$ via a equação (2.10) e, conseqüentemente, calcular a equação (2.1).

2.3.2 Cálculo da Fração de Sólido via Nucleação e Leis de Crescimento

Num dado instante t e numa dada posição x do fundido, a fração de sólido local média para uma liga eutética ou metal puro, solidificando com estrutura equiaxial, pode ser calculada, segundo Brophy[17], por:

$$f_s(x, t) = N(x, t) \frac{4}{3} \pi R^3(x, t) \quad (2.13)$$

onde $N(x, t)$ representa a densidade do grão e $R(x, t)$, o tamanho do grão.

A equação (2.13) é válida sob as seguintes hipóteses: a) os grãos têm forma esférica, b) essa forma é mantida durante todo o processo e, portanto, despreza a possibilidade dos grãos se aglutinarem e c) todos os grãos são formados a uma temperatura crítica de nucleação e crescem a partir dela.

Caso fosse considerada uma liga, cujos grãos não tivessem forma esférica, mas sim dendrítica, a equação (2.3) possuiria um termo adicional, $f_i(t)$, representando a fração interna de sólido, isto é, indicando a fração do grão realmente sólido.

A taxa de formação de fração de sólido é obtida através da diferenciação da equação

(2.13).

$$\frac{\partial f_s}{\partial t}(x, t) = 4\pi N(x, t)R^2(x, t)\frac{\partial R}{\partial t}(x, t) + \frac{4}{3}\pi R^3(x, t)\frac{\partial N}{\partial t}(x, t). \quad (2.14)$$

Pela aproximação de Johnson-Mehl, a área da interface entre grãos sólidos e metal líquido é dada por $(1 - f_s)$ e pelo fato da densidade dos grãos não variar $(\frac{\partial N}{\partial t}(x, t) = 0)$, a equação (2.14) se torna

$$\frac{\partial f_s}{\partial t}(x, t) = 4\pi N(x, t)R^2(x, t)\frac{\partial R}{\partial t}(x, t)(1 - f_s). \quad (2.15)$$

Resolvendo a equação diferencial ordinária (2.15), tem-se

$$f_s = 1 - e^{-\frac{4}{3}\pi N(x, t)R^3(x, t)}. \quad (2.16)$$

A equação (2.16) tem a vantagem de levar em consideração a possibilidade de aglutinação dos grãos, o que não ocorre na formulação (2.13).

Para obter uma modelagem completa da fração de sólido, utilizam-se, então, as leis de crescimento e nucleação na determinação dos termos $N(x, t)$ e $R(x, t)$.

Crescimento de Grão

A questão do crescimento do grão tem sido abordada tanto para grãos equiaxiais (de forma esférica e compacto) quanto para dendritas equiaxiais (de forma esférica, porém poroso). Para o caso de crescimento equiaxial a taxa de crescimento pode ser calculada por

$$\frac{dR}{dt} = \mu_1(\Delta T)^2, \quad (2.17)$$

onde μ_1 é a constante de crescimento e ΔT é o super-resfriamento da interface, que pode ser aproximado pelo super-resfriamento do volume total do fundido quando consideradas baixas taxas de resfriamento.

No caso de dendritas, Esaka e Kurz deduziram uma relação similar na aproximação do número de Péclet, onde o quadrado do super-resfriamento também é relacionado com

a velocidade. É importante observar que existe um raio mínimo, chamado raio crítico, que as partículas devem atingir para se tornarem núcleos e não mais se dissolverem.

Nucleação

A análise da taxa de nucleação é bem mais complexa, a teoria clássica de nucleação heterogênea, embora ainda não tenha sido totalmente desenvolvida para todos os tipos de ligas, afirma que novos grãos sólidos se formam sobre substratos estranhos tais como a superfície do molde ou partículas de impurezas. Alguns autores não utilizam suas formulações atuais para o cálculo de $\frac{dN}{dt}$. Como forma alternativa, utilizam as hipóteses de nucleação contínua ou nucleação instantânea.

A hipótese de nucleação contínua considera que esse processo se dá continuamente uma vez que a temperatura de nucleação é atingida. Esse método prevê nucleação durante o intervalo de solidificação até o início da recalcência .

Baseado em experimentos, Oldfield [13] obteve uma dependência parabólica do número de núcleos e o super-resfriamento

$$N = \mu_2(\Delta T)^2, \quad (2.18)$$

resultando a seguinte taxa de nucleação:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -2\mu_2(\Delta T)\frac{\partial T}{\partial t}, \quad (2.19)$$

dependendo do super-resfriamento e da taxa de resfriamento.

Outros pesquisadores assumem nucleação contínua entre a temperatura de equilíbrio, T_E , e a temperatura máxima de super-resfriamento.

Já na hipótese de nucleação instantânea, considera-se que todos os núcleos são formados ao mesmo tempo sob um certo super-resfriamento crítico, ou temperatura de nucleação, T_n .

Segundo Stefanescu [10], a equação que representa esse fato é dada por:

$$\frac{\partial N}{\partial T} = N_s \cdot \delta(T - T_n), \quad (2.20)$$

onde

$$\delta(T - T_n) = \begin{cases} 0, & T \neq T_n \\ \infty, & T = T_n \end{cases},$$

e

$$N_s = \int_{-\infty}^{+\infty} N(T) \cdot \delta(T - T_n) dT,$$

indicando o número total de núcleos após a temperatura de nucleação.

2.4 Hipóteses Simplificativas desta Modelagem

O modelo apresentado por Kanetkar [11], que será resolvido analiticamente nos próximos capítulos, também é dado sob forma de macro-micro modelagem, isto é, permanecendo válida a equação (2.1).

Quanto aos aspectos microscópicos, assume-se que:

1. a taxa na qual a mistura está solidificando depende do grau do super-resfriamento na interface sólido-líquido.
2. o termo fonte na equação (2.1) descreve a evolução de calor latente por unidade de volume resultante da mudança de fase e sua formulação permanece dada pela equação (2.2).
3. a nucleação é instantânea e, portanto, existe uma única temperatura de nucleação, pois através da análise da taxa de nucleação observa-se que a nucleação se dá numa faixa muito pequena de variação de temperatura.
4. o crescimento do núcleo é equiaxial como grãos esféricos. Por isso a fração de sólido em qualquer localização do metal líquido durante a solidificação deve ser

representada por uma equação do tipo Avrami, como a equação (2.13), dada anteriormente.

5. a densidade, ρ , o calor específico, C_p , e a condutividade térmica, k , são considerados constantes na equação (2.3)
6. o raio de um grão eutético é descrito pela lei de crescimento parabólico, dada pela seguinte equação:

$$\int_{r=r_0}^{r=R} dt = \int_{t=0}^{t=t} \mu [T_E - T_B]^2 dt,$$

onde μ : constante de crescimento

r_0 : raio crítico do núcleo

T_E : temperatura eutética

T_B : temperatura de *bulk*.

Quanto aos aspectos macroscópicos:

1. não são consideradas as perdas de calor enquanto o metal é vazado no molde.
2. desprezam-se os gradientes térmicos existentes na fase líquida e, conseqüentemente, a convecção natural que influenciaria na taxa de transferência de calor e na composição química resultante.
3. despreza-se o fato da forma da interface sólido-líquido no metal ser variável com o tempo e poder possuir geometria complexa.
4. despreza-se a contração do metal durante a solidificação e, portanto, não se considera a resistência térmica adicional devido à existência de ar entre o metal solidificado e o molde, porque esta ainda não foi equacionada de forma satisfatória. (Sully, 1976; Pehlke, 1976; Ho e Pehlke, 1984; Zeng e Pehlke, 1985 e Huang *et al.* 1992)
5. as fronteiras do problema são todas consideradas fixas.

Capítulo 3

Inversão da Transformada de Laplace

Neste capítulo serão apresentados um método analítico, via teorema de Resíduos, e alguns métodos numéricos para inversão da transformada de Laplace, já que nos capítulos seguintes as equações serão resolvidas por transformada de Laplace.

3.1 Definição

A transformada de Laplace de uma função real, definida para t positivo, seccionalmente contínua para todo intervalo finito $0 \leq t \leq N$ e de ordem exponencial γ para $t > N$, é dada por:

$$f(s) = \mathcal{L}(F(t)) = \int_0^{\infty} e^{-st} F(t) dt, \quad \text{Re}(s) > \gamma \quad (3.1)$$

e sua transformada inversa é dada por:

$$F(t) = \mathcal{L}^{-1}(f(s)) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi i} \int_{\varpi - i\infty}^{\varpi + i\infty} e^{st} f(s) ds, & t > 0 \\ 0, & t < 0 \end{cases}, \quad (3.2)$$

onde $s = x + iy$, $x, y \in \Re$ e $s = \varpi$ fica à direita de todas as singularidades de $f(s)$.

3.2 Inversão via Teorema de Resíduos

Considera-se a integral em (3.2),

$$\frac{1}{2\pi i} \int_C e^{st} f(s) ds$$

integrada sob a curva fechada C , como mostra a *figura 3.1*.

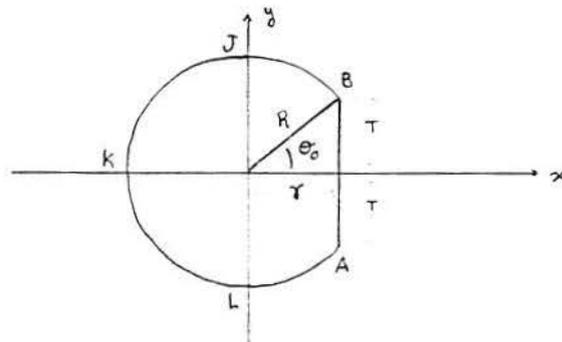


fig. 3.1

Esta curva é composta pela linha AB e pelo arco BJKLA do círculo de raio R e com centro na origem. Representando-se BJKLA por Γ e $T = \sqrt{R^2 - \varpi^2}$, tem-se:

$$F(t) = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{\varpi - iT}^{\varpi + iT} e^{st} f(s) ds = \lim_{R \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_C e^{st} f(s) ds - \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{st} f(s) ds \right\}$$

Supõem-se que todas as discontinuidades de $f(s)$ são pólos e que todos encontram-se à esquerda da linha $s = \varpi$ para alguma constante ϖ , e ainda que a integral sobre Γ tende a zero ao R tender a infinito, então, pelo teorema de Resíduos [18], tem-se :

$$F(t) = \sum_{j=1} k_j ,$$

onde k_j são os resíduos de $e^{st} f(s)$ nos pólos de $f(s)$.

No caso em que $f(s)$ possua outro tipo de discontinuidade ou raízes, basta alterar a curva C , e o teorema continua sendo aplicável.

É conveniente observar que a dificuldade de aplicação deste método para o cálculo da transformada inversa de uma função reside na determinação da localização e na natureza das singularidades.

Caso a função seja analítica ou seccionalmente analítica, pode-se determinar seus zeros através do método de Burniston e Siewert (1971) ou através de uma generalização desse método, apresentada por Anastasselou e Ioakimidis (1984).

A idéia de Anastasselou e Ioakimidis [19] é aproximar a função por um polinômio que coincida com a função exatamente nos seus zeros. Para polinômios de grau menor ou igual a quatro, tem-se uma forma fechada para a obtenção das raízes, caso contrário, retorna-se ao mesmo problema.

Como forma alternativa para a inversão da transformada de Laplace, existem vários métodos numéricos, alguns deles são discutidos a seguir.

3.3 Inversão via Métodos Numéricos

Quando se inverte numericamente a transformada de Laplace de uma função, enfrenta-se a questão da instabilidade numérica, isto é, pequenas perturbações nos dados de entrada geram grandes flutuações nos dados de saída.

A inversão da transformada de Laplace é, portanto, um exemplo do chamado "problema mal-posto", por esta razão não existe nenhum algoritmo universal capaz de inverter qualquer função transformada [20].

A seguir será apresentado um resumo das principais classes de métodos de inversão, bem como suas idéias centrais. Para uma análise mais detalhada do desempenho de cada método, segundo critérios de aplicabilidade em problemas reais, aplicabilidade para vários tipos de funções, precisão numérica, eficiência computacional e facilidade de programação e implementação, vide o trabalho de Davies e Martin [21].

3.3.1 Métodos que utilizam seqüências

Um algoritmo de inversão da transformada de Laplace pode ser obtido através da construção de uma seqüência

$$I_n(t) = \int_0^\infty \delta_n(t, u) F(u) du ,$$

onde as funções $\delta_n(t, u)$ formam uma seqüência convergente (Gelfand e Shilov, 1964, pag 34), o que significa que $I_n(t)$ tende a $F(t)$ ao n tender a infinito. Usando as funções $(nu/t)^n \exp(-nu/t)/(n-1)!$, tem-se

$$F(t) \approx I_n(t) = (-1)^n n^{n+1} (n!) t^{-(n+1)} f^{(n)}\left(\frac{n}{t}\right) , \quad (3.3)$$

onde $f^{(n)}(s)$ é a derivada n -ésima de $f(s)$ com respeito ao parâmetro s . Esta fórmula foi obtida por Widder (1934), embora não no intuito de inverter a transformada de Laplace numericamente. Uma desvantagem deste método é a necessidade de derivar $f(s)$ repetidamente.

Uma fórmula diferente de (3.3), mas obtida de maneira similar (vide Cost, 1964) foi proposta por Haar (1951):

$$F(t) \approx t^{-1} f(t^{-1}) . \quad (3.4)$$

Uma outra variante é devida a Schapery (1962):

$$F(t) \approx (2t)^{-1} f((2t)^{-1}) . \quad (3.5)$$

Gaver (1966) propôs o uso de funções

$$\delta_n(t, u) = (2n)!(n!(n-1)!)^{-1} a(1 - e^{-au})^n e^{-nau} ,$$

onde $a = \frac{\ln 2}{t}$, que leva a um resultado similar ao apresentado em (3.3), mas envolvendo a n -ésima diferença finita $\Delta^n f(n \ln \frac{2}{t})$. A fórmula, como é apresentada, não é conve-

niente, pelo fato da convergência de $I_n(t)$ a $F(t)$ ser bastante lenta, segundo resultados apresentados por Davies e Martin [21]. No entanto, Gaver mostrou que $I_n(t) - F(t)$ pode ser expressa em termos de expansões assintóticas em potências inversas de n ; conseqüentemente, o resultado deve ser melhorado utilizando extrapolação. A fórmula de Stehfest (1970) dá o seguinte algoritmo

$$F(t) \approx \ln \frac{2}{t} \sum_{n=1}^N k_n f\left(n \ln \frac{2}{t}\right), \quad (3.6)$$

com

$$k_n = (-1)^{n+\frac{N}{2}} \sum_{k=\frac{n+1}{2}}^{\min(n, \frac{N}{2})} \frac{k^{\frac{N}{2}} (2k)!}{\left(\frac{N}{2} - k\right)! k! (k-1)! (n-k)! (2k-n)!}$$

e N par.

3.3.2 Métodos que expandem $F(t)$ em funções exponenciais

Vários métodos representam $F(t)$ por funções exponenciais, geralmente introduzindo e^{-rt} com uma nova variável independente. Bateman (1936), Erdélyi (1956) e Lanczos (1957) propuseram funções de Legendre, escrevendo

$$F(t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n P_{2n}(e^{-rt}), \quad (3.7)$$

onde os polinômios de Legendre são calculados pela seguinte relação:

$$P_0(x) = 1,$$

$$P_1(x) = x,$$

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x).$$

Aplicando a transformada de Laplace à expressão (3.7) e substituindo s por $(2k+1)r$, $k = 0, 1, 2, \dots, N$, obtém-se

$$rf((2k+1)r) = \sum_{m=0}^k \frac{(k-m+1)_m}{2(k+\frac{1}{2})_{m+1}} a_m, \quad (3.8)$$

sendo que esta equação deve ser resolvida recursivamente para os coeficientes a_m (Papoulis, 1956).

Miller e Guy (1966) aproximaram $F(t)$ por polinômios de Jacobi, $P_m^{(\alpha, \beta)}$,

$$F(t) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m P_m^{(0, \beta)}(2e^{-rt} - 1), \quad (3.9)$$

com $\alpha = 0$. Aplicando a transformada de Laplace a (3.9) e substituindo s por $(\beta+k+1)r$, foi obtido

$$rf((\beta+k+1)r) = \sum_{m=0}^k \frac{(k-m+1)_m}{(k+\beta+1)_{m+1}} a_m,$$

que deve ser resolvido para os coeficientes a_m .

Berger (1968) também propôs o uso de polinômios de Jacobi bem como polinômios ultra-esféricos (Berger, 1966; Berger e Duangudom, 1973).

Bellman *et al.* (1966) idealizaram um método que provém das regras de quadratura Gauss-Legendre aplicada à definição de $f(s)$. No entanto, este método deve ser considerado como um caso particular do método de Legendre, considerando $k = 0$ e $t_i = -r^{-1} \ln((1+x_i)/2)$, $i = 1, 2, \dots, N$, onde x_i são os zeros dos polinômios $P_N(x)$. O resultado é:

$$F(t_i) = \sum_{k=1}^N w_{ik} r f(kr), \quad (3.10)$$

onde os coeficientes w_{ik} são definidos por:

$$\sum_{k=1}^N w_{ik} x^k = \frac{P_N(\frac{1+x}{2})}{x-x_i} \left(\int_0^1 \frac{P_N(\frac{1+x}{2})}{x-x_i} dx \right)^{-1}, \quad (3.11)$$

Uma grande desvantagem deste método, segundo Davies e Martin [21] é que ele dá os

valores de $F(t)$ apenas para um conjunto restrito de pontos não equidistantes. Tabelas dos coeficientes w_{ik} devem ser encontradas em Bellman *et al.* (1966). Uma extensão deste método foi apresentada por Piessens (1969).

Outro grupo de métodos depende de transformações do tipo $\cos \theta = e^{-rt}$, seguido de uma expansão em funções trigonométricas. Papoulis (1956) escreve

$$F(t) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \sin((2k+1)\theta), \quad (3.12)$$

onde $\cos \theta = e^{-rt}$. Aplicando a transformada de Laplace com $s = (2k+1)$, $k = 0, 1, \dots, N$, tem-se:

$$rf((2k+1)r) = \pi 2^{-2(n+1)} \sum_{m=0}^k \left[\binom{2k}{k-m} - \binom{2k}{k-m-1} \right] a_m. \quad (3.13)$$

Outros esquemas foram propostos usando séries de Fourier (Doetsch, 1971; Lanczos, 1957) ou usando expansões em polinômios de Chebyshev (Lanczos, 1957).

Para certos problemas, Schapery (1962; vide Cost (1964) e Rizzo e Shippy (1970)) propôs a expansão

$$F(t) = A + B + \sum_{k=1}^N a_k e^{-b_k t}, \quad (3.14)$$

onde os pesos b_k são escolhidos para se ajustarem à forma esperada da função $F(t)$. A transformada de Laplace de (3.14),

$$sf(s) = A + \frac{B}{s} + \sum_{k=1}^N a_k \left(1 - \frac{b_k}{s}\right)^{-1}, \quad (3.15)$$

e estas equações são resolvidas para a_k , substituindo $s = b_k$, $k = 1, \dots, N$ e ainda utilizando as seguintes igualdades:

$$B = \lim_{s \rightarrow 0} s^2 f(s),$$

$$A = - \sum_{k=1}^N a_k.$$

3.3.3 Método de Quadratura de Gauss

O método de quadratura de Gauss é muito empregado na aproximação de integrais, baseado no fato das equações serem exatas para polinômios. Tais equações foram desenvolvidas para a integral de inversão, com o propósito de inverter exatamente transformadas de Laplace de funções do tipo $s^{-p}\Phi(s^{-1})$, onde $\Phi(s^{-1})$ é um polinômio em s^{-1} (Salzer, 1955, 1958, 1961; Shirliffe e Stephenson, 1960; Piessens, 1969, 1971). Para colocar as equações na forma invariante, é necessário escrever a integral de inversão (3.2) como

$$F(t) = \frac{1}{2\pi it} \int_{\gamma'-i\infty}^{\gamma'+i\infty} e^z f\left(\frac{z}{t}\right) dz, \quad t > 0 \quad (3.16)$$

onde $\gamma = \gamma'$. A aproximação consiste em escrever

$$F(t) = \sum_{i=1}^N \frac{K_i}{t} f\left(\frac{a_i}{t}\right), \quad (3.17)$$

e escolher os coeficientes para tornar a expressão exata sempre que $s^{p+1}f(s)$ é um polinômio em s^{-1} de grau menor ou igual a $2N - 1$. Assim, se $s^{p+1}f(s)$ tiver uma expansão em série de Taylor em potências de s^{-1} , o método recai na expansão em série de Taylor para $F(t)$. Uma série de tabelas para pesos K_i e nodos a_i são dadas por Piessens (1971) e um programa para cálculo dos pesos e nodos foi apresentado também por Piessens (1973). Para $p = 0$, um método mais geral foi apresentado por Singhal e Vlach (1975). Eles aproximaram a integral de inversão (3.16) através da troca da função exponencial por sua aproximação de Padé (Longman, 1975).

$$\xi_{M,N}(z) = \frac{\sum_{k=1}^M (M+N+1-k)! \binom{M}{k} z^k}{\sum_{k=1}^N (M+N+1-k)! \binom{N}{k} (-z)^k}, \quad (3.18)$$

com $M < N$, e fechando o contorno da integral de inversão na parte direita do plano aplicando a teoria de Resíduos. E, já que os primeiros $M + N + 1$ termos da série de Taylor para $\xi_{M,N}$ são idênticos aos de e^z , fica então comprovado que este método é exato para $f(s) = s^{-k}$, $k = 1, 2, \dots, M + N + 1$. Assim, utilizando $M = N - 1$, reconstrói-se o

método para $p = 0$.

Uma vantagem para esse método mais geral está no fato de que, para $M < N - 1$, a inversão numérica de s^k , $k = 0, 1, \dots, N - M - 2$, é identicamente zero. Com isso, escolhendo-se $M \leq N - k - 1$, tem-se a seguinte aproximação para a k -ésima derivada:

$$F^{(k)}(t) = \sum_{i=1}^N \frac{K_i}{t} \left(\frac{a_i}{t}\right)^k f\left(\frac{a_i}{t}\right). \quad (3.19)$$

Isto funciona porque a transformada de Laplace de $F^{(k)}(t)$ difere de $s^k f(s)$ apenas por um polinômio de grau $k - 1$ em s , e esses termos não fazem nenhuma contribuição para o resultado quando $M \leq N - k - 1$.

3.3.4 Métodos que usam Aproximações Bilineares para s

Uma importante classe de aplicações surge com a expansão da função original $F(t)$ em uma série de funções generalizadas de Laguerre. Contribuições nesta linha foram dadas por Tricomi (1935) e Widder (1935). Seja

$$F(t) \approx t^\alpha e^{-ct} \sum_{k=0}^N a_k \frac{k!}{(\alpha + k)!} L_k^\alpha\left(\frac{t}{T}\right), \quad (3.20)$$

onde α , c e T são parâmetros. Os polinômios de Laguerre devem ser calculados pelas relações de recorrência

$$L_0^\alpha(t) = 1,$$

$$L_1^\alpha(t) = 1 + \alpha - t,$$

$$nL_n^\alpha(t) = (2n + \alpha - 1 - t)L_{n-1}^\alpha(t) - (n - 1 + \alpha)L_{n-2}^\alpha(t),$$

e os coeficientes a_k como segue. Primeiro observa-se que a transformada de Laplace de (3.20) é dada por:

$$f(s) \approx \sum_{k=0}^N a_k (s + c - 1)^k (s + c)^{-(k+\alpha+1)},$$

e que a transformação bilinear $z = \frac{(s+c-1)}{(s+c)}$ transforma em

$$\Phi(z) = (s+c)^{\alpha+1} f(s) \approx \sum_{k=0}^N a_k z^k.$$

O coeficiente a_k deve ser determinado utilizando $z = e^{i\theta}$ e fórmulas para interpolação trigonométrica. Weeks (1966) assumiu que $\alpha = 0$ e $c = c_0 + \frac{1}{2T}$; Piessens e Branders (1971) consideraram que $f(s)$ tem a forma assintótica $s^{-\alpha-1}$ para s grande, da qual α é determinado. Em todos os casos, as fórmulas para os coeficientes a_k são:

$$a_0 = (N+1)^{-1} \sum_{j=0}^N h(\theta_j),$$

$$a_k = 2(N+1)^{-1} \sum_{j=0}^N h(\theta_j) \cos(k\theta_j),$$

$$\theta_j = \frac{2j+1}{N+1} \frac{\pi}{2},$$

$$h(\theta_j) = \operatorname{Re} \left[\left(\frac{1 + \cos(\frac{\theta}{2})}{2T} \right)^{\alpha+1} f \left(\left(2t + c + \frac{i \cos(\frac{\theta}{2})}{2T} \right)^{-1} \right) \right].$$

Polinômios de Laguerre têm a vantagem de possuir sua transformada de Laplace diretamente conectada com uma transformação bilinear. No entanto, existem outras expansões possíveis que se aplicam a funções $\Phi(z)$. Piessens (1972) propôs polinômios de Jacobi, mas na prática restringiu sua atenção ao caso especial de polinômios de Chebyshev. Assim a aproximação básica é

$$f(s) \approx s^{-\alpha-1} \sum_{n=0}^N a_n T_n(1 - bs^{-1}).$$

Invertendo a série termo por termo, encontra-se que a correspondente aproximação para $F(t)$ é dada por:

$$F(t) \approx t^\alpha (\alpha!)^{-1} \sum_{n=0}^N a_n \Phi_n\left(\frac{bt}{2}\right), \quad (3.21)$$

onde Φ_k é um polinômio de grau k . Os três primeiros desses polinômios são dados por:

$$\Phi_0(x) = 1, \quad (3.22)$$

$$\Phi_1(x) = 1 - 2x(\alpha + 1)^{-1}, \quad (3.23)$$

$$\Phi_2(x) = 1 - 8x(\alpha + 1)^{-1} + 8x^2(\alpha + 1)^{-1}(\alpha + 2)^{-1}. \quad (3.24)$$

Para $n > 2$, as relações de recorrência para $\Phi_n(x)$ são:

$$- \Phi_n(x) = (A + Bx)\Phi_{n-1}(x) + (C + Dx)\Phi_{n-2}(x) + E\Phi_{n-3}(x), \quad (3.25)$$

onde

$$A = 2n + (n - 1)(2n - 3)(\alpha + n - 1)(n - 2)^{-1}(\alpha + n)^{-1},$$

$$B = 4(n + \alpha)^{-1},$$

$$C = 1 + A + E,$$

$$D = 4(n - 1)(n - 2)^{-1}(n + \alpha)^{-1},$$

$$E = (n - 1)(\alpha - n + 1)(n - 2)^{-1}(\alpha + n)^{-1}.$$

Os coeficientes a_n nas expansões devem ser expressos como uma soma finita através de técnicas usuais. O resultado é :

$$a_0 = (N + 1)^{-1} \sum_{n=0}^N \Phi_n \left[\cos \left(\left(\frac{2n+2}{N+1} \right) \frac{\pi}{2} \right) \right], \quad (3.26)$$

$$a_k = 2(N + 1)^{-1} \sum_{n=0}^N \Phi_n \left[\cos \left(\left(\frac{2n+2}{N+1} \right) \frac{\pi}{2} \right) \right] \cos \left(\left(\frac{2n+2}{N+1} \right) \frac{k\pi}{2} \right), \quad (3.27)$$

$$\Phi(u) = \left(\frac{b}{1-u} \right)^{\alpha+1} f \left(\frac{b}{1-u} \right). \quad (3.28)$$

3.3.5 Representação por Série de Fourier

Em muitos casos $F(t)$ é uma função real, e então pode-se expressar as partes real e imaginária de sua transformada de Laplace como segue:

$$\operatorname{Re}(f(s)) = \operatorname{Re}(f(x + iy)) = \int_0^{\infty} e^{-xt} F(t) \cos(yt) dt ,$$

$$\operatorname{Im}(f(s)) = \operatorname{Im}(f(x + iy)) = - \int_0^{\infty} e^{-xt} F(t) \sin(yt) dt ,$$

e conseqüentemente

$$f(s) = \operatorname{Re}(f(s)) + i\operatorname{Im}(f(s)) . \quad (3.29)$$

Da mesma forma, pode-se expandir a integral de inversão (3.2)

$$F(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{xt} (\cos yt + i \sin yt) (\operatorname{Re}(f(s)) + i\operatorname{Im}(f(s))) idy$$

onde $ds = idy$.

$$F(t) = \frac{e^{xt}}{2\pi i} \left[\int_{-\infty}^{\infty} (\operatorname{Re}(f(s)) \cos yt - \operatorname{Im}(f(s)) \sin yt) dy + i \int_{-\infty}^{\infty} (\operatorname{Im}(f(s)) \cos yt + \operatorname{Re}(f(s)) \sin yt) dy \right] \quad (3.30)$$

Devido a diferença de paridade das funções $\operatorname{Im}(f(s))$, $\cos yt$, $\operatorname{Re}(f(s))$ e $\sin yt$, a parte imaginária de (3.30) é nula. . Ainda pela paridade das funções, escreve-se:

$$F(t) = \frac{e^{xt}}{\pi i} \left[\int_0^{\infty} (\operatorname{Re}(f(s)) \cos yt - \operatorname{Im}(f(s)) \sin yt) dy \right] , \quad t > 0 \quad (3.31)$$

e para $t < 0$, $F(t) = 0$, o que significa que

$$\int_0^{\infty} (\operatorname{Re}(f(s)) \cos yt - \operatorname{Im}(f(s)) \sin yt) dy = 0.$$

Como consequência, obtêm-se as seguintes relações para a transformada de Laplace inversa $F(t)$ correspondente à função transformada $f(s)$:

$$F(t) = \frac{2e^{xt}}{\pi i} \int_0^{\infty} \operatorname{Re}(f(s)) \cos ytdy \quad (3.32)$$

$$F(t) = -\frac{2e^{xt}}{\pi i} \int_0^{\infty} \operatorname{Im}(f(s)) \sin ytdy \quad (3.33)$$

$$F(t) = \frac{e^{xt}}{\pi i} \int_0^{\infty} (\operatorname{Re}(f(s)) \cos yt - \operatorname{Im}(f(s)) \sin yt) dy \quad (3.34)$$

Dubner e Abate (1968), aplicando a regra do trapézio em (3.32), obtiveram a seguinte série de Fourier:

$$F(t) \approx \frac{2e^{xt}}{T} \sum_{k=0}^{\infty} ' \operatorname{Re}(f(x + \frac{i\pi k}{T})) \cos \frac{\pi kt}{T}, \quad (3.35)$$

onde T é um parâmetro e o sinal "linha" no somatório significa que o termo referente a $k = 0$ foi multiplicado por um meio. Dubner e Abate obtiveram esta fórmula, considerando que a função $F(t)$ possui expansão em série de Fourier-cosseno para $0 \leq t < T$, e mostraram que o erro poderia ser feito pequeno para $0 \leq t < \frac{T}{2}$, escolhendo xT suficientemente grande.

Não há nenhum motivo teórico para utilizar apenas a parte real de $f(s)$, como em (3.35); Silverberg (1970) e Durbin (1974) propuseram a aplicação da regra do trapézio diretamente à expressão (3.34). A aproximação resultante é dada por :

$$F(t) \approx \frac{e^{xt}}{T} \sum_{k=0}^{\infty} ' \left[\operatorname{Re}(f(x + \frac{i\pi k}{T})) \cos \frac{\pi kt}{T} - \operatorname{Im}(f(x + \frac{i\pi k}{T})) \sin \frac{\pi kt}{T} \right], \quad (3.36)$$

Em ambos os casos, o erro é essencialmente limitado por $e^{(\varpi-x)T}$, tornando-se grande quando t se aproxima de $\frac{T}{2}$ em (3.35) e quando t se aproxima de T em (3.36). No entanto, Durbin [24] conseguiu uma expressão para o erro que independe de t e conseqüentemente, as séries trigonométricas obtidas para $F(t)$ em termos de $f(s)$ são válidas para todo período $2T$ das séries.

Ambos os métodos acima envolvem somas infinitas que, na realidade, são truncadas

após N termos. Várias alternativas foram sugeridas no intuito de melhorar a eficiência do método, uma delas é utilizar as técnicas de transformada rápida de Fourier (Cooley e Tukey 1965; Cooley *et al.*, 1970). Já Crump (1976) sugeriu a utilização de técnicas para acelerar a convergência, como o ϵ -algoritmo (MacDonald, 1964). O algoritmo é essencialmente:

$$\epsilon_{p+1}^{(m)} = \epsilon_{p-1}^{(m+1)} + (\epsilon_p^{(m+1)} - \epsilon_p^{(m)})^{-1}, \quad (3.37)$$

onde $\epsilon_{-1}^{(m)} = 0$ e $\epsilon_0^{(m)}$ é a m -ésima soma parcial de (3.35) ou (3.36) .

Capítulo 4

Modelo Unidimensional

Modela-se o problema unidimensional de solidificação de uma liga eutética ou um metal puro em um molde cilíndrico, considerando-se que o calor é dissipado por condução e convecção apenas na direção radial. Como a transferência de calor se dá tanto no metal fundido quanto no molde, necessita-se de duas equações acopladas, uma para cada meio.

4.1 Formulação

A equação que representa a transferência de calor no metal é :

$$\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial}{\partial t} T_1 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} T_1 + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} T_1 + \frac{\dot{Q}}{k_1} \quad , \quad \begin{array}{l} 0 < r < a \\ t > 0 \end{array} \quad (4.1)$$

E a equação para o molde é dada por:

$$\frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial}{\partial t} T_2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} T_2 + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} T_2 \quad , \quad \begin{array}{l} a < r < R \\ t > 0 \end{array} \quad (4.2)$$

As condições de contorno associadas ao modelo unidimensional são:

1. Interface Metal Líquido - Molde:

$$T_1(r, t) = T_2(r, t) \quad , \quad r = a ; \quad (4.3)$$

2. Continuidade do Fluxo de Calor Metal Líquido - Molde:

$$k_1 \frac{\partial}{\partial r} T_1(r, t) = k_2 \frac{\partial}{\partial r} T_2(r, t) \quad , \quad r = a \quad (4.4)$$

onde se considera contato perfeito entre o metal líquido e a parede do molde, desprezando-se o efeito da resistência térmica nesta interface.

3. Temperatura Máxima no centro do cilindro:

$$\frac{\partial}{\partial r} T_1(r, t) = 0 \quad , \quad r = 0 \quad (4.5)$$

4. Fluxo de Calor Convectivo na Interface Lateral Molde - Ar:

$$k_2 \frac{\partial}{\partial r} T_2(r, t) = h_c (T_{amb} - T_2(r, t)) \quad , \quad r = R \quad (4.6)$$

A Condição Inicial é dada por:

$$T_1(r, t) = T_{10} \quad , \quad t = 0 \quad (4.7)$$

$$T_2(r, t) = T_{20} \quad , \quad t = 0 \quad (4.8)$$

4.2 Solução Analítica

A solução das equações (4.1) e (4.2) é dividida em duas etapas: a primeira, analítica e a segunda, numérica.

Na primeira etapa, as equações são resolvidas simultaneamente como propõe Kanetkar [11]. Kanetkar utilizou um *software* baseado no método de diferenças finitas implícito e axisimétrico.

A diferença com relação ao trabalho de Kanetkar está em aplicar às equações (4.1) e (4.2) a transformada de Laplace na variável t .

Aplicando a transformada de Laplace na variável t nestas equações, tem-se:

$$\frac{1}{\alpha_1} (s\bar{T}_1 - T_1(r, 0)) = \frac{d^2}{dr^2} \bar{T}_1 + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \bar{T}_1 + \frac{\bar{Q}}{k_1}, \quad \begin{array}{l} 0 < r < a \\ t > 0 \end{array} \quad (4.9)$$

e

$$\frac{1}{\alpha_2} (s\bar{T}_2 - T_2(r, 0)) = \frac{d^2}{dr^2} \bar{T}_2 + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \bar{T}_2, \quad \begin{array}{l} a < r < R \\ t > 0 \end{array}, \quad (4.10)$$

onde o símbolo (barra) indica esta transformação. Também aplica-se a transformada de Laplace às condições de contorno:

$$\bar{T}_1(r, s) = \bar{T}_2(r, s), \quad r = a, \quad (4.11)$$

$$k_1 \frac{d}{dr} \bar{T}_1(r, s) = k_2 \frac{d}{dr} \bar{T}_2(r, s), \quad r = a, \quad (4.12)$$

$$\frac{d}{dr} \bar{T}_1(r, s) = 0, \quad r = 0, \quad (4.13)$$

$$k_2 \frac{d}{dr} \bar{T}_2(r, s) = h_c \left(\frac{T_{amb}}{s} - \bar{T}_2(r, s) \right), \quad r = R, \quad (4.14)$$

sendo que s é o parâmetro introduzido pela transformação.

Usando a condição inicial (4.7) para o metal líquido e (4.8) para o molde nas equações (4.9) e (4.10), obtém-se a seguinte simplificação :

$$\frac{1}{\alpha_1} (s\bar{T}_1 - T_{10}) = \frac{d^2}{dr^2} \bar{T}_1 + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \bar{T}_1 + \frac{\bar{Q}}{k_1}, \quad \begin{array}{l} 0 < r < a \\ t > 0 \end{array} \quad (4.15)$$

e

$$\frac{1}{\alpha_2} (s\bar{T}_2 - T_{20}) = \frac{d^2}{dr^2} \bar{T}_2 + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \bar{T}_2, \quad \begin{array}{l} a < r < R \\ t > 0 \end{array}. \quad (4.16)$$

As condições de contorno permanecem inalteradas.

Rearranjando os termos das equações (4.15) e (4.16), tem-se:

$$\frac{d^2}{dr^2}\overline{T}_1 + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\overline{T}_1 - \frac{s}{\alpha_1}\overline{T}_1 + \frac{\overline{Q}}{k_1} + \frac{T_{10}}{\alpha_1} = 0, \quad \begin{array}{l} 0 < r < a \\ t > 0 \end{array} \quad (4.17)$$

e

$$\frac{d^2}{dr^2}\overline{T}_2 + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\overline{T}_2 - \frac{s}{\alpha_2}\overline{T}_2 + \frac{T_{20}}{\alpha_2} = 0, \quad \begin{array}{l} a < r < R \\ t > 0 \end{array} \quad (4.18)$$

Observa-se que as equações (4.17) e (4.18) são equações de Bessel Modificadas não homogêneas, cujas soluções são dadas em termos das funções I_0 , K_0 e mais uma solução particular que depende dos termos não homogêneos. Sendo assim, busca-se soluções da seguinte forma:

$$\overline{T}_1 = \overline{T}_{1H} + \overline{T}_{1P} \quad (4.19)$$

e

$$\overline{T}_2 = \overline{T}_{2H} + \overline{T}_{2P}, \quad (4.20)$$

onde

$$\overline{T}_{1H} = AI_0 + BK_0 \quad (4.21)$$

e

$$\overline{T}_{2H} = CI_0 + DK_0. \quad (4.22)$$

4.2.1 Determinação de uma Solução Particular

Para determinar-se uma solução particular, substituem-se as expressões (4.19) e (4.20) nas equações (4.17) e (4.18), obtendo -se :

$$\frac{d^2}{dr^2}(\overline{T}_{1H} + \overline{T}_{1P}) + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}(\overline{T}_{1H} + \overline{T}_{1P}) - \frac{s}{\alpha_1}(\overline{T}_{1H} + \overline{T}_{1P}) + \frac{\overline{Q}}{k_1} + \frac{T_{10}}{\alpha_1} = 0 \quad (4.23)$$

e

$$\frac{d^2}{dr^2}(\overline{T_{2H}} + \overline{T_{2P}}) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr}(\overline{T_{2H}} + \overline{T_{2P}}) - \frac{s}{\alpha_2}(\overline{T_{2H}} + \overline{T_{2P}}) + \frac{T_{20}}{\alpha_2} = 0 . \quad (4.24)$$

E, da mesma forma, substituem-se as expressões (4.19) e (4.20) nas condições de contorno (4.11), (4.12), (4.13) e (4.14), obtendo-se as seguintes equações:

$$(\overline{T_{1H}} + \overline{T_{1P}})(r, s) = (\overline{T_{2H}} + \overline{T_{2P}})(r, s) , \quad r = a , \quad (4.25)$$

$$k_1 \frac{d}{dr}(\overline{T_{1H}} + \overline{T_{1P}})(r, s) = k_2 \frac{d}{dr}(\overline{T_{2H}} + \overline{T_{2P}})(r, s) , \quad r = a , \quad (4.26)$$

$$\frac{d}{dr}(\overline{T_{1H}} + \overline{T_{1P}})(r, s) = 0 , \quad r = 0 , \quad (4.27)$$

e

$$k_2 \frac{d}{dr}(\overline{T_{2H}} + \overline{T_{2P}})(r, s) = h_c \left(\frac{T_{amb}}{s} - (\overline{T_{2H}} + \overline{T_{2P}})(r, s) \right) , \quad r = R . \quad (4.28)$$

Rearranjando-se os termos das equações (4.23) e (4.24) e considerando-se que $\overline{T_1}$ e $\overline{T_2}$ são soluções das equações homogêneas, obtêm-se:

$$\frac{d^2}{dr^2} \overline{T_{1P}} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \overline{T_{1P}} - \frac{s}{\alpha_1} \overline{T_{1P}} + \frac{\overline{Q}}{k_1} + \frac{T_{10}}{\alpha_1} = 0 , \quad (4.29)$$

e

$$\frac{d^2}{dr^2} \overline{T_{2P}} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \overline{T_{2P}} - \frac{s}{\alpha_2} \overline{T_{2P}} + \frac{T_{20}}{\alpha_2} = 0 . \quad (4.30)$$

Logo, como $\overline{T_{1P}}$ e $\overline{T_{2P}}$ são soluções particulares, devem satisfazer as equações não homogêneas (4.29) e (4.30). E, como os termos das partes não homogêneas são considerados constantes em relação à variável r , $\overline{T_{1P}}$ e $\overline{T_{2P}}$ são dadas por:

$$\overline{T_{1P}} = \frac{\alpha_1 \overline{Q}}{s k_1} + \frac{T_{10}}{s} \quad (4.31)$$

e

$$\overline{T_{2P}} = \frac{T_{20}}{s} . \quad (4.32)$$

4.2.2 Determinação da Solução Homogênea

Com a determinação das soluções particulares, retorna-se ao problema homogêneo com as condições de contorno devidamente corrigidas. Obtém-se, então, o seguinte sistema de equações:

$$\frac{d^2}{dr^2} \overline{T_{1H}} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \overline{T_{1H}} - \frac{s}{\alpha_1} \overline{T_{1H}} = 0, \quad (4.33)$$

e

$$\frac{d^2}{dr^2} \overline{T_{2H}} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \overline{T_{2H}} - \frac{s}{\alpha_2} \overline{T_{2H}} = 0. \quad (4.34)$$

Onde as condições de contorno são dadas por:

$$\overline{T_{1H}} = \overline{T_{2H}} - \frac{\alpha_1 \bar{Q}}{s k_1} - \frac{T_{10}}{s} + \frac{T_{20}}{s} , \quad r = a , \quad (4.35)$$

$$k_1 \frac{d}{dr} \overline{T_{1H}} = k_2 \frac{d}{dr} \overline{T_{2H}} , \quad r = a , \quad (4.36)$$

$$\frac{d}{dr} \overline{T_{1H}} = 0 , \quad r = 0 , \quad (4.37)$$

e

$$k_2 \frac{d}{dr} \overline{T_{2H}} = h_c \left(\frac{T_{amb}}{s} - (\overline{T_{2H}} + \frac{T_{20}}{s}) \right) , \quad r = R . \quad (4.38)$$

Como já foi observado, as equações (4.33) e (4.34) são equações de Bessel Modificadas de ordem zero, portanto têm como soluções expressões envolvendo as funções I_0 e K_0 , ou seja:

$$\overline{T_{1H}} = AI_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}} r) + BK_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}} r) \quad (4.39)$$

e

$$\overline{T_{2H}} = CI_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}} r) + DK_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}} r) . \quad (4.40)$$

Pela condição de contorno (4.37), tem-se que o termo B da equação (4.39) é igual

a zero, pois K_0 é ilimitada na origem. Sendo assim, obtém-se uma simplificação para a expressão de $\overline{T_{1H}}$.

Agora, para se determinar o valor das demais constantes, substituem-se as equações (4.39), já simplificada, e (4.40) nas condições de contorno (4.35), (4.36) e (4.38):

$$AI_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}}a) = CI_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}a) + DK_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}a) - \frac{\alpha_1 \overline{Q}}{s k_1} - \frac{T_{10}}{s} + \frac{T_{20}}{s} ,$$

$$k_1 \frac{d}{dr} (AI_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}}a)) = k_2 \frac{d}{dr} (CI_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}a) + DK_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}a))$$

e

$$k_2 \frac{d}{dr} (CI_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}R) + DK_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}R)) = h_c \left(\frac{T_{amb}}{s} - (CI_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}R) + DK_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}R) + \frac{T_{20}}{s}) \right) .$$

Reordenando-se os termos de cada uma das equações, e efetuando-se as possíveis simplificações, têm-se:

$$AI_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}}a) - CI_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}a) - DK_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}a) = \frac{(T_{20} - T_{10})}{s} - \frac{\alpha_1 \overline{Q}}{s k_1} , \quad (4.41)$$

$$Ak_1 \sqrt{\frac{s}{\alpha_1}} I_1(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}}a) - Ck_2 \sqrt{\frac{s}{\alpha_2}} I_1(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}a) - Dk_2 \sqrt{\frac{s}{\alpha_2}} K_1(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}a) = 0 , \quad (4.42)$$

e

$$C \left(k_2 \sqrt{\frac{s}{\alpha_2}} I_1(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}R) + h_c I_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}R) \right) + D \left(k_2 \sqrt{\frac{s}{\alpha_2}} K_1(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}R) + h_c K_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}R) \right) = \frac{h_c}{s} (T_{amb} - T_{20}) \quad (4.43)$$

Assim, pode-se escrever tais equações com a seguinte notação matricial:

$$MX = T, \quad (4.44)$$

onde

$$M = \begin{bmatrix} I_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}}a) & -I_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}a) & -K_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}a) \\ k_1\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}}I_1(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}}a) & -k_2\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}I_1(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}a) & -k_2\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}K_1(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}a) \\ 0 & k_2\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}I_1(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}R) + h_c I_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}R) & k_2\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}K_1(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}R) + h_c K_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}R) \end{bmatrix}$$

$$X = \begin{bmatrix} A \\ C \\ D \end{bmatrix}$$

e

$$T = \begin{bmatrix} \frac{(T_{20}-T_{10})}{s} - \frac{\alpha_1 \bar{Q}}{s k_1} \\ 0 \\ \frac{h_c}{s} (T_{amb} - T_{20}) \end{bmatrix}$$

Então, a partir da resolução de (4.44), obtêm-se os valores para os coeficientes A, C e D. Pode-se resolver analiticamente através do *software* REDUCE ou numericamente através de qualquer algoritmo para resolução de sistemas. No apêndice B será apresentado o algoritmo escrito em REDUCE para calcular a inversa de M e, portanto, para resolver o sistema (4.44). Os coeficientes obtidos através deste algoritmo são:

$$A(s) = \frac{\begin{bmatrix} b_1 k_2^2 z_2^2 [I_1(z_2 a) K_1(z_2 R) - I_1(z_2 R) K_1(z_2 a)] + \\ + b_3 k_2 z_2 [I_1(z_2 a) K_0(z_2 a) - I_0(z_2 a) K_1(z_2 a)] + \\ + b_1 h_c k_2 z_2 [I_1(z_2 a) K_0(z_2 R) - I_0(z_2 R) K_1(z_2 a)] \end{bmatrix}}{DET}, \quad (4.45)$$

$$C(s) = \frac{\begin{bmatrix} I_1(z_1 a) K_1(z_2 R) b_1 k_1 z_1 k_2 z_2 + \\ + I_1(z_1 a) K_0(z_2 a) b_3 k_1 z_1 + \\ + I_1(z_1 a) K_0(z_2 R) b_1 h_c k_1 z_1 - \\ - I_0(z_1 a) K_1(z_2 a) b_3 k_2 z_2 \end{bmatrix}}{DET}, \quad (4.46)$$

e

$$D(s) = \frac{\begin{bmatrix} I_1(z_1 a)I_1(z_2 R)b_1 k_1 z_1 k_2 z_2 - \\ -I_1(z_1 a)I_0(z_2 a)b_3 k_1 z_1 - \\ -I_1(z_1 a)I_0(z_2 R)b_1 h_c k_1 z_1 + \\ I_1(z_2 a)I_0(z_1 a)b_3 k_2 z_2 \end{bmatrix}}{DET}, \quad (4.47)$$

onde

$$b_1 = \frac{(T_{20} - T_{10})}{s} - \frac{\alpha_1 \bar{Q}}{s k_1},$$

$$b_2 = \frac{h_c}{s} (T_{amb} - T_{20}),$$

$$z_1 = \sqrt{\frac{s}{\alpha_1}}, \quad z_2 = \sqrt{\frac{s}{\alpha_2}},$$

e

$$DET = \begin{bmatrix} k_1 k_2 z_1 z_2 (I_1(z_1 a)I_1(z_2 R)K_0(z_2 a) - I_1(z_1 a)I_0(z_2 a)K_1(z_2 R)) + \\ + h_c k_1 z_1 (-I_1(z_1 a)I_0(z_2 a)K_0(z_2 R) + I_1(z_1 a)I_0(z_2 R)K_0(z_2 a)) + \\ + k_2^2 z_2^2 (I_1(z_2 a)I_0(z_1 a)K_1(z_2 R) - I_1(z_2 R)I_0(z_1 a)K_1(z_2 a)) + \\ + h_c k_2 z_2 (I_1(z_2 a)I_0(z_1 a)K_0(z_2 R) - I_0(z_1 a)I_0(z_2 R)K_1(z_2 a)) \end{bmatrix}.$$

É importante observar que tais coeficientes são dados todos em função do parâmetro s , introduzido pela transformação, ou seja: $A = A(s)$, $C = C(s)$ e $D = D(s)$.

Agora, pode-se reescrever as equações (4.39) e (4.40), utilizando-se estas informações:

$$\overline{T_{1H}} = A(s)I_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}}r) \quad , \quad 0 < r < a \quad (4.48)$$

e

$$\overline{T_{2H}} = C(s)I_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}r) + D(s)K_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}r) \quad , \quad a < r < R. \quad (4.49)$$

4.2.3 Solução do Problema Transformado

Da mesma forma como se reescreveu a solução homogênea após a determinação de seus coeficientes, pode-se apresentar a solução do problema transformado, isto é, a solução

para as equações (4.17) e (4.18), resultantes da aplicação da transformada de Laplace com respeito à variável t .

Com as informações obtidas para a solução particular e para solução homogênea, obtem-se:

$$\bar{T}_1 = A(s)I_0\left(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}}r\right) + \frac{\alpha_1 \bar{\dot{Q}}}{s k_1} + \frac{T_{10}}{s}, \quad 0 < r < a, \quad (4.50)$$

e

$$\bar{T}_2 = C(s)I_0\left(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}r\right) + D(s)K_0\left(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}r\right) + \frac{T_{20}}{s}, \quad a < r < R \quad (4.51)$$

Para que se tenha uma total compreensão da solução, é necessário que cada um dos termos das equações (4.50) e (4.51) esteja bem definido. Sendo assim, deve-se ainda avaliar a transformada de Laplace do termo $\frac{\dot{Q}}{k_1}$.

Avaliação do Termo $\frac{\dot{Q}}{k_1}$

Como foi mostrado no capítulo dois, o termo \dot{Q} na equação de condução do calor (4.1) é dado por:

$$\dot{Q} = L \frac{\partial f_s}{\partial t}, \quad (4.52)$$

onde

$$f_s = 1 - e^{-\frac{1}{3}\pi NR^3(t)} \quad (4.53)$$

e

$$\int_{r=r_0}^{r=R} dr = \int_{t=0}^{t=t} \mu [T_e - T_B(t)]^2 dt .$$

O raio do grão ainda pode ser dado por:

$$R(t) = r_0 + \int_{t=0}^{t=t} \mu [T_e - T_B(t)]^2 dt , \quad (4.54)$$

e a temperatura de *bulk*, que é uma temperatura calculada sem sofrer influências da interface, portanto calculada no centro da região líquida, tem por formulação a seguinte

expressão:

$$T_B(t) = \frac{1}{V} \int_V T(r, z, t) dV, \quad (4.55)$$

sendo que V é o volume do cilindro menor, onde se encontra o metal líquido. Reescrevendo a equação (4.55) em termos das dimensões do cilindro, tem-se :

$$T_B(t) = \frac{2\pi}{\pi a^2 H} \int_0^H \int_0^a T(r, z, t) r dr dz. \quad (4.56)$$

E, pelo fato da temperatura variar apenas radialmente, tem-se :

$$T_B(t) = \frac{2}{a^2} \int_0^a T(r, t) r dr. \quad (4.57)$$

Assim, pode-se obter uma expressão para \dot{Q} , resgatando as formulações de cada uma de suas componentes:

$$\dot{Q} = L \frac{\partial}{\partial t} \left(1 - e^{-\frac{1}{3}\pi N \left[r_0 + \int_{t=0}^{t=t} \mu \left[T_e - \frac{2}{a^2} \int_0^a T(r, t) r dr \right]^2 dt \right]^3} \right). \quad (4.58)$$

A partir da aplicação da transformada de Laplace à equação (4.58), chega-se a uma expressão para o termo $\overline{\frac{\dot{Q}}{k_1}}$.

$$\overline{\frac{\dot{Q}}{k_1}} = \mathcal{L} \left[\frac{\dot{Q}}{k_1} \right] = \mathcal{L} \left[\frac{L}{k_1} \frac{\partial}{\partial t} \left(1 - e^{-\frac{1}{3}\pi N \left[r_0 + \int_{t=0}^{t=t} \mu \left[T_e - \frac{2}{a^2} \int_0^a T(r, t) r dr \right]^2 dt \right]^3} \right) \right]. \quad (4.59)$$

Como f_s é uma função de t e $\frac{L}{k_1}$ é uma constante, pode-se aplicar propriedades da transformada de Laplace à equação (4.59), obtendo-se a seguinte simplificação:

$$\overline{\frac{\dot{Q}}{k_1}} = \frac{L}{k_1} s \mathcal{L} \left[\left(1 - e^{-\frac{1}{3}\pi N \left[r_0 + \int_{t=0}^{t=t} \mu \left[T_e - T(t) \right]^2 dt \right]^3} \right) \right] - \frac{L}{k_1} \left(1 - e^{-\frac{1}{3}\pi N r_0} \right). \quad (4.60)$$

Novamente, simplifica-se a expressão (4.60) utilizando-se a propriedade distributiva

da transformada de Laplace. Com isso, tem-se:

$$\frac{\bar{Q}}{k_1} = \frac{L}{k_1} s \mathcal{L} [(1)] - \frac{L}{k_1} s \mathcal{L} \left[e^{-\frac{1}{3}\pi N \left[r_0 + \int_{t=0}^{t=t} \mu [T_e - T_B(t)]^2 dt \right]^3} \right] - \frac{L}{k_1} (1 - e^{-\frac{1}{3}\pi N r_0}) . \quad (4.61)$$

É importante observar que aplicando-se diretamente a transformada de Laplace às equações, chega-se a uma expressão que não se consegue avaliar. Como solução para este impasse, expande-se f_s em sua série de Taylor:

$$f_s(t) \simeq f_s(0) + t \frac{\partial f_s}{\partial t}(0) + O(h^2) . \quad (4.62)$$

Agora, ao invés de se aplicar as propriedades da transformada de Laplace diretamente na equação (4.60), utiliza-se a formulação inicial para \dot{Q} com a aproximação em série para f_s :

$$\frac{\bar{Q}}{k_1} = \frac{1}{k_1} \mathcal{L} [\dot{Q}] = \frac{L}{k_1} \mathcal{L} \left[\frac{\partial f_s}{\partial t} \right] \simeq \frac{L}{k_1} \mathcal{L} \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(f_s(0) + t \frac{\partial f_s}{\partial t}(0) \right) \right] . \quad (4.63)$$

Simplificando-se (4.63), obtém-se:

$$\frac{\bar{Q}}{k_1} = \frac{L}{k_1} \mathcal{L} \left[\frac{\partial f_s}{\partial t}(0) \right] . \quad (4.64)$$

Como $\frac{\partial f_s}{\partial t}(0)$ é uma constante, tem-se:

$$\frac{\bar{Q}}{k_1} = \frac{1}{s} \frac{L}{k_1} \frac{\partial f_s}{\partial t}(0) \quad (4.65)$$

Com isso, o problema da transformada de Laplace resume-se em determinar quem é a derivada da função f_s em relação à variável t e aplicar em zero.

Para derivar-se a função f_s , cuja expressão é dada pela equação (4.53), utiliza-se

inicialmente a distributividade da derivada com respeito à adição:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(1 - e^{-\frac{4}{3}\pi N \left[r_0 + \int_{t=0}^{t=t} \mu [T_e - T_B(t)]^2 dt \right]^3} \right) = \frac{\partial}{\partial t}(1) - \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-\frac{4}{3}\pi N \left[r_0 + \int_{t=0}^{t=t} \mu [T_e - T_B(t)]^2 dt \right]^3} \right). \quad (4.66)$$

Agora, aplica-se a regra da cadeia ao segundo termo da equação (4.66):

$$\frac{\partial f_s}{\partial t}(t) = -e^{-\frac{4}{3}\pi N \left[r_0 + \int_{t=0}^{t=t} \mu [T_e - T_B(t)]^2 dt \right]^3} \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{4}{3}\pi N \left[r_0 + \int_{t=0}^{t=t} \mu [T_e - T_B(t)]^2 dt \right]^3 \right). \quad (4.67)$$

Novamente, aplica-se a regra da cadeia para derivar-se o segundo termo da equação (4.67), onde obtém-se:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t}(t) = -e^{-\frac{4}{3}\pi N R(t)^3} \left(-\frac{4}{3}\pi N 3R^2(t) \frac{\partial}{\partial t} \left[r_0 + \int_{t=0}^{t=t} \mu [T_e - T_B(t)]^2 dt \right] \right). \quad (4.68)$$

Simplificando-se as constantes, tem-se:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t}(t) = 4\pi N e^{-\frac{4}{3}\pi N R(t)^3} R^2(t) \frac{\partial}{\partial t} \left[r_0 + \int_{t=0}^{t=t} \mu [T_e - T_B(t)]^2 dt \right]. \quad (4.69)$$

Apenas para diminuir o tamanho das expressões, avalia-se o termo $\frac{\partial R(t)}{\partial t}$ separadamente:

$$\frac{\partial R(t)}{\partial t} = \frac{\partial r_0}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{t=0}^{t=t} \mu [T_e - T_B(t)]^2 dt \right]. \quad (4.70)$$

Pela regra de derivação de Leibnitz, tem-se:

$$\frac{\partial R(t)}{\partial t} = \int_{t=0}^{t=t} \frac{\partial}{\partial t} (\mu [T_e - T_B(t)]^2) dt + \mu [T_e - T_B(t)]^2 \frac{dt}{dt} - \mu [T_e - T_B(t)]^2 \frac{d0}{dt}. \quad (4.71)$$

Logo, $\frac{\partial R(t)}{\partial t}$ é dado pela seguinte expressão:

$$\frac{\partial R(t)}{\partial t} = \int_{t=0}^{t=t} \frac{\partial}{\partial t} (\mu [T_e - T_B(t)]^2) dt + \mu [T_e - T_B(t)]^2. \quad (4.72)$$

Sendo assim, pode-se obter uma expressão mais completa para $\frac{\partial f_s}{\partial t}(t)$, dada por:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t}(t) = 4\pi N e^{-\frac{1}{3}\pi N R(t)^3} R^2(t) \left[\int_{t=0}^{t=t} \frac{\partial}{\partial t} (\mu [T_e - T_B(t)]^2) dt + \mu [T_e - T_B(t)]^2 \right] \quad (4.73)$$

E agora, aplicando-se $t = 0$ na equação (4.73), tem-se:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t}(0) = 4\pi N e^{-\frac{1}{3}\pi N R(0)^3} R^2(0) \left[\int_{t=0}^{t=0} \frac{\partial}{\partial t} (\mu [T_e - T_B(t)]^2) dt + \mu [T_e - T_B(0)]^2 \right] . \quad (4.74)$$

Como $R(0) = r_0$, chega-se em:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t}(0) = 4\pi N e^{-\frac{1}{3}\pi N r_0^3} r_0^2 [\mu [T_e - T_B(0)]^2] , \quad (4.75)$$

onde

$$T_B(0) = \frac{2}{a^2} \int_0^a T(r, 0) r dr = \frac{2}{a^2} \int_0^a T_{10} r dr = T_{10} . \quad (4.76)$$

Desta forma, obteve-se uma expressão aproximada para o termo $\overline{\frac{\dot{Q}}{k_1}}$ a partir da linearização da função f_s .

$$\overline{\frac{\dot{Q}}{k_1}} = \frac{4\pi N r_0^2 L}{s k_1} e^{-\frac{1}{3}\pi N r_0^3} [\mu [T_e - T_{10}]^2] \quad (4.77)$$

Finalmente, tem-se o conhecimento de cada termo das equações (4.50) e (4.51):

$$\overline{T}_1 = A(s) I_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}} r) + \frac{\alpha_1 L}{s^2 k_1} 4\pi N r_0^2 e^{-\frac{1}{3}\pi N r_0^3} [\mu [T_e - T_{10}]^2] + \frac{T_{10}}{s} , \quad 0 < r < a, \quad (4.78)$$

e

$$\overline{T}_2 = C(s) I_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}} r) + D(s) K_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}} r) + \frac{T_{20}}{s} , \quad a < r < R \quad (4.79)$$

Logo, a solução do problema transformado pode ser escrita da seguinte forma:

$$\overline{T} = \begin{cases} \overline{T}_1 & 0 < r < a \\ \overline{T}_2 & a < r < R \end{cases} \quad (4.80)$$

onde \bar{T} é a temperatura transformada do sistema metal-molde.

Passa-se, então, à segunda e última etapa para a obtenção da solução do problema de solidificação.

4.2.4 Solução do Problema Unidimensional

Obteve-se uma solução para o problema transformado e, a partir desta, chega-se na solução para o problema unidimensional inicialmente proposto.

A relação entre as duas soluções se dá através da transformada de Laplace e sua inversa. Portanto, para se obter a temperatura do sistema metal-molde a cada instante t deve-se aplicar a transformação inversa nas expressões dadas em (4.80). Com isso, tem-se:

$$T(t) = \mathcal{L}^{-1} [\bar{T}(s)] (t) = \begin{cases} \mathcal{L}^{-1} [\bar{T}_1(s)] (t) & 0 < r < a, t > 0 \\ \mathcal{L}^{-1} [\bar{T}_2(s)] (t) & a < r < R, t > 0 \end{cases}, \quad (4.81)$$

onde:

$$T_1 = \mathcal{L}^{-1} [\bar{T}_1] = \mathcal{L}^{-1} \left[A(s)I_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}}r) + \frac{\alpha_1 L}{s^2 k_1} 4\pi N r_0^2 e^{-\frac{4}{3}\pi N r_0^3} [\mu [T_e - T_{10}]^2] + \frac{T_{10}}{s} \right], \quad 0 < r < a, \quad (4.82)$$

e

$$T_2 = \mathcal{L}^{-1} [\bar{T}_2] = \mathcal{L}^{-1} \left[C(s)I_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}r) + D(s)K_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}r) + \frac{T_{20}}{s} \right], \quad a < r < R \quad (4.83)$$

Devido à linearidade da transformada inversa em relação à adição, tem-se que:

$$T_1 = \mathcal{L}^{-1} \left[A(s)I_0(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}}r) \right] + \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\alpha_1 L}{s^2 k_1} 4\pi N r_0^2 e^{-\frac{4}{3}\pi N r_0^3} [\mu [T_e - T_{10}]^2] \right] + \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{T_{10}}{s} \right], \quad 0 < r < a, \quad (4.84)$$

e

$$T_2 = \mathcal{L}^{-1} \left[C(s)I_0\left(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}r\right) \right] + \mathcal{L}^{-1} \left[D(s)K_0\left(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}r\right) \right] + \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{T_{20}}{s} \right], \quad a < r < R. \quad (4.85)$$

Pelo fato das soluções particulares (4.31) e (4.32) serem constantes em t , obtém-se analiticamente a transformada inversa desses termos. Com isso as equações (4.84) e (4.85) são dadas por:

$$T_1 = \mathcal{L}^{-1} \left[A(s)I_0\left(\sqrt{\frac{s}{\alpha_1}}r\right) \right] + \alpha_1 t \frac{L}{k_1} 4\pi N r_0^2 e^{-\frac{4}{3}\pi N r_0^3} \left[\mu [T_e - T_{10}]^2 \right] + T_{10}, \quad 0 < r < a,$$

e

$$T_2 = \mathcal{L}^{-1} \left[C(s)I_0\left(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}r\right) \right] + \mathcal{L}^{-1} \left[D(s)K_0\left(\sqrt{\frac{s}{\alpha_2}}r\right) \right] + T_{20}, \quad a < r < R.$$

Neste momento, tem-se, então, uma idéia de como é a solução do problema unidimensional, pois as transformadas dos termos referentes às soluções homogêneas ainda não foram invertidas. Para isso será necessário utilizar algum dos métodos numéricos apresentados no capítulo anterior.

4.3 Inversão Numérica da Temperatura Transformada

A solução do problema transformado, $\bar{T}(r, s)$, encontrada nas seções anteriores, pode ser considerada como um quociente de polinômios, já que seus termos envolvem funções de Bessel Modificada que, na realidade, são séries. Por isso, uma das alternativas para encontrar sua transformada inversa é utilizar o método de quadratura de Gauss com oito pontos de quadratura. Dessa forma, a solução procurada é dada pela expressão:

$$T(r, t) = \mathcal{L}^{-1}(\bar{T}(r, s)) \simeq \sum_{j=1}^8 A_j \frac{p_j}{t} \bar{T}\left(r, \frac{p_j}{t}\right), \quad (4.86)$$

onde os pesos p_j são as raízes dos polinômios

$$(-1)^n \sum_{r=0}^n a(n, r) p^{n-r} = 0,$$

cujos termos $a(n, r)$ são dados por:

$$a(n, r) = \frac{(-1)^{n-r} n [(n+r-1)!]}{r!(n-r)!}.$$

Para $n = 8$ têm-se os seguintes valores:

$$p_1 = \overline{p_2} = 10,169446 + 1,649202i$$

$$p_3 = \overline{p_4} = 9,406371 + 4,969217i$$

$$p_5 = \overline{p_6} = 7,738688 + 8,370879i$$

$$p_7 = \overline{p_8} = 4,685495 + 12,01057i$$

Os coeficientes A_j são dados como as soluções de:

$$\sum_{j=1}^n A_j p_j^{-r} = \frac{1}{r!}, \quad 0 \leq r \leq (n-1)$$

E para $n = 8$ têm-se os seguintes valores:

$$A_1 = \overline{A_2} = -39,795288 + 1338,783902i$$

$$A_3 = \overline{A_4} = 70,020480 - 641,933247i$$

$$A_5 = \overline{A_6} = -34,242643 + 127,808748i$$

$$A_7 = \overline{A_8} = 4,517451 - 6,142475i$$

Apenas para que a notação fique clara, o sinal sobre os valores p_j e A_j representa o número complexo conjugado, e este mesmo sinal sobre a função T indica a transformada de Laplace da função T .

Como os valores p_j e A_j da fórmula de quadratura são complexos e as funções de Bessel Modificada, envolvidas na expressão da temperatura transformada, $\bar{T}(r, s)$, possuem em suas séries termos que envolvem a função logaritmo (apêndice A), deve-se definir o ramo do logaritmo considerado para que a função $\bar{T}(r, s)$ continue sendo holomorfa em todo plano complexo a menos do eixo real negativo.

As variáveis das funções de Bessel envolvem a raiz quadrada do parâmetro s , portanto, deve-se definir um ramo da função raiz quadrada. O que na realidade não é difícil, pois:

" se $g : U \rightarrow \mathcal{C}$ é um ramo do logaritmo, então $h(z) = e^{\frac{g(z)}{n}}$ é um ramo da raiz n -ésima " (Churchill [18])

Com isso, escolhendo $\ln(z) = \ln|z| + i \arg z$, com $-\pi < \arg z < \pi$, tem-se, naturalmente, uma escolha para um ramo da função raiz quadrada e ainda, como consequência, a seguinte propriedade:

" Dados $p = \rho e^{i\theta}$, um número complexo e $\bar{p} = \rho e^{-i\theta}$, o seu conjugado. Então, $\ln(p) + \ln(\bar{p}) = 2 \ln \rho$ é um número real. "

De fato, $p = \rho e^{i\theta}$ e $\bar{p} = \rho e^{-i\theta}$, tem-se que $\phi = -\theta$. Com isso

$$\ln(p) = \ln|p| + i \arg p = \ln \rho + i\theta \quad \text{e}$$

$$\ln(\bar{p}) = \ln|\bar{p}| + i \arg \bar{p} = \ln \rho + i\phi = \ln \rho - i\theta \quad \text{e portanto,}$$

$$\ln(p) + \ln(\bar{p}) = \ln \rho + i\theta + \ln \rho - i\theta = 2 \ln \rho. \quad \square$$

É importante que se observe esta propriedade para que o resultado final de (4.86) seja um valor real para cada r escolhido.

4.3.1 Expressão Final

Sendo assim, escreve-se a forma da expressão final para a temperatura do problema unidimensional, dada por (4.86), quando considerada a inversão via quadratura de Gauss

$$T_1 = \sum_{j=1}^8 A_j \frac{p_j}{t} \left[A \left(\frac{p_j}{t} \right) I_0 \left(\sqrt{\frac{p_j}{\alpha_1 t}} r \right) \right] + \alpha_1 t \frac{L}{k_1} 4\pi N r_0^2 e^{-\frac{4}{3}\pi N r_0^3} \left[\mu [T_c - T_{10}]^2 \right] + T_{10}, \quad 0 < r < a, \quad (4.87)$$

e

$$T_2 = \sum_{j=1}^8 A_j \frac{p_j}{t} \left[C \left(\frac{p_j}{t} \right) I_0 \left(\sqrt{\frac{p_j}{\alpha_2 t}} r \right) \right] + \sum_{j=1}^8 A_j \frac{p_j}{t} \left[D \left(\frac{p_j}{t} \right) K_0 \left(\sqrt{\frac{p_j}{\alpha_2 t}} r \right) \right] + T_{20}, \quad a < r < R. \quad (4.88)$$

Capítulo 5

Modelo Bidimensional

No modelo bidimensional de solidificação considera-se, além da dissipação de calor por condução e convecção na direção radial, dissipação por radiação e convecção na direção vertical. Novamente a geometria do molde é cilíndrica e as equações são distintas para cada meio, como no modelo proposto por Kanetkar [11].

5.1 Formulação

A equação para o metal líquido é dada por:

$$\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial}{\partial t} T_1 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} T_1 + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} T_1 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} T_1 + \frac{\dot{Q}}{k_1}, \quad \begin{array}{l} 0 < r < a \\ 0 < z < H \\ t > 0 \end{array} \quad (5.1)$$

A equação para o molde é dada por:

$$\frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial}{\partial t} T_2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} T_2 + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} T_2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} T_2, \quad \begin{array}{l} a < r < R \\ 0 < z < H \\ t > 0 \end{array} \quad (5.2)$$

Onde \dot{Q} é o termo de fonte que representa a taxa de formação de grão no metal líquido e tem a mesma forma que o termo de fonte para o modelo unidimensional:

$$\dot{Q} = L \frac{\partial}{\partial t} f_s \quad (5.3)$$

e

$$f_s = 1 - e^{-\frac{4}{3}\pi N R^3(t)}, \quad (5.4)$$

onde

$$R(t) = r_0 + \int_0^t \mu (T_E - T_B(r, z, t))^2 dt. \quad (5.5)$$

As condições de contorno associadas ao modelo bidimensional são:

1. Interface Metal Líquido - Molde:

$$T_1(r, z, t) = T_2(r, z, t); \quad r = a, \quad \begin{matrix} t > 0 \\ 0 < z < H \end{matrix}. \quad (5.6)$$

2. Continuidade do Fluxo de Calor Metal Líquido - Molde:

$$k_1 \frac{\partial}{\partial r} T_1(r, z, t) = k_2 \frac{\partial}{\partial r} T_2(r, z, t); \quad r = a, \quad \begin{matrix} t > 0 \\ 0 < z < H \end{matrix}. \quad (5.7)$$

3. Temperatura Máxima no Centro do Cilindro:

$$\frac{\partial}{\partial r} T_1(r, z, t) = 0; \quad r = 0, \quad \begin{matrix} t > 0 \\ 0 < z < H \end{matrix}. \quad (5.8)$$

4. Fluxo de Calor Convectivo na Interface Lateral Molde - Ar:

$$k_2 \frac{\partial}{\partial r} T_2(r, z, t) = h_c (T_{amb} - T_2(r, z, t)); \quad r = R, \quad \begin{matrix} t > 0 \\ 0 < z < H \end{matrix}. \quad (5.9)$$

5. Fluxo de Calor Radioativo e Convectivo nas Interfaces Superiores Metal Líquido -

Ar e Molde - Ar:

$$-k_1 \frac{\partial}{\partial z} T_1(r, z, t) = (h_c + h_r) (T_1(r, z, t) - T_{amb}); \quad z = H, \quad \begin{matrix} t > 0 \\ 0 < r < a \end{matrix} \quad (5.10)$$

$$-k_2 \frac{\partial}{\partial z} T_2(r, z, t) = (h_c + h_r) (T_2(r, z, t) - T_{amb}); \quad z = H, \quad \begin{matrix} t > 0 \\ a < r < R \end{matrix} \quad (5.11)$$

6. Base do Cilindro Isolada:

$$\frac{\partial}{\partial z} T_1(r, z, t) = 0; \quad z = 0, \quad \begin{matrix} t > 0 \\ 0 < r < a \end{matrix} \quad (5.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} T_2(r, z, t) = 0; \quad z = 0, \quad \begin{matrix} t > 0 \\ a < r < R \end{matrix} \quad (5.13)$$

A Condição Inicial é dada por:

$$T_1(r, z, t) = T_{10}; \quad t = 0, \quad \begin{matrix} 0 < r < a \\ 0 < z < H \end{matrix} \quad (5.14)$$

$$T_2(r, z, t) = T_{20}; \quad t = 0, \quad \begin{matrix} a < r < R \\ 0 < z < H \end{matrix} \quad (5.15)$$

Esta modelagem foi resolvida numericamente em [11] através do programa BAMACAST, baseado num esquema implícito de volumes de controle bidimensional com uma condição de contorno descrevendo o fluxo de calor na interface metal-molde. Neste trabalho, propõe-se um método analítico para a resolução destas equações.

5.2 Solução Analítica

A primeira tentativa de solução desse modelo foi via aplicação da transformada de Laplace nas variáveis t e z , [22], o que não se tornou viável devido à dificuldade de se encontrar as soluções particulares para as respectivas equações e, conseqüentemente, a transformada inversa das expressões finais.

Neste capítulo, resolve-se, então, o modelo bidimensional de maneira a recair em um problema unidimensional, similar ao resolvido por transformada de Laplace no capítulo 4. O método utilizado para isto será o linear nodal.

5.2.1 Métodos Nodais

Os métodos nodais são amplamente utilizados na solução das equações de transporte de neutrons [15].

A idéia básica desses métodos é resolver a equação considerando um fluxo médio em uma das direções. Para isso, a equação é integrada na direção escolhida. Devido à integração, termos desconhecidos *a priori* surgem e equações auxiliares são intruduzidas para manter a consistência do problema. A classificação do método é dada de acordo com o tipo de equação auxiliar empregada (Lewis e Miller [15]).

O método utilizado será o linear nodal, já que as equações auxiliares aproximam linearmente os termos desconhecidos por aqueles cujas equações são oferecidas no problema.

Aplicação do Método Linear Nodal ao Problema Bidimensional

As equações para o modelo bidimensional serão resolvidas considerando-se um fluxo médio de calor na direção z . Para isso, a transformação

$$\bar{T}_i = \bar{T}_i(r, t) = \frac{1}{H} \int_0^H T_i(r, z, t) dz ; i = 1, 2 , \quad (5.16)$$

onde o índice i indica os dois diferentes meios considerados e H é a altura da cilindro, é aplicada às equações (5.1) e (5.2).

$$\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial \bar{T}_1}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{T}_1}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{T}_1}{\partial r} + \frac{\bar{Q}}{k_1} + \frac{1}{H} \left(\frac{\partial}{\partial z} T_1(r, H, t) - \frac{\partial}{\partial z} T_1(r, 0, t) \right), \quad \begin{array}{l} 0 < r < a \\ t > 0 \end{array} \quad (5.17)$$

e

$$\frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial \bar{T}_2}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{T}_2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{T}_2}{\partial r} + \frac{1}{H} \left(\frac{\partial}{\partial z} T_2(r, H, t) - \frac{\partial}{\partial z} T_2(r, 0, t) \right), \quad \begin{array}{l} 0 < r < a \\ t > 0 \end{array}, \quad (5.18)$$

Usando a condição de contorno (5.12) e (5.13) nas equações (5.17) e (5.18), obtém-se a seguinte simplificação :

$$\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial \bar{T}_1}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{T}_1}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{T}_1}{\partial r} + \frac{\bar{Q}}{k_1} + \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial z} T_1(r, H, t), \quad \begin{array}{l} 0 < r < a \\ t > 0 \end{array} \quad (5.19)$$

e

$$\frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial \bar{T}_2}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{T}_2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{T}_2}{\partial r} + \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial z} T_2(r, H, t), \quad \begin{array}{l} 0 < r < a \\ t > 0 \end{array}. \quad (5.20)$$

Pela condição de contorno (5.10) para o metal e (5.11) para o molde, obtém-se ainda a seguinte simplificação:

$$\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial \bar{T}_1}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{T}_1}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{T}_1}{\partial r} + \frac{\bar{Q}}{k_1} + \frac{(h_c + h_r)}{H k_1} (T_{amb} - T_1(r, H, t)), \quad \begin{array}{l} 0 < r < a \\ t > 0 \end{array} \quad (5.21)$$

e

$$\frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial \bar{T}_2}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{T}_2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{T}_2}{\partial r} + \frac{(h_c + h_r)}{H k_2} (T_{amb} - T_2(r, H, t)), \quad \begin{array}{l} 0 < r < a \\ t > 0 \end{array}. \quad (5.22)$$

Segundo o método linear nodal, introduzem-se relações auxiliares que associem os termos desconhecidos, $T_i(r, H, t)$; $i = 1, 2$, aos termos que serão calculados pelas equações (5.21) e (5.22), $\bar{T}_i(r, t)$; $i = 1, 2$, respectivamente. Deste modo, as equações auxiliares são dadas por:

$$T_1(r, H, t) = \beta \bar{T}_1(r, t) \quad (5.23)$$

$$T_2(r, H, t) = \beta \bar{T}_2(r, t), \quad (5.24)$$

onde β é uma constante real arbitrariamente escolhida.

Agora substitui-se (5.23) e (5.24) em (5.21) e (5.22), respectivamente:

$$\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial \bar{T}_1}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{T}_1}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{T}_1}{\partial r} + \frac{\bar{Q}}{k_1} + \frac{(h_c + h_r)}{H k_1} (T_{amb} - \beta \bar{T}_1), \quad \begin{matrix} 0 < r < a \\ t > 0 \end{matrix} \quad (5.25)$$

e

$$\frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial \bar{T}_2}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{T}_2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{T}_2}{\partial r} + \frac{(h_c + h_r)}{H k_2} (T_{amb} - \beta \bar{T}_2), \quad \begin{matrix} 0 < r < a \\ t > 0 \end{matrix} \quad (5.26)$$

Reordenando os termos, têm-se:

$$\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial \bar{T}_1}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{T}_1}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{T}_1}{\partial r} - \frac{(h_c + h_r)}{H k_1} \beta \bar{T}_1 + \frac{(h_c + h_r)}{H k_1} T_{amb} + \frac{\bar{Q}}{k_1}, \quad \begin{matrix} 0 < r < a \\ t > 0 \end{matrix} \quad (5.27)$$

e

$$\frac{1}{\alpha_2} \frac{\partial \bar{T}_2}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{T}_2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{T}_2}{\partial r} - \frac{(h_c + h_r)}{H k_2} \beta \bar{T}_2 + \frac{(h_c + h_r)}{H k_2} T_{amb}, \quad \begin{matrix} 0 < r < a \\ t > 0 \end{matrix} \quad (5.28)$$

Às condições de contorno (5.6), (5.7), (5.8) e (5.9) também aplica-se a transformação (5.16):

$$\bar{T}_1(r, t) = \bar{T}_2(r, t); \quad r = a, t > 0, \quad (5.29)$$

$$k_1 \frac{\partial \overline{T}_1(r, t)}{\partial r} = k_2 \frac{\partial \overline{T}_2(r, t)}{\partial r}; \quad r = a, t > 0 \quad , \quad (5.30)$$

$$\frac{\partial \overline{T}_1(r, t)}{\partial r} = 0; \quad r = 0, t > 0 \quad , \quad (5.31)$$

$$k_2 \frac{\partial \overline{T}_2(r, t)}{\partial r} = h_c (T_{amb} - \overline{T}_2(r, t)); \quad r = R, t > 0 \quad , \quad (5.32)$$

Aplica-se, ainda, a transformação (5.16) à condição inicial:

$$\overline{T}_1(r, t) = T_{10}; \quad t = 0$$

$$\overline{T}_2(r, t) = T_{20}; \quad t = 0 \quad (5.33)$$

Agora as equações (5.27) e (5.28) com as condições de contorno (5.29), (5.30), (5.31) e (5.32) e com a condição inicial (5.33) constituem um novo problema unidimensional, só que desta vez para o fluxo de calor médio na direção vertical. Este problema também pode ser resolvido através da aplicação da transformada de Laplace na variável t .

Resolução do Problema Unidimensional Resultante

Da mesma forma como foi resolvido o problema unidimensional apresentado no capítulo anterior, aplica-se a transformada de Laplace, segundo a variável t , às equações (5.27) e (5.28), resultando:

$$\frac{1}{\alpha_1} \left(u \widehat{\overline{T}}_1 - \overline{T}_1(r, 0) \right) = \frac{d^2 \widehat{\overline{T}}_1}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d \widehat{\overline{T}}_1}{dr} - \frac{(h_c + h_r)}{H k_1} \beta \widehat{\overline{T}}_1 + \frac{1}{u} \frac{(h_c + h_r)}{H k_1} T_{amb} + \frac{\widehat{Q}}{k_1}, \quad 0 < r < a, \quad (5.34)$$

e

$$\frac{1}{\alpha_2} \left(u \widehat{\overline{T_2}} - \overline{T_2}(r, 0) \right) = \frac{d^2}{dr^2} \widehat{\overline{T_2}} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \widehat{\overline{T_2}} - \frac{(h_c + h_r)}{H k_2} \beta \widehat{\overline{T_2}} + \frac{1}{u} \frac{(h_c + h_r)}{H k_1} T_{amb}, \quad a < r < R, \quad (5.35)$$

onde u é o parâmetro correspondente à transformada de Laplace e o símbolo $\widehat{\overline{\quad}}$ indica a função transformada.

Aplica-se, então, a transformada de Laplace nas condições de contorno (5.29), (5.30), (5.31) e (5.32), obtendo-se as seguintes expressões :

$$\widehat{\overline{T_1}}(r, u) = \widehat{\overline{T_2}}(r, u); \quad r = a \quad (5.36)$$

$$k_1 \frac{d}{dr} \widehat{\overline{T_1}}(r, u) = k_2 \frac{d}{dr} \widehat{\overline{T_2}}(r, u); \quad r = a, \quad (5.37)$$

$$\frac{d}{dr} \widehat{\overline{T_1}}(r, u) = 0; \quad r = 0, \quad (5.38)$$

$$k_2 \frac{d}{dr} \widehat{\overline{T_2}}(r, u) = h_c \left(\frac{T_{amb}}{u} - \widehat{\overline{T_2}}(r, u) \right); \quad r = R, \quad (5.39)$$

Neste momento, substitui-se a condição inicial para o metal líquido e para o molde (5.33) nas equações (5.34) e (5.35) e reordenam-se os termos das equações. Obtendo-se, então:

$$\frac{d^2}{dr^2} \widehat{\overline{T_1}} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \widehat{\overline{T_1}} - \left(\frac{u}{\alpha_1} + \frac{(h_c + h_r)}{H k_1} \beta \right) \widehat{\overline{T_1}} + \frac{T_{10}}{\alpha_1} + \frac{1}{u} \frac{(h_c + h_r)}{H k_1} \beta T_{amb} + \frac{\widehat{\overline{Q}}}{k_1} = 0 \quad (5.40)$$

e

$$\frac{d^2}{dr^2} \widehat{\overline{T_2}} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \widehat{\overline{T_2}} - \left(\frac{u}{\alpha_2} + \frac{(h_c + h_r)}{H k_2} \beta \right) \widehat{\overline{T_2}} + \frac{T_{20}}{\alpha_2} + \frac{1}{u} \frac{(h_c + h_r)}{H k_2} \beta T_{amb} = 0, \quad (5.41)$$

ou seja, as equações (5.40) e (5.41) são equações diferenciais ordinárias de segunda ordem não-homogêneas com respeito à variável r e com parâmetro u , similares às equações transformadas do problema unidirecional, com as mesmas condições de contorno. Portanto, as soluções de (5.40) e (5.41) são dadas por:

$$\widehat{T}_1 = A(u)I_0\left(\sqrt{\frac{u}{\gamma_1}}r\right) + \frac{1}{\gamma_1} \frac{T_{10}}{\alpha_1} + \frac{1}{\gamma_1} \frac{1}{u} \frac{(h_c + h_r)}{Hk_1} \beta T_{amb} + \frac{1}{\gamma_1 u} \frac{\dot{Q}}{k_1}, \quad 0 < r < a \quad (5.42)$$

e

$$\widehat{T}_2 = C(u)I_0\left(\sqrt{\frac{u}{\gamma_2}}r\right) + D(u)K_0\left(\sqrt{\frac{u}{\gamma_2}}r\right) + \frac{1}{\gamma_2} \frac{T_{10}}{\alpha_2} + \frac{1}{\gamma_2} \frac{1}{u} \frac{(h_c + h_r)}{Hk_2} \beta T_{amb}, \quad a < r < R, \quad (5.43)$$

onde

$$\gamma_1 = \frac{u}{\alpha_1} + \frac{(h_c + h_r)}{Hk_1} \beta, \quad \gamma_2 = \frac{u}{\alpha_2} + \frac{(h_c + h_r)}{Hk_2} \beta,$$

os coeficientes $A(u)$, $C(u)$ e $D(u)$ são também determinados pelo sistema gerado a partir das condições de contorno, o qual, aliás, é idêntico ao caso apresentado no capítulo anterior a menos dos termos respectivos às soluções particulares.

Após a determinação desses coeficientes, o fluxo de calor médio para o modelo bidimensional será encontrado através da aplicação da transformada inversa de Laplace às equações (5.42) e (5.43). Obtém-se, então:

$$\overline{T}_1(r, t) = \sum_{j=1}^8 A_j \left(\frac{p_j}{t}\right) \left[A\left(\frac{p_j}{t}\right) I_0\left(\sqrt{\left(\frac{p_j}{t}\right) \frac{1}{\gamma_1}} r\right) + \frac{1}{\gamma_1} \frac{T_{10}}{\alpha_1} + \frac{1}{\gamma_1} \frac{1}{\left(\frac{p_j}{t}\right)} \frac{(h_c + h_r)}{Hk_1} \beta T_{amb} + \frac{1}{\gamma_1 \left(\frac{p_j}{t}\right)} \frac{\dot{Q}}{k_1} \right], \quad 0 < r < a \quad (5.44)$$

e

$$\overline{T}_2(r, t) = \sum_{j=1}^8 A_j \left(\frac{p_j}{t}\right) \left[C\left(\frac{p_j}{t}\right) I_0\left(\sqrt{\left(\frac{p_j}{t}\right) \frac{1}{\gamma_2}} r\right) + D\left(\frac{p_j}{t}\right) K_0\left(\sqrt{\left(\frac{p_j}{t}\right) \frac{1}{\gamma_2}} r\right) + \frac{T_{10}}{\gamma_2 \alpha_2} + \frac{1}{\gamma_2 \left(\frac{p_j}{t}\right)} \frac{(h_c + h_r)}{Hk_2} \beta T_{amb} \right] \quad a < r < R \quad (5.45)$$

onde os coeficientes A_j e os pesos p_j são dados pela fórmula da quadratura de Gauss

com oito pontos, e os termos γ'_1 e γ'_2 são dados por:

$$\gamma'_1 = \left(\frac{p_j}{t}\right) \frac{1}{\alpha_1} + \frac{(h_c + h_r)}{Hk_1} \beta$$

e

$$\gamma'_2 = \left(\frac{p_j}{t}\right) \frac{1}{\alpha_2} + \frac{(h_c + h_r)}{Hk_2} \beta.$$

E, portanto, a expressão (5.16) fica determinada.

Extensão

A distribuição axial de temperatura não é linear, por isso o cilindro é discretizado na altura, e em cada elemento cilíndrico o gradiente de temperatura resultante da aplicação do método nodal na variável z é aproximado pela diferença de temperatura nas interfaces do nodo como no caso unidimensional.

A solução para o modelo unidimensional pode ser aplicada para cada um dos elementos cilíndricos resultantes da discretização. As constantes arbitrárias são determinadas pela aplicação das condições de contorno e continuidade de calor e temperatura nas faces de elementos cilíndricos.

Capítulo 6

Conclusão

O modelo físico apresentado neste trabalho já havia sido resolvido numericamente por Kanetkar, Chen, Stefanescu e El-Kaddah [11] e foi a validação deste modelo através da comparação dos dados experimentais com os valores gerados via simulação que motivou a busca de novas formas de resolução do modelo, visando a obtenção de resultados ainda mais próximos da realidade.

Um dos aspectos negativos dos métodos anteriormente utilizados (diferenças finitas, volumes de controle finitos, etc) é a necessidade de discretização do domínio, gerando com isso erros de discretização, problemas de instabilidade e ainda uma total dependência da solução à discretização feita, forçando a geração de uma nova malha, caso o ponto desejado não seja um dos nós da primeira. Cabe observar que, a cada refinamento de uma malha, novos erros são introduzidos, aumentando-se o risco de instabilidade.

Neste trabalho, eliminou-se este problema através da aplicação da transformada de Laplace às equações do modelo unidimensional do processo de solidificação. A solução transformada é apresentada em forma fechada, sendo, portanto, válida para qualquer ponto do domínio espaço x tempo, mesmo que este seja um domínio convexo qualquer.

O modelo bidimensional para o cálculo do fluxo de calor, através do método linear nodal, foi transformado em um problema de fluxo médio unidimensional, similar ao anteriormente resolvido por transformada de Laplace. E, apesar da linearização feita em alguns termos, tem-se um ganho na formulação geral do problema, pois, nos demais métodos, todos os termos das equações são aproximados e discretizados de alguma forma.

Embora não se tenha invertido a expressão obtida como solução do problema transformado, apresentou-se uma série de métodos para a inversão da transformada de Laplace de uma função. Deixa-se ainda, para um futuro trabalho, a alternativa de se buscar, via utilização do *software* REDUCE, uma expressão analítica para a inversa da solução transformada.

Outra possibilidade de resolução seria, através de transformações conformes conhecidas, transformar o problema de transferência de calor em um cilindro num problema de mesma natureza em um paralelepípedo, ver Zabadal [23]. Desta forma, as soluções seriam dadas em termos de funções hiperbólicas cuja transformada de Laplace inversa é mais facilmente obtida em relação às funções de Bessel que surgem quando o problema é expresso em coordenadas cilíndricas. Quanto à utilização de modelos mais sofisticados, tem-se também a alternativa de incluir as equações de transporte de massa à macro-micro modelagem apresentada.

Bibliografia

- [1] VIELMO, Horácio. "Simulação Numérica da Transferência de Calor e Massa na Solidificação de Ligas Binárias ", Tese de Doutorado, Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFSC, 1993.
- [2] ZARO, Milton, "Controle de Qualidade *on-line* de Ligas Al-Si Fundidas via Telemetria ", Tese de Doutorado, Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica, UFRGS, 1991.
- [3] CARSLAW, H. S.; JAEGER, J. C., "Conduction of Heat in Solids ", Oxford, 1959.
- [4] HENZEL, J. G.; KEVERIAN, J., "Comparison of Calculated and Measured Solidification Patterns for a Variety of Steel Castings ", AFS Transactions, pag. 661-672, 1965.
- [5] PEHLKE, R. D.; MARRONE, R. E.; WILKERS, J. O., "Computer Simulation of Solidification ", American Foundrymen's Society, Des Plaines, Illinois, 1976.
- [6] BRODY, H. D.; APELIAN, D., ed., "Modeling of Castings and Welding Processes ", Metallurgical Society of AIME, 1981.
- [7] DANTZIG, J. A.; BERRY, J. T., "Modeling of Castings and Welding Processes II ", Metallurgical Society of AIME, 1984.
- [8] FREDRICKSSON, H. , "State of Art or Computer Simulation fo Casting and Solidification Processes ", Les Editions de Physique, France, 1986.
- [9] OLDFIELD, W.; ASM Trans., vol. 59, pag. 945-959, 1966.

- [10] STEFANESCU, D. M.; UPADHYA, G.; BANDYOPADHYAY, D., "Heat Transfer-Solidification Kinetics Modeling of Solidification of Castings ", Metallurgical Transactions A, v. 21A, pag. 997-1005, 1990
- [11] KANETKAR, C. S.; CHEN, In-Gann; STEFANESCU, D. M.; EL-KADDAH, N. "A Latent Heat Method for Macro-Micro Modeling of Eutectic Solidification ", Transactions ISIJ, vol 28, pag. 860-868, 1988.
- [12] FAZZI, José R. N. "Simulação Numérica da Curva de Resfriamento de uma Liga Eutética ", Dissertação de Mestrado, Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, 1993.
- [13] RAPPAZ, M.; STEFANESCU, D. M.; "Modeling of Equiaxed Primary and Eutectic Solidification ", The Metallurgical Society, pag. 133-151, 1988.
- [14] KOZAKEVICIUS, A. J.; VILHENA, M. T.; "Simulação Numérica da Curva de Resfriamento de um Liga Eutética", CNMAC-Uberlândia, MG, 1993.
- [15] LEWIS, E. E.; MILLER, W. F. "Computational Problems for Neutron Transport ", Jonh Wiley e Sons, Inc., 1984.
- [16] KURZ, W.; FISHER, D. J.; "Fundamentals of Solidification ", Trans Tech Publication, 1986
- [17] BROPHY, Jere H.; ROSE, Robert M.; WULF, John, "Thermodynamics of Structure ", volume II, Jonh Wiley e Sons, Inc., 1968.
- [18] CHURCHILL, Ruel V. "Operational Mathematics ", McGraw-Hill, 1958.
- [19] ANASTASSELOU, E. G.; IOAKIMIDIS, N. I., "A Generalization fo the Siewert-Burniston Method for the Determination or Zeros of Analytic Functions ", Journal of Mathmatical Physics, v. 25, pag. 2422-2425, 1984.

- [20] CUNHA, C.; VILOCHE, F., "The Laguerre Functions in the Inversion of the Laplace Transform ", *Inverse Problems*, pag. 57-68, 1993.
- [21] DAVIES, B.; MARTIN, B., "Numerical Inversion of the Laplace Transform: a Survey and Comparison of Methods ", *Journal of Computational Physics* , 33, pag. 1-32, 1979.
- [22] KOZAKEVICIUS, A. J.; VILHENA, M. T.; "Solução do Modelo Bidimensional de Solidificação de Liga Eutética usando transformada de Laplace ", CNMAC-Vitória, ES, 1994.
- [23] ZABADAL, J.; "Solução Analítica da Equação de Ordenadas Discretas Multidimensional ", Tese de Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, 1994.
- [24] DURBIN, F., "Numerical Inversion of Laplace Transforms: an Efficient Improvement to Dubner and Abate's Method ", *The Computer Journal*, v.17, nº 4, pag. 371-376, 1973.
- [25] SPIEGEL, Murray R. "Theory and Problems of Laplace Transforms ", McGraw-Hill, 1991, 23ª edição.
- [26] ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I.; "Handbook of Mathematical Functions, Applied Mathematics Series ", vol. 55, 1964, reedição 1968.
- [27] HEARN, A. C.; "REDUCE- User 's Manual, Version 3.4 ", Rand Publication CP78, Alemanha, 1991.
- [28] CHALMERS, Bruce, "Principles of Solidification " , Jonh Wiley e Sons, Inc. , 1964.
- [29] BUTKOV, Eugene, "Mathematical Physics ", Addison-Wesley, 1968.
- [30] OHNO, A.; "Solidificação dos Metais ", São Paulo, Livr. Ciência e Tecnologia, 1988

- [31] THOMAS, B. G.; SAMARASEKERA, I. V.; BRIMACOMBE, J. K.; "Comparison of Numerical Modeling Techniques for Complex, Two-Dimensional, Transient Heat-Conduction Problems ", Metallurgical Transactions B, vol. 15B, 1984.
- [32] CLYNE, T. W.; "Numerical Treatment of Rapid Solidification ", Metallurgical Transactions B, vol. 15B, 1984, pag. 369-381.
- [33] MILLER, L.; QUILICI, A.; "C Programming Language - an Applied Perspective ", John Wiley & Sons, Inc., 1987.
- [34] PIESENS, R.; HUYSMANS, R.; "Algorithm 619- Automatic Numerical Inversion of the Laplace Transform[D5] ", ACM Transactions on Mathematical Software, vol. 10, n°3, 1984, pag. 348-353.
- [35] LEWIS, R. W.; HINTON, E.; BETTESS, P.; SCHREFLER, B. A.; "Numerical Methods for Transient and Coupled Problems "; John Wiley & Sons Ltd, 1987, Capítulo 3.

Apêndice A

Funções de Bessel

Definições e Propriedades Elementares

A função de Bessel $J_\nu(z)$ é definida pela equação

$$J_\nu(z) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r \left(\frac{1}{2}z\right)^{\nu+2r}}{r! \Gamma(\nu+r+1)},$$

onde ν é um número real e z pode ser complexo, [26]. Esta função satisfaz a equação de Bessel de ordem ν :

$$\frac{d^2y}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dy}{dz} + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) y = 0. \quad (\text{A.1})$$

Caso ν não seja inteiro, $J_\nu(z)$ e $Y_\nu(z)$ são soluções linearmente independentes de (A.1), mas se ν é um número inteiro, n ,

$$J_n(z) = (-1)^n J_{-n}(z).$$

Para se ter uma segunda solução de (A.1), que seja válida para qualquer valor de ν , a função

$$Y_\nu(z) = \frac{J_\nu(z) \cos \nu\pi - J_{-\nu}(z)}{\text{sen } \nu\pi} \quad (\text{A.2})$$

é definida, e a função de ordem inteira é definida como sendo $\lim_{\nu \rightarrow n} Y_\nu(z)$. Com essa condição

$$\frac{1}{2}\pi Y_0(z) = \left\{ \ln\left(\frac{1}{2}z\right) + \gamma \right\} J_0(z) + \left(\frac{1}{2}z\right)^2 - \left(1 + \frac{1}{2}\right) \frac{\left(\frac{1}{2}z\right)^4}{(2!)^2} + \left(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3}\right) \frac{\left(\frac{1}{2}z\right)^6}{(3!)^2} - \dots,$$

onde $\gamma = 0,5772\dots$ é a constante de Euler.

Quando n for um número inteiro positivo, tem-se ainda:

$$\begin{aligned} \pi Y_n(z) = & 2 \left(\ln\left(\frac{1}{2}z\right) + \gamma \right) J_n(z) - \\ & - \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \left(\frac{1}{2}z\right)^{n+2r} \frac{1}{r!(n+r)!} \left[\sum_{m=1}^{n+r} m^{-1} + \sum_{m=1}^r m^{-1} \right] - \\ & - \sum_{r=0}^{n-1} \left(\frac{1}{2}z\right)^{-n+2r} \frac{(n-r-1)!}{r!}, \end{aligned}$$

sendo que para $r = 0$, considera-se $\left[\sum_{m=1}^{n+r} m^{-1} + \sum_{m=1}^r m^{-1} \right] = \sum_{m=1}^n m^{-1}$.

Outra maneira de se expandir as funções de Bessel é através de suas formulações integrais. Para $\nu = 0$ tem-se:

$$J_0(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(z \operatorname{sen} \theta) d\theta = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(z \cos \theta) d\theta,$$

$$Y_0(z) = \frac{4}{\pi^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos(z \cos \theta) \left\{ \ln(2z \operatorname{sen}^2 \theta) + \gamma \right\} d\theta.$$

E para ν qualquer, tem-se:

$$J_{\nu}(z) = \frac{\left(\frac{1}{2}z\right)^{\nu}}{\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma\left(\nu + \frac{1}{2}\right)} \int_0^{\pi} \cos(z \cos \theta) \operatorname{sen}^{2\nu} \theta d\theta$$

e

$$Y_{\nu}(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \operatorname{sen}(z \operatorname{sen}(\theta - \nu\theta)) d\theta - \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \left\{ e^{\nu t} + e^{-\nu t} \cos(\nu\pi) \right\} e^{-z \operatorname{senh} t} dt, \quad |\arg z| < \frac{1}{2}\pi.$$

Observa-se ainda que as funções de Bessel $J_{\nu}(z)$ e $Y_{\nu}(z)$ são funções regulares, holomorfas em z , para todo z pertencente ao plano complexo cortado ao longo do eixo real negativo.

A equação modificada de Bessel de ordem ν :

$$\frac{d^2 y}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dy}{dz} - \left(1 + \frac{\nu^2}{z^2} \right) y = 0. \quad (\text{A.3})$$

é satisfeita por:

$$I_\nu(z) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(\frac{1}{2}z)^{\nu+2r}}{r!\Gamma(\nu+r+1)}. \quad (\text{A.4})$$

Caso ν não seja um número inteiro, $I_{-\nu}(z)$ é uma solução linearmente independente de (A.4), mas para se obter uma segunda solução linearmente independente para qualquer valor de ν , define-se:

$$K_\nu(z) = \frac{1}{2}\pi \frac{I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)}{\text{sen } \nu\pi}, \quad (\text{A.5})$$

e a função K_n de ordem n é dada pelo $\lim_{\nu \rightarrow n} K_\nu(z)$. Com esta definição

$$K_0(z) = - \left\{ \ln\left(\frac{z}{2}\right) + \gamma \right\} I_0(z) + \left(\frac{z}{2}\right)^2 + \left(1 + \frac{1}{2}\right) \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^4}{(2!)^2} + \left(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3}\right) \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^6}{(3!)^2} + \dots$$

e quando n for qualquer um número inteiro positivo, tem-se:

$$\begin{aligned} K_n(z) = & (-1)^{n+1} \left(\ln\left(\frac{z}{2}\right) + \gamma \right) I_n(z) + \\ & + \frac{(-1)^n}{2} \sum_{r=0}^{\infty} \left(\frac{z}{2}\right)^{n+2r} \frac{1}{r!(n+r)!} \left[\sum_{m=1}^{n+r} m^{-1} + \sum_{m=1}^r m^{-1} \right] + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{r=0}^{n-1} (-1)^r \left(\frac{z}{2}\right)^{-n+2r} \frac{(n-r-1)!}{r!}, \end{aligned}$$

onde, para $r = 0$, o termo $\left[\sum_{m=1}^{n+r} m^{-1} + \sum_{m=1}^r m^{-1} \right]$ é substituído por $\sum_{m=1}^r m^{-1}$.

As soluções $I_\nu(z)$, $I_{-\nu}(z)$ e $K_\nu(z)$ são funções holomorfas de z no plano complexo cortado ao longo de eixo real negativo, e para cada $z (\neq 0)$, as funções são inteiras em ν . Quando $\nu = \pm n$, $I_\nu(z)$ é uma função inteira de z .

$I_\nu(z)$ ($\text{Re } z \geq 0$) é limitada ao $z \rightarrow 0$ em qualquer faixa limitada de $\arg z$. Já $K_\nu(z)$ tende a zero quando $|z| \rightarrow \infty$ no setor $|\arg z| < \frac{\pi}{2}$ e $I_{-\nu}(z)$ e $K_\nu(z)$ são funções reais positivas se $\nu > -1$ e $z > 0$.

Tem-se ainda as seguintes representações integrais:

$$I_0(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{\pm z \cos \theta} d\theta = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cosh(z \cos \theta) d\theta,$$

$$K_0(z) = -\frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{\pm z \cos \theta} \left\{ \gamma + \ln(2z \text{sen }^2 \theta) \right\} d\theta.$$

Para valores de ν , tais que $\text{Re } \nu > -\frac{1}{2}$, tem-se:

$$I_\nu(z) = \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^\nu}{\pi^{\frac{1}{2}}\Gamma\left(\nu + \frac{1}{2}\right)} \int_0^\pi e^{\pm z \cos \theta} \sin^{2\nu} \theta d\theta,$$

Para valores de ν , tais que $\text{Re } \nu > -\frac{1}{2}$, $|\arg z| < \frac{\pi}{2}$, tem-se:

$$K_\nu(z) = \frac{\pi^{\frac{1}{2}}\left(\frac{z}{2}\right)^\nu}{\Gamma\left(\nu + \frac{1}{2}\right)} \int_0^\infty e^{-z \cosh t} \sinh^{2\nu} t dt.$$

Algumas propriedades das funções de Bessel frequentemente utilizadas são as seguintes:

$$zI'_\nu(z) + \nu I_\nu(z) = zI_{\nu-1}(z),$$

$$zI'_\nu(z) - \nu I_\nu(z) = zI_{\nu+1}(z),$$

$$zK'_\nu(z) + \nu K_\nu(z) = -zK_{\nu-1}(z),$$

$$zK'_\nu(z) - \nu K_\nu(z) = -zK_{\nu+1}(z),$$

$$zJ'_\nu(z) + \nu J_\nu(z) = zJ_{\nu-1}(z),$$

$$zJ'_\nu(z) - \nu J_\nu(z) = -zJ_{\nu+1}(z).$$

A função $Y_\nu(z)$ satisfaz as mesmas relações que $J_\nu(z)$. No caso de $\nu = 0$, as relações tornam-se:

$$I'_0(z) = I_1(z), \quad K'_0(z) = -K_1(z),$$

$$J'_0(z) = -J_1(z), \quad Y'_0(z) = -Y_1(z).$$

$$J_\nu(z)Y'_\nu(z) - Y_\nu(z)J'_\nu(z) = \frac{2}{\pi z},$$

$$I_\nu(z)K'_\nu(z) - K_\nu(z)I'_\nu(z) = -\frac{1}{z},$$

$$I_\nu(z)K_{\nu+1}(z) + K_\nu(z)I_{\nu+1}(z) = \frac{1}{z},$$

$$J_\nu(ze^{m\pi i}) = e^{m\nu\pi i} J_\nu(z),$$

$$Y_\nu(ze^{m\pi i}) = e^{-m\nu\pi i} Y_\nu(z) + 2i \operatorname{sen} m\nu\pi \cot \nu\pi J_\nu(z),$$

$$K_\nu(ze^{\pm\frac{\pi i}{2}}) = \pm \frac{\pi i}{2} e^{\pm\frac{\pi i}{2}\nu} [-J_\nu(z) \pm iY_\nu(z)],$$

$$I_\nu(ze^{\pm\frac{\pi i}{2}}) = e^{\pm\frac{\pi i}{2}\nu} J_\nu(z),$$

$$K_{-\nu}(z) = K_\nu(z).$$

Apêndice B

Programa em REDUCE

O software REDUCE

REDUCE é um sistema que permite realizar, com grande precisão, operações algébricas, não importando o nível de dificuldade das expressões. Este *software* pode manipular polinômios de várias formas, expandindo ou fatorando seus termos ou, ainda, extraindo determinadas partes de sua expressão. REDUCE pode efetuar as operações de diferenciação ou integração, pode manipular matrizes e vetores e pode ainda ser considerado como uma linguagem de programação, onde o usuário pode definir suas próprias funções e expressões, interagindo com todos os recursos a disposição no sistema, ver [27].

Existe uma versão simplificada para o sistema operacional DOS, que pode ser rodada em micro computadores, e a versão 3.5 para o super computador CRAY Y-MP do Centro de Super Computação da UFRGS (CESUP). O programa está instalado no diretório '/appl / reduce ' do "Gauss ". Para utilizá-lo, deve-se definir a variável do sistema operacional 'reduce ' com o diretório de aplicação e, então, executar o programa.

O programa em REDUCE

O programa apresentado a seguir resolve algebricamente o sistema $MX=T$ (3.44) apresentado no capítulo 3. Este código foi escrito em REDUCE, versão para o super computador ("Gauss "), portanto algumas bibliotecas de funções especiais disponíveis no "Gauss " podem interagir com o software REDUCE e, assim, serem utilizadas em programas escritos em REDUCE.

Não será apresentada a matriz inversa M^{-1} , devido ao seu tamanho e por ser um passo intermediário na obtenção do vetor resposta X , cujos elementos são os coeficientes desejados.

```
on echo;
COMMENT Bessel Functions;
load_package specfn;
MATRIX A, AI, TB, B;
a11 := BESSELI(0,z1a) ;
a12 := -BESSELI(0,z2a) ;
a13 := -BESSELK(0,z2a) ;
a21 := ka1*BESSELI(1,z1a) ;
a22 := -ka2*BESSELI(1,z2a) ;
a23 := -ka2* BESSELK(1,z2a) ;
a31 := 0 ;
a32 := ka2*BESSELI(1,z2r) + hc*BESSELI(0,z2r) ;
a33 := ka2*BESSELk(1,z2r) + hc* BESSELK(0,z2r) ;
A := MAT( (a11,a12,a13) , (a21,a22,a23) , (a31,a32,a33) ) ;
AI := 1/A ;
TB := MAT( (b1,0,b3) ) ;
B := TP( TB ) ;
AI*B ;
bye;
```