

A interpolação Numérica de Terceira Ordem Aplicada na Resolução de Problemas das Engenharias via Modelagem Computacional

Denis Carlos Lima Costa¹, Maurício Maia Ribeiro², Hugo Carlos Machado da Silva³,
Heictor Alves de Oliveira Costa⁴, Lucas Pompeu Neves⁵

Resumo: Neste trabalho será apresentada uma estrutura computacional implementada em linguagem MATLAB, com a finalidade de auxiliar o estudo da difusão atômica no estado sólido em sistemas binários com fluxos atômicos unidirecional. Serão aplicados os conceitos sobre a interpolação spline cúbica e seu aperfeiçoamento computacional. Também será oferecida uma atualização sobre a difusão atômica e sobre as Leis de Fick, especialmente sobre a segunda. A segunda Lei de Fick será modelada em uma equação diferencial convertida e resolvida utilizando-se uma solução exata conhecida, baseada na função erro de Gauss. Nessa proposta, são determinadas as equações que representam a posição da interface de difusão em função do tempo e os perfis de concentrações de soluto em função da posição e do tempo, durante o processo. Posteriormente será exemplificado a aplicação da segunda Lei de Fick e realizado um estudo comparativo entre os cálculos convencionais e os cálculos realizados com o uso da rotina implementada em MATLAB para a determinação dos valores relacionados a função erro de Gauss, por via da interpolação spline cúbica. Os resultados revelaram que a ferramenta computacional é extremamente necessária para auxiliar professores, estudantes, pesquisadores e profissionais das Ciências de das Engenharias, pois torna a resolução mais versátil com resultados mais precisos, colaborando desta forma nos processos do ensino, da aprendizagem e da pesquisa.

Palavras chave: Comportamento de Difusão, Engenharia de Materiais, Linguagem de Programação, Mobilidade Atômica, Modelagem Matemática.

Third Order Numerical Interpolation Applied in Engineering Problem Solving via Computer Modeling

Abstract: In this work we will present a computational structure implemented in MATLAB language, to assist the study of solid state atomic diffusion in binary systems with unidirectional atomic fluxes. The concepts of cubic spline interpolation and its computational profiling will be applied. An update on atomic diffusion and Fick's Laws will be offered, especially on the second. Fick's second law will be modeled on a converted differential equation and solved using a known exact solution based on the Gauss error function. In this proposal, the equations that represent the position of the diffusion interface as a function of time and the solute concentration profiles as a function of position and time during the process are determined. Subsequently, the application of Fick's second law will be exemplified and a comparative study will be performed between the conventional calculations and the calculations performed using the routine implemented in MATLAB to determine the values related to the Gauss error function, via cubic spline interpolation. The results revealed that the computational tool is extremely necessary to assist professors, students, researchers and professionals of the Engineering Sciences, as it makes the resolution more versatile with more accurate results, thus collaborating in the teaching, learning and research processes.

Key-words: Diffusion Behavior, Materials Engineering, Programming Language, Atomic Mobility, Mathematical Modeling.

1. Introdução

A Matemática Aplicada é uma área em que importantes problemas das Ciências como Física, Química, Computação, Medicina, e principalmente, as Engenharias estão presenciando novas ferramentas e procedimentos a serem aplicados em suas pesquisas, melhorando as metodologias de ensino atuais e resolvendo novos desafios da aprendizagem.

Na área de sistemas não-lineares encontramos o manuscrito de Cordero et al. (2018a). Nele, os autores elaboram um método iterativo altamente eficiente de ordem oito para resolver sistemas não-lineares. O novo método mostra uma maior eficiência do que os métodos existentes, e é interessante o fato de que o experimento pode ser facilmente ampliado com a adição de novas etapas com a mesma estrutura e envolvendo apenas uma nova avaliação funcional.

De acordo com Cordero et al. (2018.b) são analisadas as anomalias dinâmicas de um sistema paramétrico de famílias de esquemas iterativos projetados por interpolação lineares. O estudo dos pontos fixos e sua estabilidade, articulados com os pontos críticos e seus planos de parâmetros associados, mostram a riqueza da classe e permitem que os autores encontrem resultados com excelentes propriedades numéricas, bem como outras com comportamento muito instável.

Costa et al (2019) propõem a Linguagem PYTHON de programação como ferramenta para a modelagem computacional, pois essa linguagem possui estruturas indicadas aos principais cálculos aplicados nas Engenharias. Nesse trabalho, os autores disponibilizam várias técnicas matemáticas aplicadas nas Engenharias.

A questão fundamental desse trabalho é possibilitar a resolução dos problemas numéricos a partir do processo de interpolação cúbica utilizando a linguagem de programação MATLAB. Sendo assim, tem por objetivo desenvolver uma rotina em MATLAB para calcular, mediante a interpolação *spline* cúbica, qualquer valor relacionado à função erro de Gauss (valores de erf e valores de z) e aplicá-lo nos cálculos de difusão atômica. Propõe-se criar uma ferramenta de interpolação, a fim de auxiliar na resolução de problemas relacionados à 2ª Lei de Fick, e dessa forma, obter uma resposta rápida e precisa dos valores da função erro de Gauss relacionados à difusão atômica.

2. Interpolação Numérica

Interpolação numérica é um método que permite construir um novo conjunto de dados a partir de um conjunto discreto de dados pontuais conhecidos. Nas Ciências e nas Engenharias dispõe-se, habitualmente, de dados pontuais obtidos a partir de uma amostragem ou experimento. Por intermédio da interpolação, pode-se construir uma função que aproximadamente se ajuste aos dados pontuais.

A interpolação é utilizada principalmente em duas situações: quando a expressão de $f(x)$ não é conhecida, ou seja, conhecem-se os valores numéricos de $f(x)$ para um conjunto discreto de pontos; ou quando se conhece a expressão algébrica da função $f(x)$, mas ela é muito complexa. Dessa forma, é satisfatório aproximá-la por um modelo matemático mais simples, mantendo a representatividade dos dados.

O problema geral da interpolação polinomial consiste em, dados $n + 1$ pontos distintos x_0, x_1, \dots, x_n e respectivos valores y_0, y_1, \dots, y_n em que $y_i = f(x_i)$, determinar um polinômio $p_n(x)$ de grau n tal que $p_n(x_i) = y_i, i = 0, \dots, n$.

2.1 Interpolação Segmentada ou *Spline*

A ideia desse trabalho é aplicar a interpolação segmentada (ou *spline*) onde se deveria aplicar diversos polinômios de baixo grau, em diferentes intervalos de pontos.

Especificamente Inicia-se com a aplicação das equações para os nós definido na interpolação, “Expressão para os Pontos Interiores (nó i)”:

$$\begin{aligned} (x_i - x_{i-1}) \cdot M_{x_{i-1}} + 2 \cdot (x_{i+1} - x_{i-1}) M_{x_i} + (x_{i+1} - x_i) \cdot M_{x_{i+1}} = \\ = \frac{6}{(x_{i+1} - x_i)} \times [f(x_{i+1}) - f(x_i)] - \frac{6}{(x_i - x_{i-1})} \times [f(x_i) - f(x_{i-1})] \end{aligned} \quad (1)$$

Definido o segmento ao qual o valor de x encontra-se, aplica-se a “Expressão Segmento i da *Spline* Cubica”, para $i = 1, \dots, n$:

$$\begin{aligned} S_3^i = \frac{M_{x_{i-1}}}{6 \cdot (x_i - x_{i-1})} \cdot (x_i - x)^3 + \frac{M_{x_i}}{6 \cdot (x_i - x_{i-1})} \cdot (x - x_{i-1})^3 + \\ + \left[\frac{f(x_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})} - \frac{M_{x_{i-1}} \cdot (x_i - x_{i-1})}{6} \right] \cdot (x_i - x) + \left[\frac{f(x_i)}{(x_i - x_{i-1})} - \frac{M_{x_i} \cdot (x_i - x_{i-1})}{6} \right] \cdot (x - x_{i-1}) \end{aligned} \quad (2)$$

3. Modelagem Computacional

A linguagem de programação MATLAB é uma das mais utilizadas nas Engenharias. Ela apresenta inúmeras funções interpolares baseadas em polinômios. Entre as existentes, esta pesquisa optou por utilizar o método de interpolação *spline* cúbica, pois essa modelagem emprega polinômios de terceira ordem, facilitando a otimização do sistema, pois, essa classificação de função apresenta mais de um ponto de inflexão, conforme Gilat (2008). Os coeficientes do polinômio são determinados utilizando-se os dados sobre os demais pontos adjacentes ao par de pontos em questão. As *splines* se tornam excelentes curvas interpoladoras, devido ao fato de serem bastante suaves e, além disso, são bastante viáveis computacionalmente porque não exigem a resolução de sistemas lineares muito grandes e também evitam certas oscilações indesejadas, que é o que ocorre quando se utilizam polinômios de graus maiores para efetuar a interpolação (COLNAGO, 2018).

Para exemplificar é considerado os dados obtidos da variação da densidade da água, com relação à temperatura, Tabela 1.

Temperatura (°C)	Densidade (g/cm ³)
-10	0,99815
0	0,99987
10	0,99973
20	0,99823
30	0,99567

Fonte: Colnago (2004).

Tabela 1 - Valores da densidade da água em função da temperatura.

Utilizando a linguagem MATLAB, cria-se a rotina de interpolação *spline* cúbica a fim de determinar valores de densidade para qualquer medida de temperatura dentro do segmento -10 °C a 30 °C. O algoritmo (disponível em <https://github.com/GM2SC/DEVELOPMENT-OF-MATHEMATICAL-METHODS-IN-COMPUTATIONAL-ENVIRONMENT/blob/master/CONBREPRO2019/temperatura.m>) estima o valor da densidade referente a um valor indicado para temperatura. Por exemplo, para 5 °C, foi calculado uma densidade de 0,99999813 g/cm³, cuja representação gráfica poderá ser observada na Figura 1.

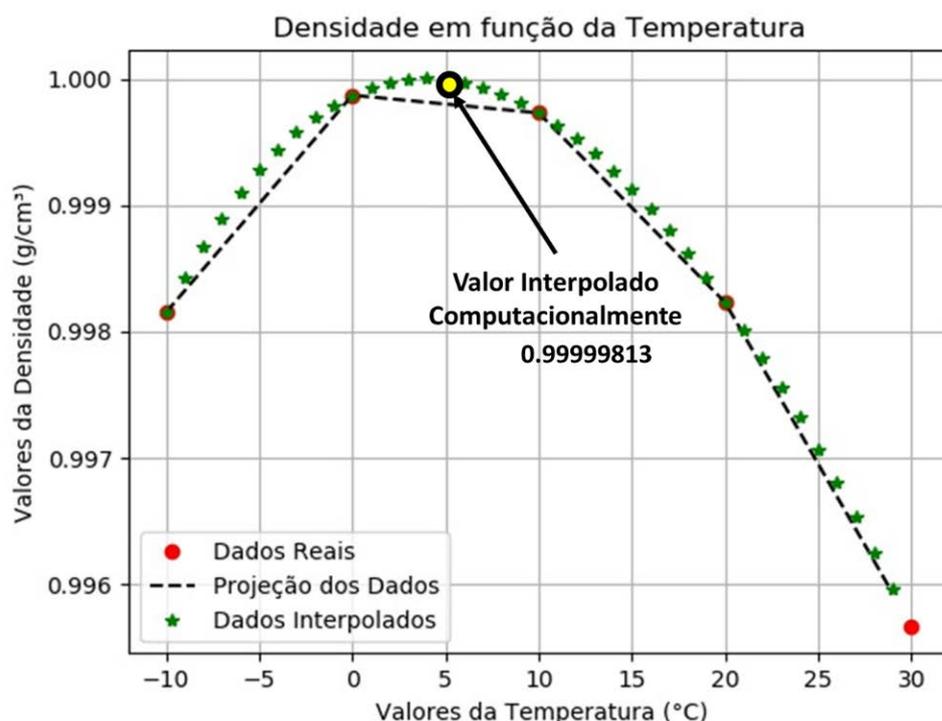


Figura 1 - Curva de interpolação *spline* cúbica para Temperatura X Densidade da água

4. Difusão Atômica

4.1. Mecanismo de Difusão Atômica

A difusão atômica pode ser considerada um movimento de átomos ou moléculas no interior de um sistema material, induzido pelo movimento de vibração dos mesmos, podendo provocar um transporte efetivo de massa (SANTOS, 2006). Não são considerados movimento

por difusão os movimentos de átomos ou moléculas que compõem gases e líquidos, provocados por movimentos dos fluidos.

4.2. Difusão em Regime Não Estacionário

Na prática são raros os casos em que a difusão atômica ocorre em regime permanente. Assim na maioria dos casos, o movimento atômico ocorre em regime transitório ou em situação onde as concentrações variam com o tempo.

4.3. Especificações das condições de contornos e a segunda Lei de Fick

Quando são especificadas as condições de contornos que possuem sentido físico, é possível obter soluções para essa expressão (segunda Lei de Fick), concentração em termos de posição e tempo. Como mostra Callister Jr. (2008) uma solução importante na prática é aquela para um sólido semi-infinito, no qual a concentração na superfície é mantida constante. Com frequência, a fonte da espécie em difusão é uma fase gasosa, cuja pressão parcial é mantida em um valor constante. Além disso, as seguintes hipóteses são adotadas:

1. Antes da difusão, todos os átomos do soluto em difusão que estiverem no sólido estarão uniformemente distribuídos e com uma concentração C_0 ;
2. O valor de x na superfície é zero e aumenta com a distância para o interior do sólido;
3. O tempo zero é tomado como o instante imediatamente anterior ao início do processo de difusão.

Essas condições de contorno são representadas de maneira simples como:

Para $t = 0 \rightarrow C = C_0$ em $0 \leq x \leq \infty$

Para $t > 0 \rightarrow C = C_s$ (a concentração constante na superfície)

em $x = 0 \rightarrow C = C_0$ em $x = \infty$

A aplicação dessas condições de contorno temos seguinte solução:

$$\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}}\right) \quad (3)$$

sendo C_x representa a concentração em uma profundidade x após um tempo t . A expressão $\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}}\right)$ é a função erro de Gauss, cujos valores são dados em tabelas matemáticas para diferentes valores de $\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}}\right)$; uma lista parcial é fornecida na Figura 2. A Equação $\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}}\right)$ demonstra, dessa forma, a relação entre a concentração, a posição e o tempo qual seja, que C_x , sendo uma função do parâmetro adimensional $\left(\frac{x}{\sqrt{D \cdot t}}\right)$, pode ser determinado em qualquer tempo e para qualquer posição se os parâmetros C_0 , C_s e D forem conhecidos (CALLISTER JR, 2008).

z	erf(z)	z	erf(z)	z	erf(z)
0	0	0,55	0,5633	1,30	0,9340
0,025	0,0282	0,60	0,6039	1,40	0,9523
0,05	0,0564	0,65	0,6420	1,50	0,9661
0,10	0,1125	0,70	0,6778	1,60	0,9763
0,15	0,1680	0,75	0,7112	1,70	0,9838
0,20	0,2227	0,80	0,7421	1,80	0,9891
0,25	0,2763	0,85	0,7707	1,90	0,9928
0,30	0,3286	0,90	0,7969	2,00	0,9953
0,35	0,3794	0,95	0,8209	2,20	0,9981
0,40	0,4284	1,00	0,8427	2,40	0,9993
0,45	0,4755	1,10	0,8802	2,60	0,9998
0,50	0,5205	1,20	0,9103	2,80	0,999

Fonte: Callister (2008).

Tabela 2 - Tabulações dos valores para a função erro de Gauss

5. Fatores que Influenciam a Difusão

A magnitude do coeficiente de difusão **D** é um indicativo da taxa na qual os átomos se difundem (VAN VLACK, 2004). As espécies em difusão, e o material hospedeiro influenciam o coeficiente de difusão. Por exemplo, existe uma diferença significativa de magnitude entre a autodifusão e a interdifusão do carbono no ferro α a 500 °C, sendo o valor de **D** maior para a interdifusão do carbono ($3,0 \times 10^{-21}$ contra $2,4 \times 10^{-12}$ m²/s).

A temperatura tem uma influência profunda sobre os coeficientes e as taxas de difusão. Por exemplo, para a autodifusão do Fe no Fe α , o coeficiente de difusão aumenta aproximadamente seis ordens de magnitude (de $3,0 \times 10^{-21}$ para $1,8 \times 10^{-15}$ m²/s) ao se elevar a temperatura de 500 °C para 900 °C. A dependência dos coeficientes de difusão em relação à temperatura ocorre pela relação à temperatura é dada por:

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{Q}{R \cdot T}\right) \quad (4)$$

D_0 = uma constante pré-exponencial independente da temperatura (m²/s)

Q = energia de ativação para a difusão (J/mol ou eV/átomo)

R = a constante dos gases, 8,31 J/mol · K ou $8,62 \times 10^{-5}$ eV/átomo · K

T = temperatura absoluta (K)

A energia de ativação pode ser considerada como a energia necessária para produzir o movimento difusivo de um mol de átomos. De acordo com Callister Jr. (2008) Uma energia de

ativação elevada resulta em um coeficiente de difusão relativamente pequeno. A Figura 3 também lista os valores de D_0 e Q para vários sistemas de difusão.

Soluto	Solvente	D_0 (cm^2/s)	Q (cal/mol)	Soluto	Solvente	D_0 (cm^2/s)	Q (cal/mol)	Soluto	Solvente	D_0 (cm^2/s)	Q (cal/mol)
Difusão intersticial				Autodifusão (em lacunas)				Difusão em lacunas			
Carbono	Ferro CFC	0,23	32.900	Chumbo	Chumbo CFC	1,27	25.900	Níquel	Cobre	2,3	57.900
Carbono	Ferro CCC	0,011	20.900	Alumínio	Alumínio CFC	0,10	32.200	Cobre	Níquel	0,65	61.500
Nitrogênio	Ferro CFC	0,0034	34.600	Cobre	Cobre CFC	0,36	49.300	Zinco	Cobre	0,78	43.900
Nitrogênio	Ferro CCC	0,0047	18.300	Ferro	Ferro CFC	0,65	66.700	Níquel	Ferro CFC	4,1	64.000
Hidrogênio	Ferro CFC	0,0063	10.300	Zinco	Zinco HC	0,1	21.800	Ouro	Prata	0,26	45.500
Hidrogênio	Ferro CCC	0,0012	3.600	Magnésio	Magnésio HC	1,0	32.200	Prata	Ouro	0,072	40.200
				Ferro	Ferro CCC	4,1	58.900	Alumínio	Cobre	0,045	39.500
				Tungstênio	Tungstênio CCC	1,88	143.300	Alumínio	Alumina	28,0	114.000
				Silício	Silício (covalente)	1800,0	110.000	Oxigênio	Alumina	1900,0	152.000
				Carbono	Carbono (covalente)	5,0	163.000	Magnésio	Óxido de magnésio	0,249	79.000
								Oxigênio	Óxido de Magnésio	0,000043	82.100

Fonte: Teófilo (2011).

Tabela 3 - Valores de Q e D_0 para sistemas mais comuns

6. Metodologia

Para exemplificar o uso da interpolação e a aplicação da Lei de Fick será apresentado um resolução a fim de destacar o nível de dificuldade e a quantidade de tempo dedicada à solução dos problemas das Ciências e das Engenharia.

6.1. Exemplo de Aplicação da Lei de Fick - Tempo de Cementação

Determinar o tempo necessário para que um aço contendo 0,2% em peso de carbono tenha, numa posição 2 mm abaixo da superfície, um teor de carbono de 0,45%. Durante o tratamento de cementação realizado a 1000 °C, o teor de carbono na superfície foi mantido em 1,3%.

Solução:

Condições estabelecidas:

Aço contendo 0,2% e peso de carbono

$x = 2$ mm (profundidade de penetração)

$C_x = 0,45\%$ de Carbono (concentração do elemento à distância (X) da superfície, no instante (t);

$C_s = 1,3\%$ de Carbono (concentração do elemento na superfície externa do sólido);

$C_0 = 0,2\%$ de Carbono (concentração inicial na superfície do sólido);

Temos, nesta condição, o enriquecimento da superfície em carbono, o tratamento de cementação dos aços por meio das equações da difusão envolve o emprego da função erro, desta forma a solução aplicável é a da segunda Lei de Fick e que é dada pela Equação (3) em combinação com a Equação (4), assim temos:

A temperatura de 1000 °C o aço contendo 0,2% C em peso e o ferro γ (Austenita e estrutura cristalina CFC). Na figura 3.29, obtemos os valores de :

$$D_0 = 0,23 \text{ cm}^2/\text{s} = 2,3 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s} \quad Q = 32900 \text{ cal/mol}$$

É conhecido os valores de :

$$R = 1,987 \text{ cal/mol.K} \quad T = 1000 \text{ }^\circ\text{C} = 1273 \text{ K}$$

Substituindo na equação do Coeficiente de Difusão, temos:

$$D = 5,16^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$$

Substituindo todos os valores encontrados , temos:

$$\frac{Cx - C_0}{C_S - C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D.t}}\right) \quad \operatorname{erf}\left(\frac{2 \cdot 10^{-3}}{2\sqrt{5,16 \cdot 10^{-11} \cdot t}}\right) = 0,772$$

Para encontrar o valor de z , devemos consultar a Tabela 4 e extrair valores extremos próximos a $\operatorname{erf}(z) = 0,7720$. Obtemos os valores, por intervenção da interpolação, para determinar o valor de z . Aplicou-se a modelagem de interpolação spline cúbica para $\operatorname{erf}(z) = 0,7720$, referente a 5 nós.

x_0	$\operatorname{erf}(z)_0$	0,7421	f_0	z_0	0,80
x_1	$\operatorname{erf}(z)_1$	0,7707	f_1	z_1	0,85
x	$\operatorname{erf}(z)$	0,7720	f	z	?
x_2	$\operatorname{erf}(z)_2$	0,7969	f_2	z_2	0,90
x_3	$\operatorname{erf}(z)_3$	0,8209	f_3	z_3	0,95
x_4	$\operatorname{erf}(z)_4$	0,8427	f_4	z_4	1,00

Tabela 4 - Valores de $\operatorname{Erf}(z)$ e z para aplicação da interpolação.

Inicia-se a resolução pelo cálculo das equações para 3 nós, utilizando a “Expressão para os Pontos Interiores (nó i) Equação (1)”, obtém-se:

Para $i = 2$

$$(0,0286) \cdot M_0 + (0,1096) \cdot M_1 + (0,0262) \cdot M_2 = 0,9608$$

Para $i = 2$

$$(0,0262) \cdot M_1 + (0,1004) \cdot M_2 + (0,0240) \cdot M_3 = 1,0497$$

Para $i = 3$

$$(0,0321) \cdot M_2 + (0,0916) \cdot M_3 + (0,0218) \cdot M_4 = 1,2614$$

O resultado é um sistema de três equações e cinco incógnitas. No entanto como se trata de uma *spline* cúbica natural, a concavidade é nula nos nós de fronteira $M_0 = 0$ e $M_4 = 0$, originando um sistema com três equações e três incógnitas:

$$\begin{array}{l} (0,0286) \cdot M_0 + (0,1096) \cdot M_1 \\ \quad + (0,0262) \cdot M_2 = 0,9608 \\ (0,0262) \cdot M_1 + (0,1004) \cdot M_2 \\ \quad + (0,0240) \cdot M_3 = 1,0497 \\ (0,0321) \cdot M_2 + (0,0916) \cdot M_3 \\ \quad + (0,0218) \cdot M_4 = 1,2614 \end{array} \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{l} (0,1096) \cdot M_1 + (0,0262) \cdot M_2 \\ \quad + (0) \cdot M_3 = 0,9608 \\ (0,0262) \cdot M_1 + (0,1004) \cdot M_2 \\ \quad + (0,0240) \cdot M_3 = 1,0497 \\ (0) \cdot M_1 + (0,0321) \cdot M_2 \\ \quad + (0,0916) \cdot M_3 = 1,2614 \end{array}$$

Resolvendo o sistema linear por EGPP (Eliminação de Gauss com Pivotagem Parcial), obtemos:

$$\begin{pmatrix} 0,1096 & 0,0262 & 0 & 0,9608 \\ 0,0262 & 0,1004 & 0,0240 & 1,0497 \\ 0 & 0,0321 & 0,0916 & 1,2614 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0,1096 & 0,0262 & 0 & 0,9608 \\ 0 & 0,0942 & 0,0240 & 0,8201 \\ 0 & 0 & 0,0835 & 0,9820 \end{pmatrix}$$

Encontramos os valores das incógnitas M_1 , M_2 e M_3 , respectivamente:

$$M_1 = 7,4015$$

$$M_2 = 5,7096$$

$$M_3 = 11,7604$$

Observa-se que temos 4 segmentos e o valor de $\text{erf}(z) = 0,7720$; encontra-se no segundo segmento, logo deve –se utilizar $i = 2$ na “Expressão Segmento i da Spline Cubica”:

erf (z)	0,7421	0,7707	0,7720	0,7969	0,8209	0,8427
z	0,80	0,85	z	0,95	0,95	1,00

Tabela 5 - Exemplo de interpolação

Expressão Segmento i da Spline cúbica, conforme Equação (2):

Para $i = 2$, temos:

$$S_3^2 = \frac{M_1}{6.(x_2 - x_1)} . (x_2 - x)^3 + \frac{M_2}{6.(x_2 - x_1)} . (x - x_1)^3 +$$

$$+ \left[\frac{f_1}{(x_2 - x_1)} - \frac{M_1.(x_2 - x_1)}{6} \right] . (x_2 - x) + \left[\frac{f_2}{(x_2 - x_1)} - \frac{M_2.(x_2 - x_1)}{6} \right] . (x - x_1)$$

Substituindo os valores, temos:

$$S_3^2 = z = 0,852326$$

Igualando z na equação, encontramos t solicitado no exemplo:

$$\left(\frac{2.10^{-3}}{2\sqrt{5,16.10^{-11}.t}} \right) = 0,852326 \quad t = 7,4 \text{ horas} \quad \text{ou} \quad t = 7 \text{ horas e } 24 \text{ min}$$

“O tempo necessário para que a cementação ocorra dentro das condições é de 7 horas e 24 minutos.”

6.2. Aplicação do Modelo Computacional na Lei de Fick

Para a resolução dos exemplos citados no item 6.1 (Exemplo de Aplicação da Lei de Fick) utilizando a linguagem MATLAB, criou-se um programa para interpolação *spline* cubica e desta forma é possível determinar qualquer valor de **erf(z)** e de **z**, conforme os *scripts* **calculoerf** e **calculoiz**, implementados para estimar essas grandezas mediante a interpolação *spline* cúbica e plotar os seus respectivos gráficos: **z** em função de **erf(z)**, Figura 2 e **erf(z)** em função de **z**, Figura 3.

Os *scripts* foram publicados na plataforma GitHub e estão disponibilizados em:

calculoerf →

<https://github.com/GM2SC/DEVELOPMENT-OF-MATHEMATICAL-METHODS-IN-COMPUTATIONAL-ENVIRONMENT/blob/master/CONBREPRO2019/calculoerf.m>

calculoiz →

<https://github.com/GM2SC/DEVELOPMENT-OF-MATHEMATICAL-METHODS-IN-COMPUTATIONAL-ENVIRONMENT/blob/master/CONBREPRO2019/calculoiz.m>

7. Resultados

Conforme o programa, para a determinação de z deve ser inserido o valor de $\text{erf}(z)$ na janela de comando, onde inicialmente são fornecidos os números de vetores para $\text{erf}(z)$ e para z , que equivale a 36, para ambos. O valor utilizado de $\text{erf}(z) = 0.7720$ é inserido e logo em seguida calculado $z = 0.85236971$ pelo MATLAB. Observa-se que para o valor de $\text{erf}(z) = 0.7720$ o valor de z calculado matematicamente e calculado via MATLAB possuem valores próximos ($z = 0.852326$ modo manual e $z = 0.85236971$ pelo MATLAB), no entanto a velocidade da resposta computacional é muito elevada, além de fornecer maior confiabilidade, e desta forma o usuário ganha tempo para fazer as análises dos resultados ao invés de dedicar muito tempo fazendo o cálculo “manualmente”. Após o cálculo de z a rotina possibilita a plotagem do gráfico da interpolação *spline* cubica, definindo todos os pontos de z em função de $\text{erf}(z)$.

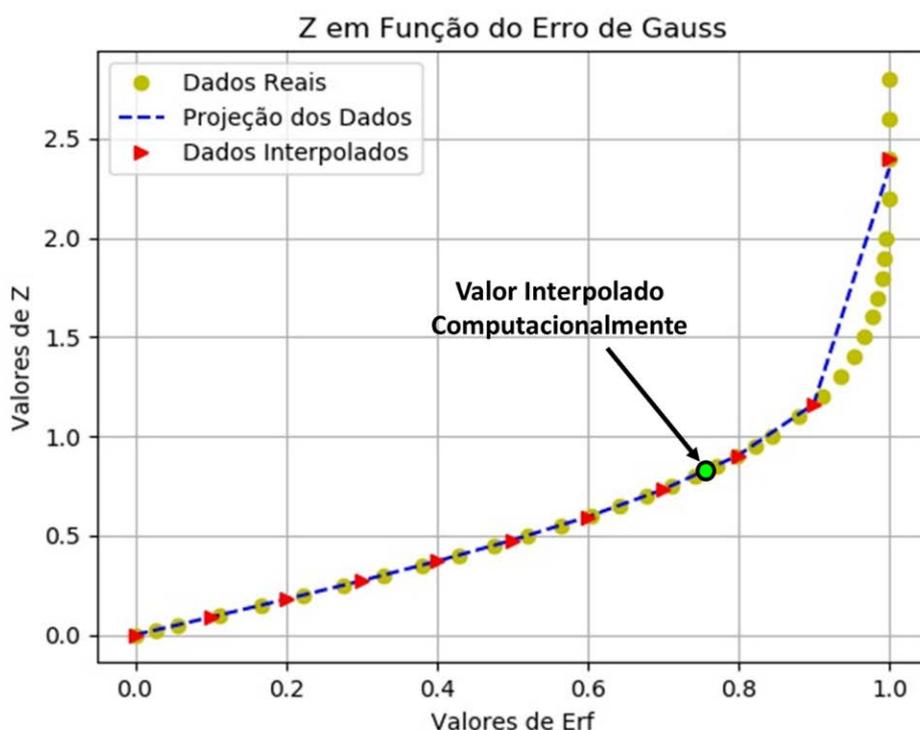


Figura 2 - Curva de interpolação *spline* cúbica de z em função de erf

Analogamente, para a determinação de erf deve ser inserido o valor de z na janela de comando, onde inicialmente são fornecidos os números de vetores para z e para $\text{erf}(z)$, que equivale a 36, para ambos. O valor utilizado de $z = 0.73$ é inserido e logo em seguida calculado $\text{erf}(z) = 0.69813992$ pelo MATLAB. Após a simulação computacional de $\text{erf}(z)$ a rotina possibilita a plotagem do gráfico da interpolação *spline* cubica, definindo todos os pontos de erf em função de z .

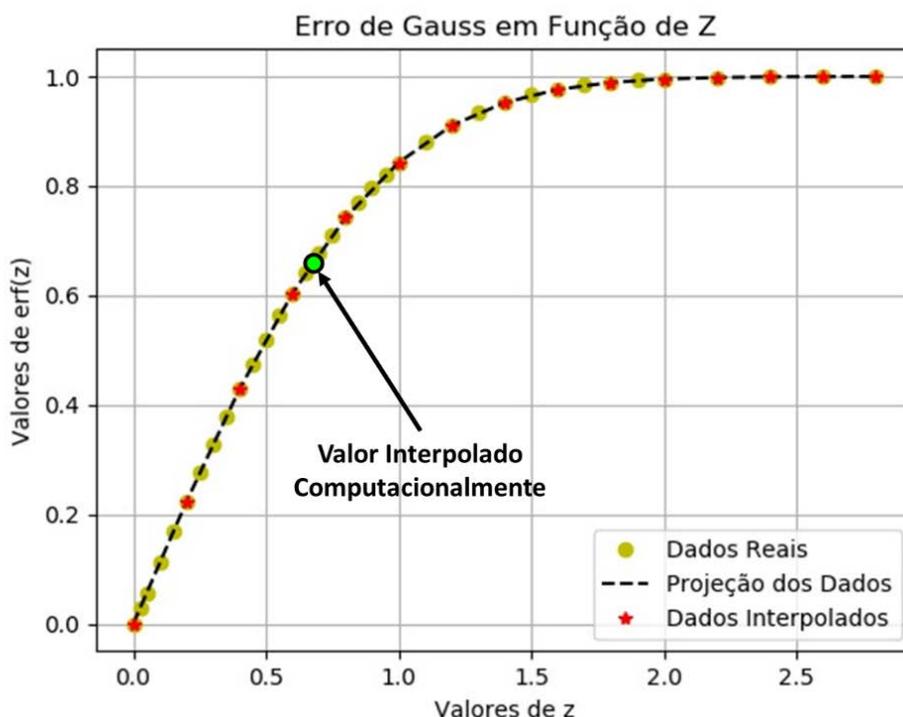


Figura 3 - Curva de interpolação *spline* cúbica de erf em função de z

8. Conclusões

Com o crescimento acelerado das ferramentas computacionais, os atuais professores/pesquisadores não podem ignorar as influências e o impacto dessas tecnologias nos processos de ensino, de aprendizagem e nas pesquisas. A utilização destas ferramentas por docentes contribuirá amplamente à evolução científica dos alunos. As facilidades e vantagens trazidas pelos aplicativos computacionais no ensino e na pesquisa aumentam a motivação e o aprendizado, e conseqüentemente resultam num maior rendimento dos alunos e do resultado das pesquisas. A rotina em linguagem MATLAB para calcular, via interpolação *spline* cúbica, qualquer valor relacionado à função erro de Gauss (valores de erf e valores de z) e aplicá-lo nos cálculo de difusão atômica mostra-se satisfatória e robusta na resolução de problemas relacionados à 2ª Lei de Fick, obtendo uma resposta rápida dos valores da função erro de Gauss (valores de erf e valores de z), além de ajudar estudantes de Engenharias e das Ciências Naturais no cálculo relacionado a difusão atômica. Com a automatização da resolução numérica, os pesquisadores poderão dedicar mais tempo para analisar os resultados e ter maior precisão na tomada de decisão. Por conseguinte, a construção científica se desenvolverá com um maior nível de integralização de conhecimentos.

Referências

ASKELAND, D.R.; PHULE, P.P. **Ciência e Engenharia dos Materiais**. 1ªEd. São Paulo: Editora Cengage Learning, 2008.

CALLISTER JR., W.D. **Ciência e Engenharia de Materiais: uma Introdução**. 7ª Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2008.

COLNAGO, G. R.; MESSIAS, M. **Interpolação de Dados por Spline Cúbica Utilizando o Software MATLAB**. Disponibilizado no seguinte link: <www.sbmac.org.br/cnmacs/2004/cd_cnmac/files_pdf/10082a.pdf>. Acesso em: 06 de junho. 2018, 20:00.

COSTA, Denis C. L., COSTA, Heictor A. de O., NEVES, Lucas P. Métodos Matemáticos Aplicados nas Engenharias via Sistemas Computacionais. Coleção I – SINEPEM 2019. Copyright @ 2019 by SINEPEM 1ª edição. Belém – Pará – Brasil.

CORDERO, A.; GUASP, L.; TORREGROSA, J.R. **Choosing the most stable members of Kou's family of iterative methods**, J. Comput. Appl. Math. 330 (2018.b) 758–768.

CORDERO, A; JORDÁN, C.; SANABRIA-CODESAL, E.; TORREGROSA, J.R. **Highly efficient iterative algorithms for solving nonlinear systems with arbitrary order of convergence** p + 3, $p \geq 5$, J. Comput. Appl. Math. 330 (2018.a) 747–757.

GILAT, A. **MATLAB com Aplicações em Engenharia**. 2ªEd. Porto Alegre: Bookman, 2008.

R.E. Reed-Hill. **Princípios de Metalurgia Física**. 2ªEd. Rio de Janeiro: Editora Guanabara Dois S.A., 1978.

SANTOS, R.G. **Transformação de Fases em Materiais Metálicos**. 1ª Ed. São Paulo: Editora UNICAMP, 2006.

TÉOFILO, J. **Apostila de Estruturas e Propriedades dos Materiais – Difusão Atômica**. Disponível em: < <https://jorgeteofilo.files.wordpress.com/2011/08/epm-apostila-capitulo081.pdf> >. Acesso em: 06 de Junho. 2018, 17:00.

VAN VLACK, L.H. **Princípio de Ciências dos Materiais**. 3ªEd. São Paulo: Edgard Blucher, 2004.