

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR E MASSA  
NA SOLIDIFICAÇÃO DE LIGAS BINÁRIAS

TESE DE DOUTORADO

AUTOR : HORÁCIO ANTONIO VIELMO  
ORIENTADOR : ALVARO TOUBES PRATA

FLORIANÓPOLIS, DEZEMBRO DE 1993

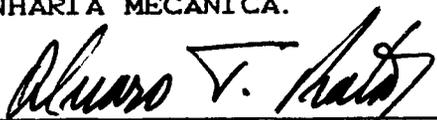
SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR E MASSA  
NA SOLIDIFICAÇÃO DE LIGAS BINÁRIAS

HORÁCIO ANTONIO VIELMO

ESTA TESE FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE

DOCTOR EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECANICA, AREA DE CONCENTRAÇÃO FLUIDOS,  
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM  
ENGENHARIA MECANICA.

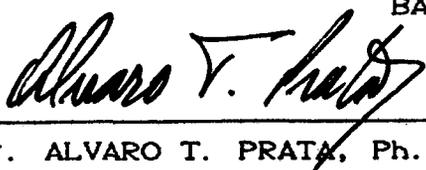


Prof. ALVARO T. PRATA, Ph.D.  
Orientador



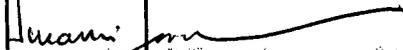
Prof. BEREND SNOEIJER, Dr.-Ing.  
Coordenador do Curso

BANCA EXAMINADORA



Prof. ALVARO T. PRATA, Ph.D.  
Presidente

Presidente



Prof. AMAURI GARCIA, Dr.Eng.  
UNICAMP

UNICAMP



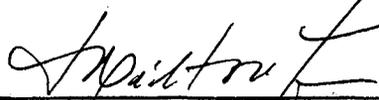
Prof. A. FABIO C. DA SILVA, Dr.Eng.  
UFSC

UFSC



Prof. ARNO MÜLLER, Dr.Eng.  
UFRGS

UFRGS



Prof. MILTON A. ZARO, Dr.Eng.  
UFRGS

UFRGS



Prof.a. INGEBORG K. ARROYO, Dr.Eng.  
UFSC

UFSC

Dedico com amor este trabalho aos meus filhos, Antônio e Roberto, esperando que eles um dia o reconheçam como mais um passo de nossa evolução familiar.

Dedico com amor este trabalho à minha esposa, Lolo, que junto comigo empreendeu o grande crescimento destes últimos anos.

Muito obrigado Alvaro Prata, meu generoso orientador, exemplo e incentivo.

## AGRADECIMENTOS

Aos meus pais e demais familiares pelo grande incentivo.

Aos professores do CPGEM/UFSC pelo precioso conhecimento transmitido.

Aos colegas professores do DEMEC/UFRGS, especialmente ao Prof. Milton A. Zaro, pelo imprescindível apoio.

Aos colegas de curso pela ajuda e laços de amizade firmados.

A nação brasileira que com seu trabalho financiou minha formação profissional.

## RESUMO

A presente tese trata da modelagem numérica do problema da solidificação de ligas binárias, especialmente as metálicas. Procura-se focar o problema tanto do ponto de vista metalúrgico como do ponto de vista de engenharia e ciências térmicas. Inicialmente aspectos gerais associados aos mecanismos de transferência de calor e massa na solidificação são abordados e diferentes formulações são revistas e apresentadas de forma detalhada. Os modelos clássicos que possuem soluções analíticas são revisados e discutidos em detalhe, culminando com o método integral. Já no âmbito dos métodos numéricos são apresentadas e discutidas formulações para os problemas de Stefan e Neumann, tanto em temperatura como em entalpia. Também são abordadas formulações capazes de considerar o movimento da fase líquida. Após a análise de substâncias puras e ligas eutéticas, passa-se às ligas que solidificam ao longo de uma faixa de temperaturas. Visando ilustrar o problema da solidificação sob o ponto de vista metalúrgico, aspectos específicos neste contexto são explorados. A seguir é apresentado em forma detalhada um modelo que representa o estado da arte para a solidificação de misturas binárias. Limitações do modelo são apontadas, dentre as quais a hipótese simplificativa da existência de equilíbrio termodinâmico entre as fases, prejudicando um tratamento mais detalhado da interface. É proposto um modelo difusivo onde as fases sólida e líquida são tratadas de forma distinta, permitindo a não adoção da hipótese de equilíbrio termodinâmico entre as fases. O modelo

é adequado para a simulação da transferência de calor e massa na solidificação direcional, mesmo em condições de elevada taxa de solidificação onde a interface entre as fases não é plana. A abordagem numérica baseia-se na metodologia de volumes finitos e todos os detalhes associados à discretização das equações diferenciais do problema são apresentados. São realizadas simulações com as ligas chumbo-estanho e alumínio-cobre. Os resultados destas simulações, tais como a composição final da peça, o tempo necessário para a solidificação, as velocidades de avanço da interface ao longo do processo e as frações de sólido  $\alpha$  e sólido  $\beta$ , no caso da formação de eutético, são mostrados e discutidos. Finalmente analisa-se a influência sobre a solidificação da variação do grau de superaquecimento inicial da liga e do coeficiente de troca de calor aplicado na fronteira.

## ABSTRACT

The subject of the present thesis is the numerical modelling of the binary alloy solidification problem, with emphasis on metallic alloys. The problem is approached on the metallurgical and on the engineering and thermal sciences point of view. First general aspects associated with the heat and mass transfer mechanisms are treated, and different formulations are revised and presented in detail. The classical models with their analytical solutions are revised and discussed, culminating with the integral method. Under the scope of numerical methods, the Stefan and Neumann problems are presented in temperature and enthalpy formulations. The natural convection in the liquid phase is also considered. Once pure substances and eutectic alloys are explored, those mixtures that change phase in a temperature range are focused, including the metallurgical aspects of their solidification. Next, a complete model representing the state of art for the binary alloy solidification is presented. Some limitations of this model are pointed out, including the hypothesis of thermodynamical equilibrium between phases, impairing the treatment in detail of the solid-liquid interface. A diffusive model is then proposed where the solid and liquid phases are treated separately, not adopting the hypothesis of thermodynamical equilibrium between phases. The model is able to simulate the heat and mass transfer in directional solidification, including high rates of solidification where the interface between phases is not planar. The numerical approach are based on the finite volume methodology and the details

associated with the discretization of the differential equations are presented. Simulations for the Pb-Sn and Al-Cu alloys are performed. Results such as the final composition of the solidifying body, the overall solidification time, interface speed along the solidification process and the fractions of  $\alpha$  and  $\beta$  solid, in the eutectic case, are presented and discussed. The consequences for the solidification process of the alloy's initial superheating degree and cooling situations are also explored.

## ÍNDICE

SIMBOLOGIA.....	XIII
1 INTRODUÇÃO.....	1
1.1 Fusão e solidificação.....	1
1.2 Solidificação em metalurgia.....	2
1.3 Armazenamento de energia com mudança de fase.....	4
1.4 Escopo da tese.....	6
2 OS PROBLEMAS DE STEFAN E NEUMANN NA FUSÃO E SOLIDIFICAÇÃO....	9
2.1 O problema de Stefan.....	9
2.2 O problema de Neumann.....	15
2.3 O método integral.....	19
2.4 Os métodos numéricos.....	25
2.4.1 O problema de Stefan com formulação em temperatura...	26
2.4.2 O problema de Neumann com formulação em temperatura..	35
2.4.3 Os problemas de Stefan e Neumann com formulação em entalpia.....	48
3 MUDANÇA DE FASE EM PRESENÇA DE CONVECÇÃO NATURAL.....	57
3.1 Introdução.....	57
3.2 Formulação em temperatura.....	58
3.3 Formulação em entalpia.....	66
3.4 Mudança de fase ao longo de uma faixa de temperaturas...	73

4	ASPECTOS METALÚRGICOS DA SOLIDIFICAÇÃO.....	76
4.1	Introdução.....	76
4.2	Microestrutura da solidificação.....	76
4.3	Formação dos núcleos.....	81
4.4	Modelagem utilizada.....	82
4.4.1	O modelo de Schwarz.....	83
5	MUDANÇA DE FASE EM LIGAS BINÁRIAS.....	90
5.1	Introdução.....	90
5.2	Modelo contínuo.....	92
5.2.1	Método de solução.....	112
5.3	Analogias entre ligas metálicas e soluções aquosas.....	119
6	MODELO EM DUAS FASES PARA LIGAS BINÁRIAS.....	121
6.1	Introdução.....	121
6.2	Problema térmico.....	124
6.3	Problema mássico.....	128
6.4	Método de solução.....	130
6.4.1	Concentração eutética alcançada ao longo da solidificação.....	144
6.4.2	Algoritmo de solução.....	147
7	SOLIDIFICAÇÃO UNIDIRECIONAL DE LIGAS METÁLICAS.....	149
7.1	Introdução.....	149
7.2	Validação da metodologia desenvolvida neste trabalho...152	
7.3	Comparação com a solução de Smith, Tiller e Rutter.....	154
7.4	Solidificação de algumas ligas usuais.....	157
7.5	Comentários finais.....	170

8 CONCLUSÕES.....171  
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....173  
BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR.....181  
APÊNDICE.....191

## SIMBOLOGIA

a	coeficiente na equação geral de transporte
A	área
b	constante no termo fonte da equação geral de transporte
B	força de corpo na equação geral de transporte
Bi	número de Biot [ $hL/k$ ]
c	capacidade calorífica ou calor específico ou concentração
C	constante
D	coeficiente de difusão ou fluxo difusivo
$\dot{E}$	produção de energia
f	fração em massa (concentração)
$\bar{f}$	fração em massa média
F	força ou fluxo convectivo
FG	fator geométrico
Fo	número de Fourier [ $\alpha t/L^2$ ]
g	aceleração da gravidade ou fração em volume
$\dot{G}$	produção de quantidade de movimento
h	coeficiente de troca de calor por convecção ou entalpia específica
$\hat{h}$	coeficiente de troca de calor por convecção através da interface sólido-líquido
I	termos interfaciais sólido-líquido
i	vetor de base unitário na direção x
j	vetor de base unitário na direção y
J	fluxo total de energia através das faces de um volume de controle
J	vetor fluxo
k	condutividade térmica
K	permeabilidade ou fase de uma substância (s - sólido, l - líquido)
Ko	constante dependente da morfologia na equação da permeabilidade
Kp	razão de partição entre fases
L	dimensão característica de um sistema

máx [a,b]	assume o maior valor entre a e b
$\dot{m}, M$	fluxo de massa ou produção ou destruição de espécies em uma fase
m	parâmetro no modelo de Schwarz $[(k_l/k_e)\sqrt{\alpha_s/\alpha_l}]$
M	parâmetro no modelo de Schwarz $[(k_e/k_m)\sqrt{\alpha_m/\alpha_s}]$
n	localizador de um certo volume na malha
$\mathbf{n}$	vetor unitário normal a uma superfície
N	número de grãos
p	pressão
Pe	número de Peclet $[\rho u L / \Gamma]$
Pr	número de Prandtl $[\mu c_p / k]$
Q	calor total trocado
$\mathbf{r}$	vetor posição
Ra	número de Rayleigh $[g \beta (T_p - T^*) \delta^3 Pr / \nu^2]$
S	termo da função proposta para $T_k$ na formulação em entalpia ou termo fonte na equação geral de transporte
$\bar{S}$	termo fonte na equação geral de transporte, já integrado ao longo de um volume de controle
Ste	número de Stefan $[c(T_p - T^*) / \lambda]$
s	tensor tensão
t	tempo
$t$	componente de cisalhamento do tensor tensão
T	temperatura
u	velocidade cartesiana na direção x
U	coeficiente de troca de calor
v	velocidade cartesiana na direção y
V	velocidade de avanço da interface sólido-líquido ou grupo que varia a cada iteração, no modelo proposto no capítulo 5
$\mathbf{V}$	vetor velocidade
$\bar{V}$	volume de controle fixo e arbitrário
x, y	direções do sistema cartesiano de coordenadas
X	coordenada dimensional $[x/L]$
X	fração de concentração

## LETRAS GREGAS

- $\alpha$  difusividade térmica [ $k/\rho c$ ] ou constituinte de uma mistura ou coeficiente de relaxação ou uma das fases sólidas de um eutético
- $\beta$  parâmetro da solução do problema de Stefan pelo método integral [ $1 \pm \sqrt{1 + 2Ste}$ ] ou coeficiente de expansão volumétrica ou uma das fases sólidas de um eutético
- $\delta$  deslocamento ou posição da frente de fusão-solidificação
- $\Delta$  diferença finita ou coordenada adimensional [ $\delta/L$ ]
- $\phi$  variável dependente na equação geral de transporte
- $\Gamma$  parâmetro da solução dos problemas de Neumann e Schwarz [ $\sqrt{\alpha s/\alpha l}$ ] ou coeficiente de difusão na equação geral de transporte ou coeficiente na função proposta para  $T_k$  na formulação em entalpia
- $\eta$  coordenada adimensional [ $x/\delta = X/\Delta$  ou  $(r - r_o)/(r_i - r_o)$ ] ou variável muda de integração
- $\psi$   $h_s - h$  na equação da energia e  $f_l^\alpha - f^\alpha$  na equação das espécies
- $\lambda$  calor latente de fusão
- $\mu$  viscosidade absoluta
- $\nu$  viscosidade cinemática [ $\mu/\rho$ ]
- $\theta$  nova variável para temperatura [ $T - T^*$ ] ou [ $(T - T^*)/(T_p - T^*)$ ] ou [ $(T - T^*)/(T_\infty - T^*)$ ] ou [ $(T_v - T^*)/(T^* - T_o)$ ]
- $\rho$  densidade
- $\bar{\rho}$  densidade parcial
- $\tau$  tempo adimensional [ $Fo Ste$ ]
- $\Omega$  constante nos problemas de Stefan, Neumann e Schwarz [ $\delta/2\sqrt{\alpha t}$ ]
- $\xi$  coordenada adimensional [ $z/r_o$ ]

## SUBINDICES

- c constante
- o estado inicial ou de referência
- E volume de controle vizinho ao leste em uma malha
- e face leste de um volume de controle ou zona esponjosa de uma liga ou eutético
- f fusão
- i interface
- I estado inicial
- j refere-se a um certo volume da malha
- k temperatura de Kirchhoff
- K fase sólida, líquida ou mistura
- l líquido
- liq linha do líquido no diagrama de fases
- m, M mistura ou fusão ou molde
- me modelo exato para o problema de Stefan
- N ponto de referência ou volume de controle vizinho ao norte em uma malha
- n face norte de um volume de controle
- p placa que cede ou recebe calor, ou ponto central de um volume de controle
- r relativo
- ref valor de uma variável na temperatura de referência
- S volume de controle vizinho ao sul em uma malha
- s sólido ou face sul de uma malha
- sol linha do sólido no diagrama de fases
- t total
- v vazamento
- w volume de controle vizinho ao oeste em uma malha
- v face oeste de um volume de controle
- x direção do eixo x
- y direção do eixo y
- ∞ local de referência de um processo

## SUPERÍNDICES

- c convecção ou parcela convectiva
- D difusão ou parcela difusiva
- D<sub>a</sub> referente à equação de Darcy
- α constituinte de uma substância composta
- \* ponto de fusão ou iteração anterior
- o intervalo de tempo anterior ou estado inicial
- 1/2 metade de um incremento de tempo

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 FUSÃO E SOLIDIFICAÇÃO

A fusão e a solidificação são mecanismos de transferência de calor por mudança de fase presentes em inúmeras situações, desde o processo de fabricação por fundição de um metal até a cotidiana confecção de um cubo de gelo num congelador doméstico. É importante observar que quase todos os objetos feitos pelo homem envolvem, direta ou indiretamente, fusão e solidificação em algum estágio de sua fabricação.

O entendimento e a possibilidade de simular os fenômenos físicos que ocorrem na fusão e na solidificação, são de primordial importância em diversos processos de interesse tecnológico, tais como fundição, solidificação rápida, soldagem, purificação de metais, crescimento de cristais, armazenamento de energia em forma latente, etc.

Os problemas de mudança de fase apresentam a importante característica de possuírem uma fronteira móvel, gerando a dificuldade adicional decorrente do fato dos domínios sólido e líquido variarem com o tempo.

Nas seções seguintes dar-se-á ênfase a dois processos que são particularmente importantes em engenharia: a solidificação de metais, de grande interesse na metalurgia, e a utilização de materiais de mudança de fase como armazenadores de energia térmica.

## 1.2 SOLIDIFICAÇÃO NA METALURGIA

Os primeiros registros sobre a fundição de objetos simples em cobre datam de 4000 AC, evoluindo para objetos altamente sofisticados fundidos em bronze na China desde 1600 AC. A fundição em ferro surgiu por volta de 500 AC, também na China, tendo chegado na Europa pelo menos 1000 anos depois [Kurz e Fisher, 1986].

A compreensão da natureza do fenômeno constituiu por longo tempo um grande desafio, fazendo com que a solidificação apenas nos últimos 40 anos deixasse de ser um assunto tecnológico, e em boa parte empírico, para tornar-se ciência.

Na figura 1.1 são mostradas as formas pelas quais o calor é transferido, do líquido para a vizinhança, na solidificação de um metal puro ou liga eutética em um molde de fundição.

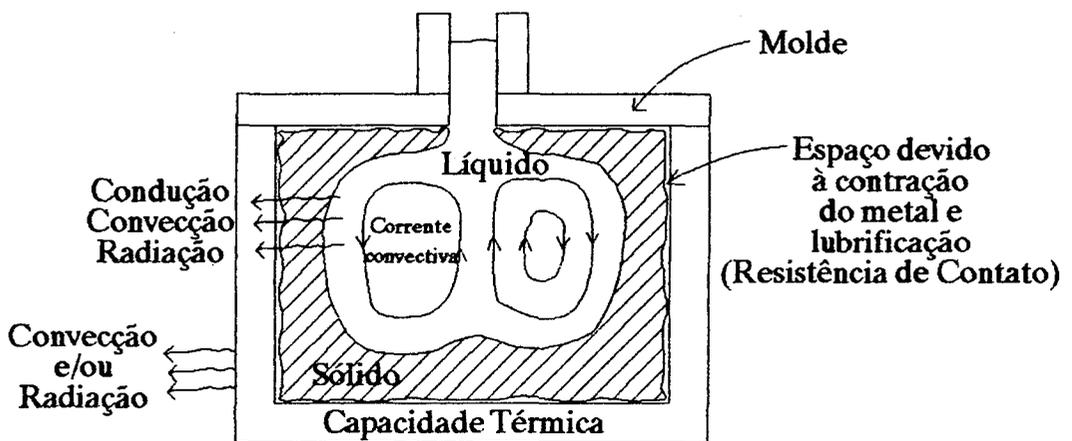


Fig.1.1 Solidificação de um metal puro ou liga eutética em molde

Para uma simulação completa do fenômeno, alguns mecanismos inerentes a ele devem ser levados em conta:

a. Devido aos gradientes térmicos existentes na fase líquida, correntes de convecção natural influem significativamente na taxa de transferência de calor e na composição química resultante

(macrosegregação). Como pode ser observado na figura 1.1, pelo fato do calor estar sendo removido através das paredes do molde, as correntes convectivas são ascendentes no interior da massa líquida e descendentes nas regiões adjacentes à interface líquido-sólido.

b. A configuração destas correntes convectivas faz com que a interface sólido-líquido assuma formas curvas, também variáveis no tempo, dificultando significativamente a construção de modelos.

c. Uma vez que a grande maioria dos metais sofrem contração ao solidificarem, um espaço de ar pode surgir entre o metal já solidificado e a parede do molde, dando origem a uma resistência térmica adicional, também variável no tempo, de difícil equacionamento [Ho e Pehlke; 1985, Huang et al.; 1992]. Adicionalmente, a presença de ar ocasiona a formação de óxidos e, em certos casos o uso de lubrificantes a fim de facilitar a extração da peça após completado o processo de solidificação, dificultam ainda mais a avaliação do valor da resistência térmica peça-molde.

Os metais puros e as ligas eutélicas mudam de fase a uma certa temperatura discreta, entretanto na maioria das ligas de interesse para a engenharia a mudança de fase ocorre numa faixa de temperaturas, isto é, as fases líquida e sólida podem coexistir em equilíbrio a várias temperaturas diferentes. Considerando ainda que na maioria das misturas os componentes químicos possuem solubilidade diferente nas fases sólida e líquida, estes componentes podem ser incorporados na frente de solidificação de forma diferenciada (microsegregação) [Viskanta, 1988]. Neste caso surgem gradientes de concentração de espécies químicas, que por sua vez originam um transporte convectivo e difusivo destas espécies. Tais mecanismos se somam ao transporte causado pelos gradientes térmicos.

Maiores dificuldades na simulação são introduzidas ainda pelo fato da interface sólido-líquido assumir formas mais complexas, dando lugar à complicadas estruturas, como a dendrítica mostrada na figura 1.2, mais comum nos processos industriais e na natureza.

A região caracterizada por estas estruturas irregulares é chamada zona esponjosa ou bifásica, onde coexistem sólido e líquido em frações que variam segundo a direção  $x$ , conforme mostrado na figura 1.2.

Até o presente momento somente são possíveis modelos de análise simplificados para a região esponjosa.

Mais para o interior do metal fundente tem-se uma região onde o líquido fica em repouso, dita quiescente, ocorrendo finalmente uma região de convecção livre.

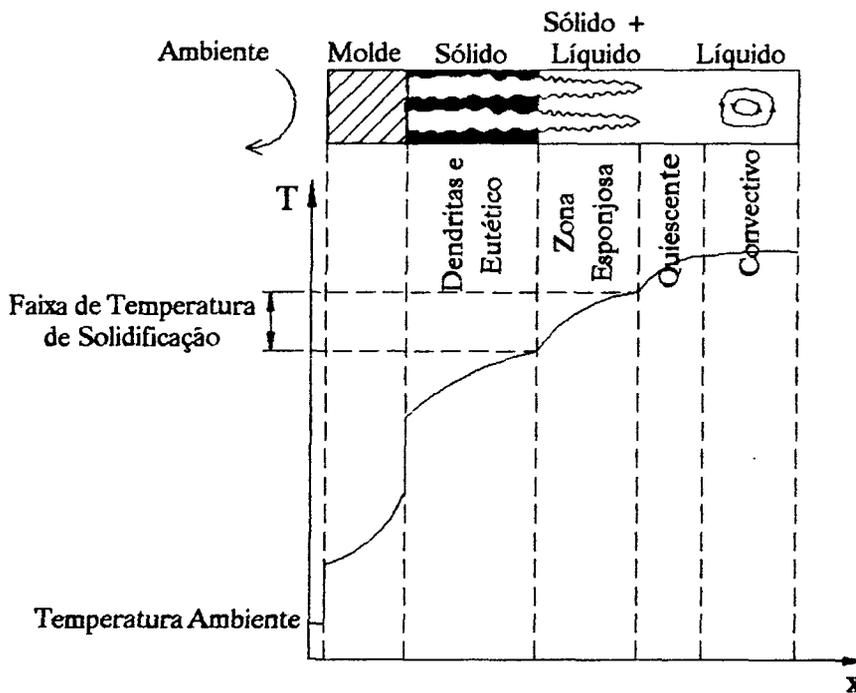


Fig. 1.2 Distribuição de temperatura na solidificação de uma liga metálica em molde [Clyne, T.W., 1982]

### 1.3 ARMAZENAMENTO DE ENERGIA COM MUDANÇA DE FASE

Em diversas situações da engenharia ocorre a necessidade do armazenamento de energia em forma térmica. Pode-se tomar como exemplo o caso do uso da energia solar, onde devido a sua característica intermitente surge a forte necessidade de

armazenamento da energia disponível, durante um certo período de tempo, para uso em outro onde existe demanda mas a fonte solar não está disponível.

O armazenamento de energia em forma de calor sensível possui o inconveniente da grande necessidade de isolamento térmico, já que quanto maior a diferença de temperatura entre a massa armazenadora e o ambiente, visando maior quantidade de energia armazenada, maior é o potencial de perda de calor, aumentando assim o custo do isolamento. Outro inconveniente é a necessidade de massas relativamente grandes, para armazenar uma certa quantidade de energia a incrementos compatíveis de temperatura, como por exemplo no caso do armazenamento de calor para calefação de habitações em tanques de água.

Esforços vem sendo dispendidos nos últimos 35 anos no sentido de desenvolver armazenadores de energia sob forma de calor latente [Anderson, 1976], onde um material adequado é fundido a temperaturas compatíveis, como o sal de Glauber ( $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ ), cuja temperatura de fusão é de  $32^\circ\text{C}$  [Duffie e Beckman, 1980].

O calor necessário para a fusão do material é a energia que se deseja armazenar. A recuperação da energia assim armazenada é realizada através da solidificação do material, recuperação esta que é maior quanto menor for a perda durante o período de armazenamento.

Neste caso o custo do isolamento térmico é significativamente menor, em função das menores diferenças de temperatura até o ambiente, e da mesma forma o volume de armazenamento necessário é menor, para a mesma quantidade de energia armazenada.

Considerando que o sal de Glauber e outros sais usados para este fim são eutéticos, assim como a parafina, também usada, o problema quanto ao comportamento destes materiais na fusão e solidificação é semelhante ao dos metais puros e ligas eutéticas.

A possibilidade de simular o comportamento destes processos é portanto de fundamental importância no projeto destes armazenadores de energia.

#### 1.4 ESCOPO DA TESE

A transferência de calor com mudança de fase envolvendo as fases sólida e líquida durante muito tempo foi tratada de forma limitada por engenheiros, físicos e matemáticos. Do ponto de vista puramente matemático, fusão e solidificação representam interessantes problemas de fronteira livre e inúmeros são os trabalhos publicados sobre o assunto envolvendo diferentes metodologias de solução. Para uma revisão sobre algumas abordagens comumente adotadas recomenda-se o livro de Crank, 1984. Os engenheiros mecânicos, químicos e civis, motivados principalmente pelo armazenamento de energia térmica, já há algum tempo estudam o problema da fusão e solidificação de ceras, sais e substâncias afins, normalmente denominadas de PCM (do inglês, Phase Change Materials). Em tais estudos, aspectos relacionados com a microestrutura dos materiais eram desconsiderados e problemas como nucleação, microsegregação e formação de estruturas dendríticas não eram incluídos nas formulações propostas (ver por exemplo a revisão de Viskanta, 1983). Os metalúrgicos, por maior necessidade, sempre reconheceram a importância da micro e macrosegregação, mas tratavam de forma simplificada os problemas de transferência de calor e escoamento (ver por exemplo Flemings, 1974). Só recentemente é que problemas de mudança de fase vem sendo abordados através de uma visão mais abrangente, onde os diversos aspectos fenomenológicos envolvidos no processo são incluídos nas formulações propostas.

A presente tese procura dar uma visão global do problema da transferência de calor e massa presente na fusão e solidificação. Para isto diferentes formulações são revistas e apresentadas de forma detalhada. Os modelos são introduzidos segundo uma ordem de complexidade. Inicialmente são apresentados os modelos clássicos, que possuem soluções analíticas. Em seguida é apresentado o método integral que permite, por exemplo, incluir a capacidade calorífica da fase líquida em um processo de fusão e

ainda obter uma solução semi-analítica. Os métodos integrais são particularmente convenientes em situações envolvendo lingotamento contínuo [Arpaci, 1984, capítulo 4].

Tendo discutido modelos puramente difusivos no capítulo 2, no capítulo 3 passa-se a abordar modelos que incorporam o movimento da fase líquida. Neste capítulo são apresentadas formulações envolvendo temperatura e entalpia como variável dependente. Conforme será explorado, certas formulações em entalpia são particularmente convenientes, uma vez que não requerem a localização da frente de mudança de fase. Tal informação já é parte da solução do problema. Após a análise de substâncias puras e ligas eutéticas, as que mudam de fase a uma temperatura constante, passa-se às ligas metálicas não eutéticas, onde a mudança de fase ocorre ao longo de uma faixa de temperaturas.

O capítulo 4 trata de aspectos metalúrgicos da solidificação, esperando-se que ele possa ser útil aos não iniciados em metalurgia.

No capítulo 5 é apresentado um modelo completo para a mudança de fase em misturas binárias. Tal modelo incorpora um tratamento da região esponjosa onde ocorre a formação de estruturas dendríticas, com sólido e líquido coexistindo. Nesta região o líquido escoia através de uma matriz sólida e modelos desenvolvidos para meios porosos são particularmente úteis na simulação do escoamento.

O modelo introduzido no capítulo 5 representa o estado da arte do que hoje é utilizado na simulação de processos de solidificação. Esta formulação, embora completa, ainda faz uso de fortes simplificações. Como consequência verifica-se que comparações entre experimentos e simulações numéricas para solidificação de misturas binárias permanecem apresentando concordâncias insatisfatórias. Uma das possíveis fontes de erro é a hipótese de equilíbrio termodinâmico entre as fases, ou seja, o sólido e o líquido coexistem na mesma temperatura, impedindo um tratamento mais realista da interface.

No capítulo 6 é proposto um modelo onde as fases sólida

e líquida são tratadas de forma distinta, permitindo que a hipótese de equilíbrio termodinâmico entre as fases não mais necessite ser adotada. Este modelo é adequado para a simulação da transferência de calor e massa na solidificação direcional, com interface plana ou levemente ondulada.

No capítulo 7 o modelo proposto é comparado com a solução clássica mais completa existente na literatura. São também apresentados neste capítulo vários resultados de simulações realizadas para duas ligas metálicas usuais. Estes resultados são comentados buscando-se a sua compreensão física, sendo também realizadas observações sob o ponto de vista da solução numérica.

No capítulo 8 são tiradas algumas conclusões e dadas sugestões para a continuidade da pesquisa neste campo, tanto do ponto de vista do modelamento e simulação computacional, como do ponto de vista experimental. Argumenta-se ainda neste capítulo a favor de uma abordagem multidisciplinar do problema em pauta.

## 2 OS PROBLEMAS DE STEFAN E NEUMANN NA FUSÃO E SOLIDIFICAÇÃO

Os problemas de Stefan e de Neumann são problemas clássicos, apresentados por pioneiros na abordagem científica do assunto [Stefan, 1891 e Neumann, 1860]. As soluções analíticas, exatas, destes problemas são chamadas soluções clássicas.

Nas próximas duas seções serão caracterizados os problemas de Stefan e de Neumann, apresentadas as suas respectivas soluções clássicas e discutidos os resultados.

### 2.1 O PROBLEMA DE STEFAN

Considere-se a situação mostrada na figura 2.1, onde uma certa substância está sendo fundida, através da adição unidirecional de calor, a partir de uma superfície a temperatura constante e maior do que a temperatura de fusão da substância.

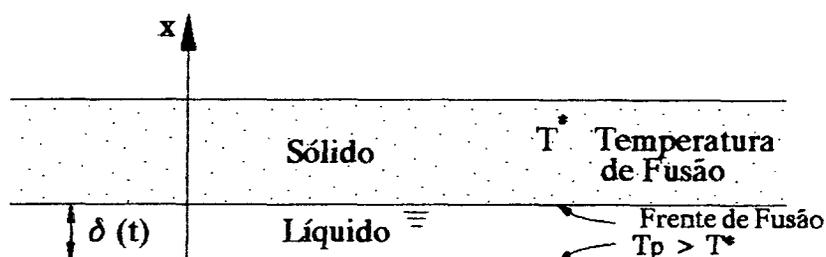


Fig. 2.1 Problema de Stefan, versão fusão

Ignorando a convecção natural e assumindo a interface sólido-líquido como sendo plana, as versões fusão e solidificação deste problema são idênticas. Desta forma no que segue apenas o problema da fusão é considerado.

A distribuição de temperaturas em dois instantes de tempo é mostrada na figura 2.2.

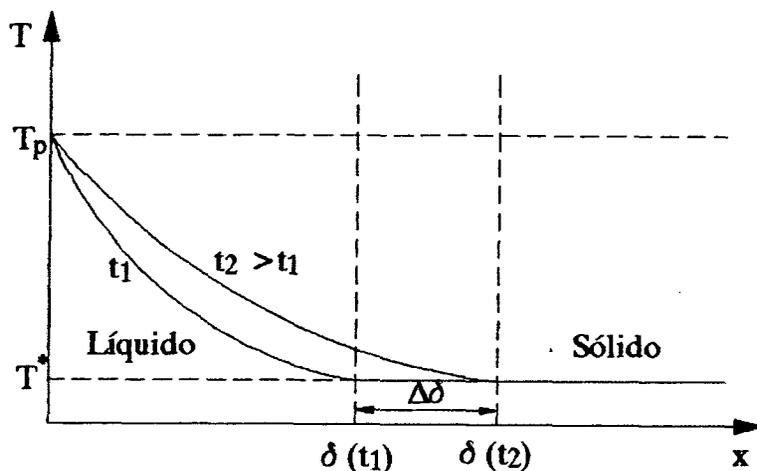


Fig. 2.2 Distribuição de temperaturas no problema de Stefan

Todo o sólido encontra-se inicialmente a temperatura de fusão  $T^*$ , permanecendo assim ao longo do tempo, restando determinar a distribuição de temperaturas no líquido e a evolução da interface líquido-sólido.

Considere-se o deslocamento da frente de fusão no intervalo de tempo  $\Delta t$ , como mostra a figura 2.3.

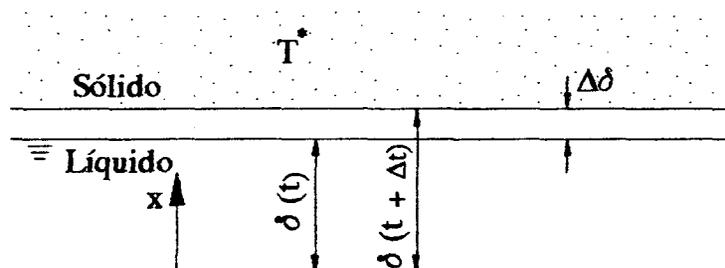


Fig. 2.3 Deslocamento da frente de fusão, durante o intervalo de tempo  $\Delta t$

Conforme indicado, a frente de fusão desloca-se  $\Delta\delta$ , sendo necessária a quantidade de energia  $E$ , para fundir o volume correspondente de sólido

$$E = \lambda \Delta m \quad (2.1)$$

ou

$$E = \lambda \rho_s A \Delta\delta \quad (2.2)$$

sendo  $\Delta m$  a massa de sólido contida na região  $\Delta\delta$ ,  $\lambda$  o calor latente de fusão,  $\rho_s$  a densidade do sólido e  $A$  a área de face.

Como o sólido está a  $T^*$ , todo o calor que chega na interface é utilizado para fundir-lo. Um balanço de energia na interface requer então que

$$-k_l A \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=\delta} \Delta t = \lambda \rho_s A \Delta\delta \quad (2.3)$$

ou

$$-k_l \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=\delta} = \lambda \rho_s \frac{d\delta}{dt} \quad (2.4)$$

onde  $d\delta/dt$  é a velocidade de deslocamento da interface, ou taxa de fusão.

A eq. (2.4) fornece a condição na interface.

Para a determinação da velocidade  $d\delta/dt$  necessita-se de  $\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=\delta}$ , que é obtida do campo de temperaturas no líquido, que por sua vez é obtido resolvendo-se a equação da condução do calor no líquido, dada por

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (2.5)$$

onde  $\alpha$  é a difusividade térmica do líquido.

As seguintes condições de contorno e inicial se aplicam no líquido

$$\begin{aligned} T &= T^*, \text{ para } t = 0 \text{ e } \forall x \\ T &= T_p, \text{ para } x = 0 \text{ e } \forall t \\ T &= T^*, \text{ para } x = \delta \text{ e } \forall t \end{aligned}$$

A posição da frente de fusão,  $\delta(t)$ , não é conhecida, e deve ser obtida com o auxílio da eq. (2.4). Assim tem-se duas equações, (2.4) e (2.5), com duas incógnitas,  $T = T(x,t)$  e  $\delta = \delta(t)$ .

Uma simplificação possível de ser adotada consiste em desconsiderar a capacidade térmica do líquido (modelo simplificado), ou seja, desconsiderar o calor sensível armazenado no líquido. Esta é uma boa aproximação quando  $Ste < 0,5$ , sendo  $Ste$  o número de Stefan, definido da seguinte forma

$$Ste = \frac{c (T_p - T^*)}{\lambda} \quad (2.6)$$

onde  $c$  é o calor específico do material.

O modelo simplificado pode ainda ser corrigido (modelo simplificado corrigido), somando-se ao calor latente o calor sensível armazenado no líquido, associado ao aumento médio de temperatura do líquido, obtido no modelo simplificado [Prata, 1990].

Retomando o modelo unidirecional exato, tem-se a seguinte solução geral para a eq. (2.5), [apêndice]

$$T(x,t) = A + B \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) \quad (2.7)$$

onde  $\operatorname{erf}(x)$  é a função erro, definida como

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\beta^2} d\beta \quad (2.8)$$

Aplicando as condições de contorno obtém-se [apêndice]

$$T(x,t) = T_p + \frac{T^* - T_p}{\operatorname{erf}(\Omega)} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{x/2\sqrt{at}} e^{-\beta^2} d\beta \quad (2.9)$$

onde

$$\Omega = \frac{\delta}{2\sqrt{at}} = \text{constante} \quad (2.10)$$

Note-se que  $\Omega$  ainda não é conhecido, entretanto

$$\frac{d\delta}{dt} = \Omega \sqrt{\frac{\alpha}{t}} \quad (2.11)$$

Adicionalmente, derivando  $T(x,t)$ , da eq. (2.9), em relação a  $x$  tem-se

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\delta} = \frac{T^* - T_p}{\operatorname{erf}(\Omega)} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\partial}{\partial x} \left( \int_0^{x/2\sqrt{\alpha t}} e^{-\beta^2} d\beta \right) \Big|_{x=\delta} \quad (2.12)$$

ou, empregando a regra de Leibnitz

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=\delta} = \frac{T^* - T_p}{\operatorname{erf}(\Omega)} \frac{1}{\sqrt{\alpha t}} e^{-\delta^2/4\alpha t} \quad (2.13)$$

Substituindo as eq. (2.11) e (2.13) na eq. (2.4), obtém-se

$$\Omega \operatorname{erf}(\Omega) e^{\Omega^2} = \frac{\operatorname{Ste}}{\sqrt{\pi}} \quad (2.14)$$

Assim, para um dado  $\operatorname{Ste}$ , obtém-se  $\Omega$  a partir da equação anterior. Com  $\Omega$  determina-se  $\delta(t)$  da eq. (2.10)

$$\delta(t) = 2 \Omega \sqrt{\alpha t} \quad (2.15)$$

A influência do  $\operatorname{Ste}$  no campo de temperaturas do líquido é mostrada na figura 2.4, onde  $X = x/\delta$  e  $\operatorname{TETAP} = (T - T_p)/(T^* - T_p)$ . Observa-se nesta figura que para  $\operatorname{Ste} = 0$  a distribuição de temperaturas é linear, equivalendo ao modelo simplificado, onde a capacidade térmica do líquido não é levada em conta. Na medida em que o  $\operatorname{Ste}$  aumenta, maior é o afastamento em relação à solução linear, refletindo o crescente armazenamento de calor sensível no líquido.

O calor trocado na placa aquecida é dado por

$$q = -k_l \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} \quad (2.16)$$

onde  $k_l$  é a condutividade térmica do líquido.

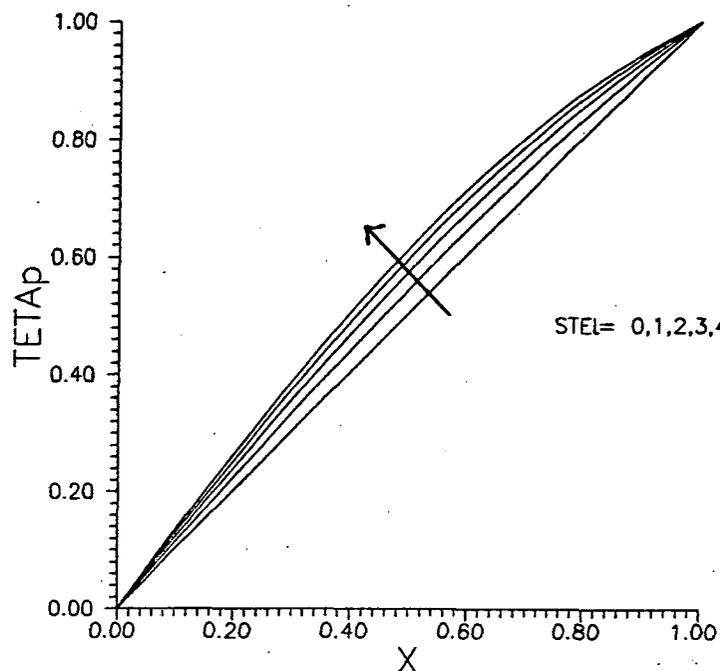


Fig. 2.4 Distribuição de temperaturas no líquido para o problema de Stefan, com diversos Ste

Da eq. (2.9) obtém-se que

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{T^* - T_p}{\operatorname{erf}(\Omega)} \frac{1}{\sqrt{\pi \alpha t}} \quad (2.17)$$

onde, da eq. (2.14)

$$\operatorname{erf}(\Omega) = \frac{1}{\Omega} \frac{\operatorname{Ste}}{e^{\Omega^2} \sqrt{\pi}} \quad (2.18)$$

substituindo na eq. (2.17), e posteriormente na eq. (2.16) obtém-se o calor total trocado

$$q = \frac{k_l \Omega e^{\Omega^2} (T_p - T^*)}{\operatorname{Ste} \sqrt{\alpha t}} \quad (2.19)$$

Na figura 2.5 são comparados os modelos exato e simplificado, quanto à posição da interface e ao calor total

trocado, para diferentes  $Ste$ , onde

$$\Delta_{me} = \frac{\text{posição da interface dada pelo modelo exato}}{\text{posição da interface dada pelo modelo simplificado}}$$

e

$$Q_{me} = \frac{\text{calor trocado segundo o modelo exato}}{\text{calor trocado segundo o modelo simplificado}}$$

Como se poderia esperar, o calor trocado segundo o modelo exato é maior, enquanto que o avanço da interface é menor, já que o modelo simplificado não leva em conta o calor sensível absorvido pelo líquido. Observe-se ainda que o erro apresentado no modelo simplificado, em relação ao modelo exato, é menor quanto menor for o  $Ste$ , isto é, quanto menor for a parcela do calor sensível no sistema.

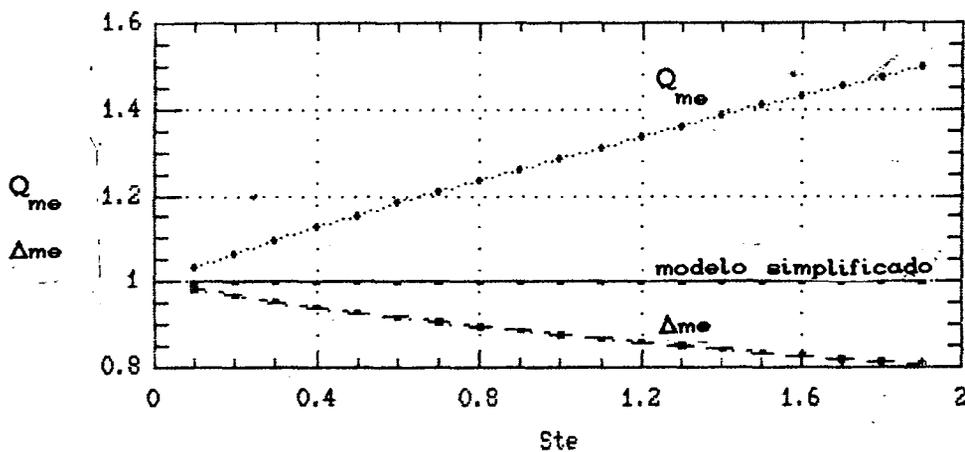


Fig. 2.5 Comparação dos modelos exato e simplificado

## 2.2 O PROBLEMA DE NEUMANN

Uma sofisticação do problema de Stefan é denominada de problema de Neumann.

Neste problema o sólido está subresfriado, isto é, a sua temperatura é inferior à temperatura de fusão do material, gerando a distribuição de temperaturas mostrada na figura 2.6.

Como agora a temperatura no interior do sólido não é mais constante, necessita-se determinar a sua distribuição.

Considerando que os processos em questão são normalmente lentos, pode-se assumir que a interface, a cada instante, está em equilíbrio, permitindo que se trate separadamente a condução no líquido e no sólido.

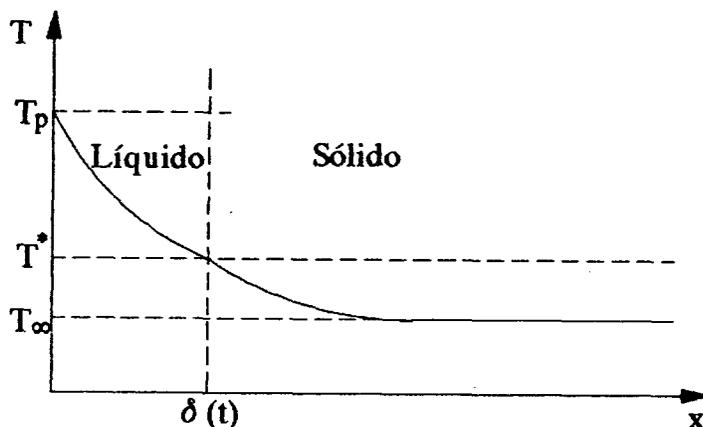


Fig. 2.6 Distribuição de temperaturas no problema de Neumann

No líquido as condições são as mesmas do problema de Stefan, portanto a solução é dada pela eq. (2.9). Da mesma forma  $\delta(t)$  é obtido a partir da eq. (2.15), entretanto com um  $\Omega$  diferente daquele fornecido pela eq. (2.14).

Para a distribuição de temperaturas no sólido tem-se a mesma equação já empregada no líquido, com as seguintes condições inicial e de contorno

$$\begin{aligned} T_s &= T_\infty, \text{ para } t = 0 \text{ e } \forall x \\ T_s &= T_\infty, \text{ para } x \rightarrow \infty \text{ e } \forall t \\ T_s &= T^*, \text{ para } x = \delta \text{ e } \forall t \end{aligned}$$

A solução do problema do sólido é dada por

$$T_s(x, t) = T_\infty + (T^* - T_\infty) \left[ \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_s t}}\right) - 1}{\operatorname{erf}\left(\frac{\Omega\sqrt{a_1/a_s}}{2}\right) - 1} \right] \quad (2.20)$$

Para a obtenção de  $\Omega$  é empregada a condição na interface, que neste caso deve considerar o calor sensível absorvido pelo sólido. Desta forma um balanço de energia na interface requer

$$-k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} \Big|_{x=\delta} = \lambda \rho_s \frac{d\delta}{dt} - k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \Big|_{x=\delta} \quad (2.21)$$

A derivada  $\partial T_l / \partial x$ , em  $x = \delta$ , está expressa na eq. (2.13),  $d\delta/dt$  na eq. (2.11), e  $\partial T_s / \partial x$ , em  $x = \delta$ , é obtida a partir da eq. (2.20). Substituindo tais informações na eq. (2.21) e rearranjando os termos obtém-se

$$\Omega \operatorname{erf}(\Omega) e^{\Omega^2} \sqrt{\pi} - \frac{\operatorname{Ste}_s \operatorname{erf}(\Omega)}{(\operatorname{erf}(\Omega \Gamma) - 1)\Gamma} e^{\Omega^2(1-\Gamma^2)} - \operatorname{Ste}_l = 0 \quad (2.22)$$

onde

$$\operatorname{Ste}_l = \frac{c_l (T_p - T^*)}{\lambda} \quad (2.23)$$

$$\operatorname{Ste}_s = \frac{c_s (T^* - T_\infty)}{\lambda} \quad (2.24)$$

$$\Gamma = \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}} \quad (2.25)$$

Uma comparação entre as soluções dos problemas de Neumann e Stefan é realizada na figura 2.7, quanto ao calor total trocado e à posição da frente de fusão, para  $\operatorname{Ste}_l = 0,5$  e  $\Gamma = 1$ . De forma semelhante ao realizado na figura 2.5, o modelo simplificado de Stefan é tomado como base para a comparação. Assim sendo

$$Q_{\text{Neu}} = \frac{\text{calor trocado segundo o problema de Neumann}}{\text{calor trocado segundo o modelo simplificado de Stefan}}$$

$$Q_{\text{ste}} = \frac{\text{calor trocado segundo o problema de Stefan}}{\text{calor trocado segundo o modelo simplificado de Stefan}}$$

$$\Delta_{\text{Neu}} = \frac{\text{posição da interface segundo o problema de Neumann}}{\text{posição da interface segundo o modelo simplif. de Stefan}}$$

$$\Delta_{\text{ste}} = \frac{\text{posição da interface segundo o problema de Stefan}}{\text{posição da interface segundo o modelo simplif. de Stefan}}$$

Como pode ser observado na figura 2.7, o modelo de Neumann exige mais calor para a fusão, além de ter uma menor velocidade de avanço da interface. Tal fato se verifica porque no problema de Neumann parte do calor que chega na interface é absorvido pelo sólido, em forma de calor sensível, parcela esta ausente nos modelos de Stefan, onde todo o sólido já encontra-se na temperatura de fusão. Observe-se ainda que, para  $Stes = 0$ , as soluções coincidem, ou seja, o problema de Stefan é um caso particular do problema de Neumann, quando  $Stes = 0$ .

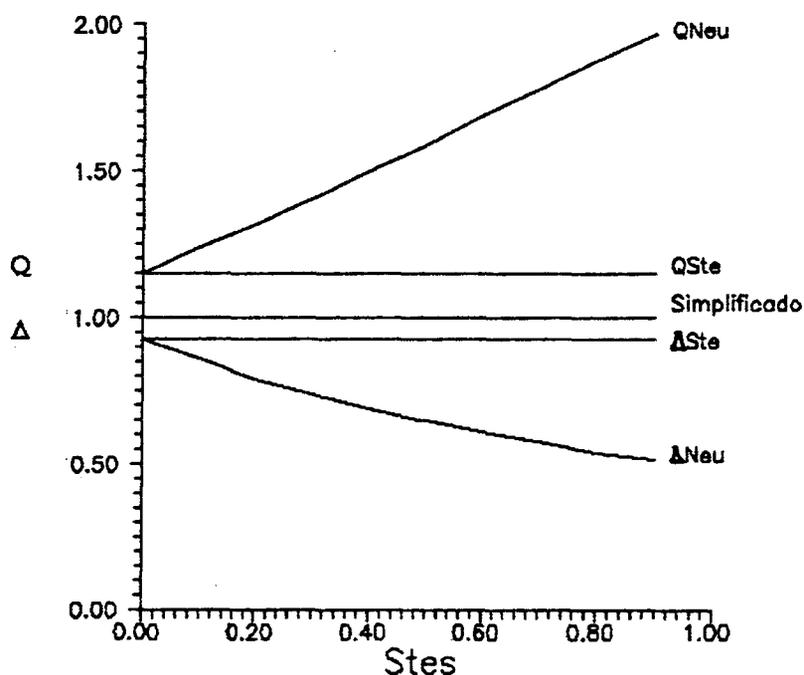


Fig. 2.7 Comparação entre os problemas de Neumann e Stefan

Embora a discussão até o momento tenha sido centrada em geometrias cartesianas, a aplicação a outras situações geométricas é similar.

### 2.3 O MÉTODO INTEGRAL

Este método proporciona uma solução analítica aproximada de problemas de valor inicial.

O método consiste em quatro passos fundamentais [Ozisik, 1980];

- 1 A equação diferencial do problema é integrada sobre todo o domínio de solução, com o objetivo de eliminar a derivada em relação ao espaço. No caso do problema de mudança de fase um dos limites de integração é a posição da interface sólido-líquido,  $\delta(t)$ . A equação resultante é chamada equação integral.
- 2 É escolhido um perfil adequado para a variável do problema, polinomial por exemplo, cujos coeficientes são determinados de forma a que o perfil satisfaça as condições de contorno.
- 3 Este perfil é substituído na equação integral, resultando numa equação diferencial ordinária para  $\delta$ , com o tempo como variável independente. A solução desta equação, sujeita a condição inicial, fornece  $\delta(t)$ .
- 4 Conhecida  $\delta(t)$ , fica determinada a variável em questão, em função da posição e do tempo.

Neste caso a equação a ser resolvida, como já foi visto anteriormente, para o caso de todo o sólido estar a  $T^*$  (problema de Stefan), é

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.26)$$

Integrando ao longo de todo o domínio de solução

$$\int_0^\delta k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} dx = \int_0^\delta \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dx \quad (2.27)$$

Da regra de Leibnitz

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^\delta T(x, t) dx = \int_0^\delta \frac{\partial T}{\partial t} dx + \frac{d\delta}{dt} T(\delta, t) \quad (2.28)$$

e como  $T(\delta, t) = T^*$

$$\int_0^\delta \frac{\partial T}{\partial t} dx = \frac{\partial}{\partial t} \int_0^\delta T(x, t) dx - \frac{d\delta}{dt} T^* \quad (2.29)$$

O termo  $d\delta/dt$  pode ser eliminado, tornando o desenvolvimento mais simples. Para tal basta adotar-se, na eq. (2.26), a variável  $\theta(x, t) = T(x, t) - T^*$ .

Retomando a equação inicial, com a nova variável, e integrando tem-se

$$k \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_\delta - k \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_0 = \rho c \int_0^\delta \frac{\partial \theta}{\partial t} dx \quad (2.30)$$

Mas, da regra de Leibnitz,

$$\int_0^\delta \frac{\partial \theta}{\partial t} dx = \frac{\partial}{\partial t} \int_0^\delta \theta dx \quad (2.31)$$

Substituindo a eq. (2.31) na eq. (2.30), tem-se finalmente a equação integral, ou balanço integral de calor (BIC)

$$k \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_\delta - k \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_0 = \rho c \frac{\partial}{\partial t} \int_0^\delta \theta dx \quad (2.32)$$

Observe-se que, enquanto a eq. (2.26) é um balanço de energia num volume infinitesimal, a eq. (2.32) é um balanço em todo o domínio, podendo não satisfazer a equação original em certos pontos do domínio.

Adotando o perfil linear  $\theta = A + Bx$ , que deve satisfazer as condições  $\theta = \theta_p$  em  $x = 0$ , e  $\theta = 0$  em  $x = \delta$ , obtém-se

$$\theta = \theta_p \left(1 - \frac{x}{\delta}\right) \quad (2.33)$$

Substituindo este perfil no BIC e empregando a condição na interface dada pela eq. (2.4) tem-se

$$-\rho\lambda \frac{d\delta}{dt} + \frac{k}{\delta} (T_p - T^*) = \rho c \frac{(T_p - T^*)}{2} \frac{d\delta}{dt} \quad (2.34)$$

Resolvendo a equação anterior para  $\delta(t)$ ,

$$\delta(t) = \sqrt{\frac{2 Ste \alpha t}{1 + Ste/2}} \quad (2.35)$$

O calor transmitido será

$$q = -k \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = k \frac{T_p - T^*}{\delta} \quad (2.36)$$

ou, após a substituição de  $\delta(t)$  dado pela eq. (2.35) fornece

$$q = k (T_p - T^*) \sqrt{\frac{1 + Ste/2}{2 Ste \alpha t}} \quad (2.37)$$

As equações (2.33), (2.35) e (2.37) fornecem, respectivamente, o perfil de temperatura, a posição da frente de mudança de fase e o calor requerido na superfície aquecida para a fusão do sólido. Para obtenção destas grandezas impôs-se um perfil de temperatura linear no líquido.

A fim de melhor reproduzir a capacidade calorífica do líquido, além do fato do processo ocorrer em regime transiente, deve-se adotar um perfil não linear.

Considere-se a seguinte curva quadrática (parábola)  $T = A + Bx + Cx^2$ . Como agora é necessária mais uma condição de contorno, além das duas em temperatura já empregadas, é usual assumir que  $\partial^2 T / \partial x^2 = 0$ , em  $x = 0$ . Entretanto isto implica em  $C = 0$ , retornando a uma reta, o que inviabiliza portanto a utilização da parábola.

Seja agora a curva cúbica  $T = A + Bx + Cx^2 + Dx^3$ . Empregando as condições  $T = T_p$  e  $\partial^2 T / \partial x^2 = 0$ , em  $x = 0$ , obtém-se  $T = T_p + Bx + Dx^3$ . Em  $x = \delta$ , tem-se que  $T = T^*$  e o balanço de energia mostrado na eq. (2.4). Note-se entretanto que  $B$  e  $D$  dependerão de  $d\delta/dt$ , e quando este perfil for substituído no BIC a equação diferencial decorrente, para a obtenção de  $\delta(t)$ , conterá  $d^2\delta/dt^2$ . Este fato exigirá uma condição de contorno a

mais, em relação a  $\delta(t)$ . Tal condição não está disponível, já que o único fato conhecido é que  $\delta = 0$  em  $t = 0$ , impossibilitando assim a solução associada ao perfil cúbico.

Conforme o exposto anteriormente, o fator limitante para a utilização do método com perfis quadráticos e cúbicos é a condição na interface. A fim de contornar tal dificuldade considere-se o seguinte desenvolvimento em série de Taylor

$$T(\delta + d\delta) = T(\delta) + \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{\delta} d\delta + \left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{\delta} dt + \dots \quad (2.38)$$

mas  $T(\delta + d\delta) = T(\delta) = T^*$ , então

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{\delta} \frac{d\delta}{dt} = - \left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{\delta} \quad (2.39)$$

Da condição na interface, dada pela eq. (2.4),

$$\frac{d\delta}{dt} = - \frac{k}{\rho\lambda} \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{\delta} \quad (2.40)$$

que, quando substituída na eq. (2.39) fornece

$$\frac{k}{\rho\lambda} \left( \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{\delta} \right)^2 = \left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{\delta} \quad (2.41)$$

Aplicando agora a equação do problema, (2.26), em  $x = \delta$ , tem-se que

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_{\delta} = \frac{k}{\rho c} \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{\delta} \quad (2.42)$$

Substituindo a eq. (2.42) na eq. (2.41), tem-se a nova condição na interface

$$\left( \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{\delta} \right)^2 = \frac{\lambda}{c} \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{\delta} \quad (2.43)$$

Desta forma as condições de contorno disponíveis agora são

$$\begin{aligned}x = 0 &\rightarrow T = T_p \quad \text{e} \quad \partial^2 T / \partial x^2 = 0 \\x = \delta &\rightarrow T = T^* \quad \text{e} \quad (\partial T / \partial x)^2 = (\lambda/c) (\partial^2 T / \partial x^2)\end{aligned}$$

Retornando ao perfil quadrático, com as mudanças de variável  $\theta = T - T^*$  e  $x = x - \delta$

$$\theta = D + E(x - \delta) + F(x - \delta)^2 \quad (2.44)$$

Aplicando as condições de contorno

$$\begin{aligned}x = \delta &\rightarrow \theta = 0 \rightarrow D = 0 \\x = \delta &\rightarrow \left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\right)^2 = \frac{\lambda}{c} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \rightarrow F = \frac{E^2 c}{2\lambda} \\x = 0 &\rightarrow \theta = \theta_p \rightarrow \theta_p = -\delta E + \delta^2 F\end{aligned}$$

obtem-se que  $E = \frac{\lambda\beta}{\delta c}$  e  $F = \frac{\lambda}{2c} \left(\frac{\beta}{\delta}\right)^2$ , onde

$$\beta = 1 \pm \sqrt{1 + 2Ste} \quad (2.45)$$

Substituindo este perfil no BIC, de forma semelhante ao já realizado com o perfil linear encontra-se

$$\delta(t) = \left( \frac{\beta - 1}{\frac{1}{2} - \frac{\beta}{3} + \frac{Ste + 1}{\beta}} \right) \sqrt{2\alpha t} \quad (2.46)$$

onde deve-se adotar o sinal negativo em  $\beta$ , uma vez que o sinal positivo gera uma inconsistência física na solução.

Na figura 2.8 são comparadas, em relação ao modelo simplificado, como já foi feito na figura 2.5, as soluções exata e integral (Balanço Integral de Calor), com perfis linear e quadrático, quanto ao calor total trocado e a posição da frente de fusão, para o problema de Stefan. Observe-se que para pequenos  $Ste_1$  o BIC linear se aproxima mais da solução exata do que o BIC quadrático, ocorrendo o oposto para maiores  $Ste_1$ , onde os efeitos da não linearidade são maiores. Conclusões semelhantes, para outros tipos de problemas e perfis de grau ainda mais elevados,

são apresentadas na literatura [Langford, 1973].

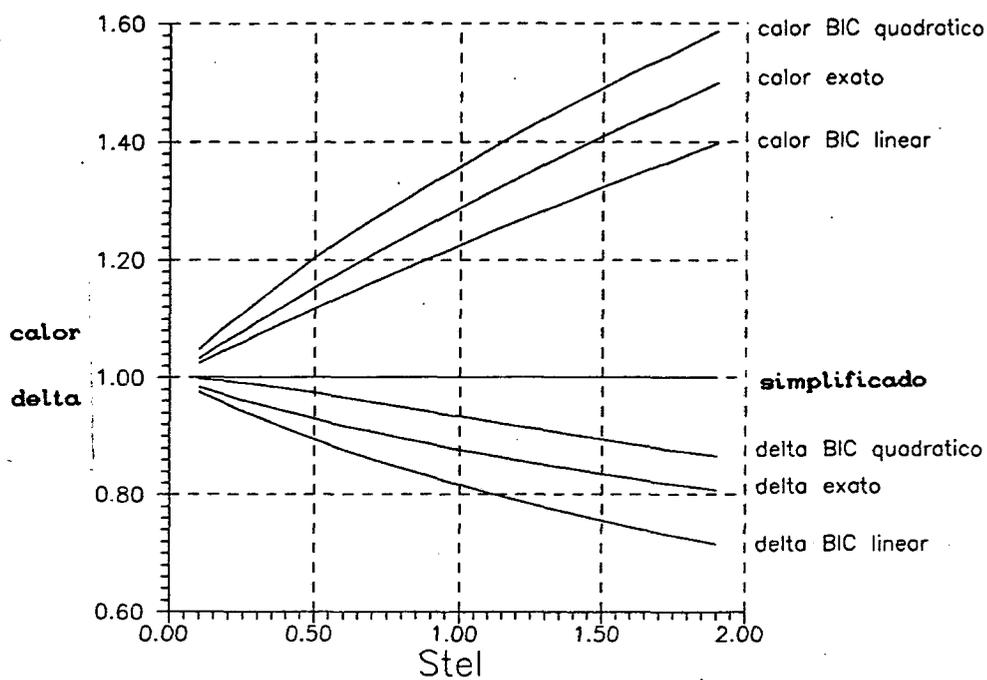


Fig. 2.8 Comparação de duas soluções do tipo BIC, com a solução exata, com base no modelo simplificado para o problema de Stefan

## 2.4 OS MÉTODOS NUMÉRICOS

As soluções mostradas até aqui, sejam elas exatas ou pelo método integral, não levam em conta certos fenômenos inerentes ao processo, tais como correntes convectivas, quando o sistema é instável, e difusão de espécies químicas, no caso de ligas. Isto deve-se ao fato da impossibilidade de solução, através destes métodos, dos sistemas de equações que representam estes fenômenos.

Desta forma surge a necessidade dos métodos numéricos, que possibilitam a solução de problemas mais complexos.

A principal dificuldade associada aos métodos numéricos, em função da necessidade de discretizar o domínio de solução, decorre do fato de haver uma interface sólido-líquido que se movimenta ao longo do tempo.

Neste ponto existem duas técnicas comumente usadas, que se diferenciam fundamentalmente pelo fato de uma delas formular a equação da energia em termos de temperatura e a outra em termos de entalpia.

Nas formulações em temperatura existe a necessidade de identificar permanentemente a localização da interface sólido-líquido, ao longo do tempo [Morgan, 1981; Crank, 1984]. Como consequência dois domínios são considerados, um sólido e um líquido, ambos variáveis no tempo. Isto exige um método que proporcione a adaptação da malha computacional na medida em que os domínios se modificam ao longo do tempo, de modo a sempre preenchê-los por inteiro.

Nas formulações em entalpia mais recentes, como as apresentadas por Voller e Prakash, 1987 e por Cao et al., 1989, pelo fato de ser computada tanto a entalpia sensível como a latente, não há necessidade de rastrear a interface, dividindo os domínios em sólido e líquido. Neste caso o problema pode ser resolvido sobre uma malha fixa, permitindo inclusive a abordagem de casos tridimensionais com relativa facilidade. Da mesma forma não são necessárias modificações substanciais para o caso de

ligas não eutéticas, onde a mudança de fase ocorre numa faixa de temperaturas.

#### 2.4.1 O PROBLEMA DE STEFAN COM FORMULAÇÃO EM TEMPERATURA

A fim de ilustrar uma metodologia numérica, com a equação da energia formulada em termos de temperatura e o emprego da técnica de imobilização do domínio, considere-se o problema de Stefan mostrado na figura 3.1. No desenvolvimento que se segue é feito uso do método dos volumes finitos, conforme descrito por Patankar, 1980. Tal método, bem como suas variações, tem se mostrado muito eficiente na sua aplicação a problemas de mudança de fase. A equação do problema, para o líquido, conforme já foi visto, é a seguinte

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.47)$$

com a condição de contorno, em  $x = \delta$

$$-k_l \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=\delta} = \lambda \rho_s \frac{d\delta}{dt} \quad (2.48)$$

e em  $x = 0$ ,  $T = T_p$ .

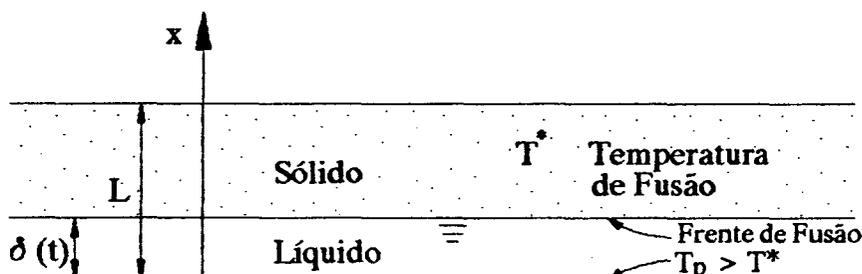


Fig. 2.9 Problema de Stefan com aquecimento inferior

Utilizando as seguintes adimensionalizações

$$\theta = \frac{T - T^*}{T_{\infty} - T^*} = \frac{T - T^*}{\Delta T} \quad X = \frac{x}{L} \quad \Delta = \frac{\delta}{L} \quad (2.49)$$

$$\tau = Fo Ste = \frac{\alpha t c \Delta T}{L^2 \lambda}$$

a eq. (2.47) fica

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} = Ste \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \quad (2.50)$$

e a eq. (2.48), condição de contorno em  $x = \delta$ , se torna

$$-\frac{\partial \theta}{\partial X} \Big|_{X=\Delta} = \frac{d\Delta}{d\tau} \quad (2.51)$$

Observe-se que, uma vez que este é um problema de fronteira livre, a determinação do domínio é uma parte do problema, associada às condições de contorno.

Uma estratégia de solução consiste em transferir o problema da determinação da posição da fronteira para a própria equação, através da seguinte transformação de coordenadas

$$\eta(t) = \frac{x}{\delta(t)} = \frac{L X}{L \Delta(t)} = \frac{X}{\Delta(t)} \quad (2.52)$$

que pode ser vista como uma imobilização do domínio, já que  $0 \leq \eta(t) \leq 1$ . Observe-se que esta nova coordenada espacial depende do tempo, e que a fronteira de fusão sempre ocorre em  $\eta(t) = 1$ . Tem-se agora  $\theta = \theta(\eta, \tau)$ .

Desenvolvendo os termos da eq. (2.50)

$$\frac{\partial \theta}{\partial X} \Big|_{\tau} = \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial X} + \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial X} \quad (2.53)$$

mas  $\partial \tau / \partial X = 0$  e  $\partial \eta / \partial X = 1/\Delta$ , então

$$\frac{\partial \theta}{\partial X} = \frac{1}{\Delta} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \quad (2.54)$$

seguinto

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} \Big|_{\tau} &= \frac{\partial}{\partial X} \left( \frac{1}{\Delta} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) \\ &= \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial X} \left( \frac{1}{\Delta} \right) + \frac{1}{\Delta} \frac{\partial}{\partial X} \left( \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) \\ \frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} &= - \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \frac{1}{\Delta^2} \frac{d\Delta}{dX} + \frac{1}{\Delta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial X} \end{aligned} \quad (2.55)$$

mas  $d\Delta/dX = 0$  e  $\partial\eta/\partial X = 1/\Delta$ , assim

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} = \frac{1}{\Delta^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} \quad (2.56)$$

e o termo do lado direito da eq. (2.50)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \Big|_X &= \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial \tau} \Big|_X + \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \Big|_X \frac{\partial \tau}{\partial \tau} \\ &= - \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_X \frac{X}{\Delta^2} \frac{d\Delta}{d\tau} + \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \Big|_X \end{aligned} \quad (2.57)$$

mas  $X = \eta \Delta$ , então

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = - \frac{\eta}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} + \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \quad (2.58)$$

Desta forma a equação do problema fica

$$\frac{1}{\Delta^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} = Ste \left( \frac{\partial \theta}{\partial \tau} - \frac{\eta}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) \quad (2.59)$$

ou

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} - \frac{\eta}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} = \frac{1}{\Delta^2 Ste} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} \quad (2.60)$$

e a condição na interface fica então

$$- \frac{1}{\Delta} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1} = \frac{d\Delta}{d\tau} \quad (2.61)$$

condição que fornece a velocidade de avanço da interface,  $d\Delta/d\tau$ ,

a ser usada na eq. (2.60).

À fim de integrar numericamente a eq. (2.60), deve-se rearranjá-la, observando que

$$\frac{\partial}{\partial \eta} \left( \frac{\eta}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \theta \right) = \frac{\eta}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} + \theta \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \frac{\eta}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \right) \quad (2.62)$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial \eta} \left( \frac{\eta}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \theta \right) = \frac{\eta}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} + \frac{1}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \theta \quad (2.63)$$

Substituindo o termo  $(\eta/\Delta)(d\Delta/d\tau)(\partial\theta/\partial\eta)$  na eq. (2.60), obtém-se

$$\frac{1}{\Delta^2 Ste} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} = \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \frac{1}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \theta - \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \frac{\eta}{\Delta} \frac{d\Delta}{d\tau} \theta \right) \quad (2.64)$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \Delta \theta \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( -\eta \frac{d\Delta}{d\tau} \theta - \frac{1}{\Delta Ste} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) = 0 \quad (2.65)$$

Comparando a equação anterior com a equação geral de transporte

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u\phi) = \Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (2.66)$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u\phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}) = 0 \quad (2.67)$$

sendo

$$\rho u\phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} = J = \text{fluxo convectivo} + \text{fluxo difusivo}$$

pode-se escrevê-la da seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\Delta \theta) + \frac{\partial}{\partial \eta} (J) = 0 \quad (2.68)$$

onde

$$J = m\theta - \frac{1}{\Delta Ste} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \quad (2.69)$$

e

$$m = -\eta \frac{d\Delta}{d\tau} \quad (2.70)$$

sendo

$J$  : Fluxo total de energia através das faces de um volume de controle

$m\theta$  : Pseudo convecção proveniente da imobilização do domínio

$\frac{1}{\Delta \text{Ste}} \frac{\partial \theta}{\partial \eta}$  : Difusão

A forma da eq. (2.68) é conveniente para integração.

Para aplicação do método dos volumes finitos, o domínio de integração será então dividido em pequenos volumes de controle [Patankar, 1980], não superpostos, como mostra a figura abaixo.

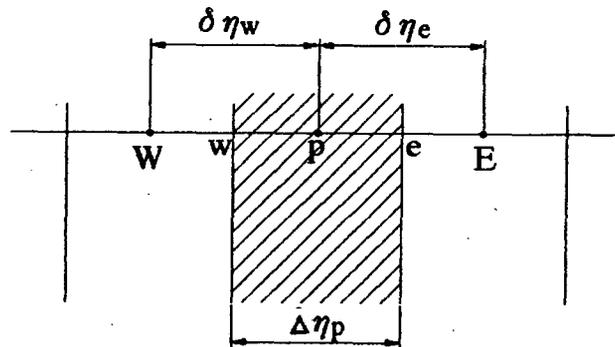


Fig. 2.10 Volume de controle típico na discretização do domínio de solução

Integrando então a eq. (2.68) ao longo do volume sombreado, ilustrado na figura (2.10), tem-se

$$\int_w^e \frac{\partial}{\partial \tau} (\Delta \theta) d\eta + \int_w^e \frac{\partial}{\partial \eta} (J) d\eta = 0 \quad (2.71)$$

de onde obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\Delta \theta) \Delta \eta + (J_e - J_w) = 0 \quad (2.72)$$

Integrando, agora no tempo

$$\int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} \frac{\partial}{\partial\tau} (\Delta\theta) \Delta\eta \, d\tau + \int_{\tau}^{\tau+\Delta\tau} (J_e - J_v) \, d\tau = 0 \quad (2.73)$$

obtem-se

$$[(\Delta\theta) - (\Delta\theta)^0] \Delta\eta + (J_e - J_v) \Delta\tau = 0 \quad (2.74)$$

Exceto pelo termo com "0", que se refere ao tempo  $\tau$ , todos os demais termos se referem ao tempo  $\tau+\Delta\tau$ , ou seja, o esquema adotado é totalmente implícito.

Deve-se observar que  $J_e$  e  $J_v$  não são conhecidos. Como hipótese para permitir a sua avaliação, assume-se que  $J_e$  é constante entre os pontos P e E, assim

$$J_e = \dot{m}\theta - \frac{1}{\Delta Ste} \frac{\partial\theta}{\partial\eta} = \text{constante} \quad (2.75)$$

Resolvendo esta equação diferencial por integração direta, sujeita às seguintes condições de contorno

$$\begin{aligned} \eta = \eta_P &\rightarrow \theta = \theta_P \\ \eta = \eta_E &\rightarrow \theta = \theta_E \end{aligned}$$

obtem-se

$$\frac{\theta - \theta_P}{\theta_E - \theta_P} = \frac{\text{EXP} [\dot{m} \Delta Ste (\eta - \eta_P)] - 1}{\text{EXP} [\dot{m} \Delta Ste (\eta_E - \eta_P)] - 1} \quad (2.76)$$

assim, na interface "e"

$$\theta_e = \frac{\text{EXP} [\dot{m}_e \Delta Ste (\eta_e - \eta_P)] - 1}{\text{EXP} [\dot{m}_e \Delta Ste (\eta_E - \eta_P)] - 1} (\theta_E - \theta_P) + \theta_P \quad (2.77)$$

Calculando agora  $(\partial\theta/\partial\eta)_e$ , a partir da eq. (2.76),

$$\frac{1}{\dot{m}_e \Delta Ste} \frac{\partial\theta}{\partial\eta} \Big|_e = \frac{\text{EXP} [\dot{m}_e \Delta Ste (\eta_e - \eta_P)]}{\text{EXP} [\dot{m}_e \Delta Ste (\eta_E - \eta_P)] - 1} (\theta_E - \theta_P) \quad (2.78)$$

O fluxo  $J_e$  pode agora ser calculado, e por um procedimento semelhante a este também se pode calcular  $J_v$ .

Substituindo  $J_e$  e  $J_v$  na eq. (2.74) e particularizando a equação resultante ao ponto nodal P, obtém-se

$$a_{PP} \theta_P = a_E \theta_E + a_W \theta_W + a_P^o \theta_P^o \quad (2.79)$$

onde

$$a_E = \frac{\dot{m}_e}{\text{EXP} [\dot{m}_e (\eta_E - \eta_P) \Delta \text{Ste}] - 1} \quad (2.80)$$

$$a_W = \frac{\dot{m}_w \text{EXP} [\dot{m}_w (\eta_P - \eta_W) \Delta \text{Ste}]}{\text{EXP} [\dot{m}_w (\eta_P - \eta_W) \Delta \text{Ste}] - 1} \quad (2.81)$$

$$a_P^o = \frac{\Delta \text{Ste}}{\Delta \tau} (\eta_e - \eta_v) \quad (2.82)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_P^o \quad (2.83)$$

A "velocidade"  $\dot{m}$  requerida nas equações (2.80) e (2.81) pode ser calculada a partir da condição na interface, eq. (2.61)

$$-\frac{1}{\Delta} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1} = \frac{d\Delta}{d\tau}$$

Discretizando a equação anterior, segundo a malha mostrada na figura 2.11, resulta

$$-\frac{1}{\Delta} \frac{(\theta_N - \theta_{N-1})}{\Delta \eta_{N-1} / 2} = \frac{d\Delta}{d\tau} \quad (2.84)$$

e como  $\theta_N = 0$

$$\frac{d\Delta}{d\tau} = \frac{\theta_{N-1}}{\Delta (\Delta \eta_{N-1} / 2)} \quad (2.85)$$

Aplicando a equação anterior no tempo  $\tau$

$$\left( \frac{d\Delta}{d\tau} \right)^o = \frac{\theta_{N-1}^o}{\Delta^o (\Delta \eta_{N-1} / 2)} \quad (2.86)$$

ou, a fim melhorar a precisão, no tempo  $\tau + \Delta\tau/2$

$$\left(\frac{d\Delta}{d\tau}\right)^{1/2} = \frac{\theta_{N-1}^0}{\Delta^{1/2}(\Delta\eta_{N-1}/2)} \quad (2.87)$$

observando-se que foi mantido o  $\theta_{N-1}^0$ , já que o uso de  $\theta_{N-1}^{1/2} = (\theta_{N-1} + \theta_{N-1}^0)/2$  requeria iteração, uma vez que  $\theta_{N-1}$  é desconhecido.

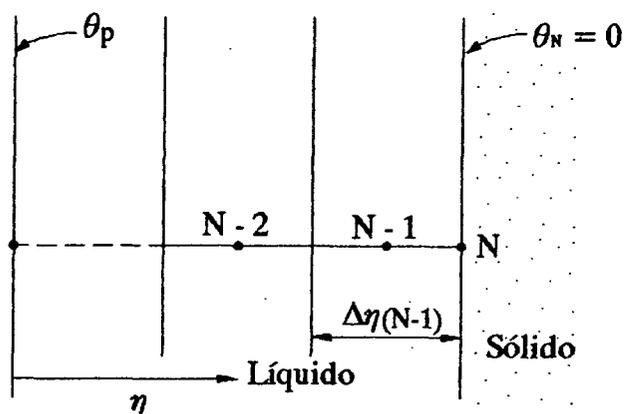


Fig. 2.11 Malha junto à interface sólido-líquido

De posse de  $d\Delta/d\tau$ , o  $\dot{m}$  pode ser calculado, conforme já foi visto, pela seguinte equação

$$\dot{m} = -\eta \left(\frac{d\Delta}{d\tau}\right)^{1/2} \quad (2.88)$$

ainda

$$\Delta^{1/2} \cong \Delta^0 + \left(\frac{d\Delta}{d\tau}\right)^0 \frac{\Delta\tau}{2} \quad (2.89)$$

e

$$\Delta = \Delta^{1/2} + \left(\frac{d\Delta}{d\tau}\right)^{1/2} \frac{\Delta\tau}{2} \quad (2.90)$$

assim

$$\Delta = \Delta^0 + \frac{\Delta\tau}{2} \left[ \left(\frac{d\Delta}{d\tau}\right)^0 + \left(\frac{d\Delta}{d\tau}\right)^{1/2} \right] \quad (2.91)$$

A metodologia numérica está agora completa, e o algoritmo de solução é o seguinte:

- (i) Conhecidos os valores de  $\theta^0$  e  $\Delta^0$ , calcula-se  $(d\Delta/d\tau)^0$  pela eq. (2.86),  $\Delta^{1/2}$  pela (2.89),  $(d\Delta/d\tau)^{1/2}$  pela (2.87) e  $\dot{m}$  pela (2.88).
- (ii) Com  $\Delta^0$ ,  $(d\Delta/d\tau)^0$  e  $(d\Delta/d\tau)^{1/2}$  calcula-se  $\Delta$  pela eq. (2.91).
- (iii) Com  $\Delta$ ,  $\dot{m}$  e  $\theta^0$  calcula-se  $\theta$  pela eq. (2.79), empregando o TDMA [Patankar, 1980, p. 52], por exemplo.
- (iv) Retorna-se ao passo (i), avançando no tempo.

Este algoritmo aplica-se à situação mostrada na figura 2.11, ou seja, quando o sistema já possui parte de sua massa em estado sólido e parte em estado líquido. Entretanto, no início do processo ( $\tau = 0$ ), quando ainda não existe líquido, tem-se que  $\Delta^0 = 0$ , impossibilitando a aplicação direta da eq. (2.86).

Um procedimento possível nesta situação consiste em discretizar a eq. (2.86), substituindo o  $\Delta^0$  por  $\Delta$ , no denominador do termo do lado direito e tomando  $\theta_{N-1}^0 = \theta_P$ , assim

$$\frac{\Delta - \Delta^0}{\Delta\tau} = \frac{\theta_P}{\Delta(\Delta\eta_{N-1}/2)} \quad (2.92)$$

e como  $\Delta^0 = 0$  tem-se

$$\Delta = \sqrt{\frac{2\theta_P\Delta\tau}{\Delta\eta_{N-1}}} \quad (2.93)$$

Obtido o  $\Delta$  desta forma calcula-se

$$\left(\frac{d\Delta}{d\tau}\right)^0 = \frac{\Delta}{\Delta\tau} \quad (2.94)$$

A obtenção de  $\Delta$  era originalmente feita através da eq. (2.91). Agora, como o  $\Delta$  já foi calculado, e  $\Delta^0 = 0$ , da eq. (2.91) tira-se que

$$\left(\frac{d\Delta}{d\tau}\right)^{1/2} = \frac{2\Delta}{\Delta\tau} - \left(\frac{d\Delta}{d\tau}\right)^0 \quad (2.95)$$

Tendo  $(d\Delta/d\tau)^{1/2}$ , o  $\dot{m}$  é calculado de forma convencional, pela eq. (2.88), e neste ponto o procedimento segue

normalmente, a partir do passo (iii) do algoritmo.

#### 2.4.2 O PROBLEMA DE NEUMANN COM FORMULAÇÃO EM TEMPERATURA

Uma metodologia numérica para a formulação em temperatura do problema de Neumann pode ser desenvolvida de forma semelhante a do problema de Stefan, mostrada no item anterior.

Como exemplo considere-se o problema da fusão de um sólido, cuja massa está inicialmente subresfriada a temperatura uniforme  $T_s$ . Calor é proveniente do ambiente, que está a temperatura  $T_\infty$ . A figura 2.12 mostra um instante onde parte da massa já encontra-se em estado líquido.

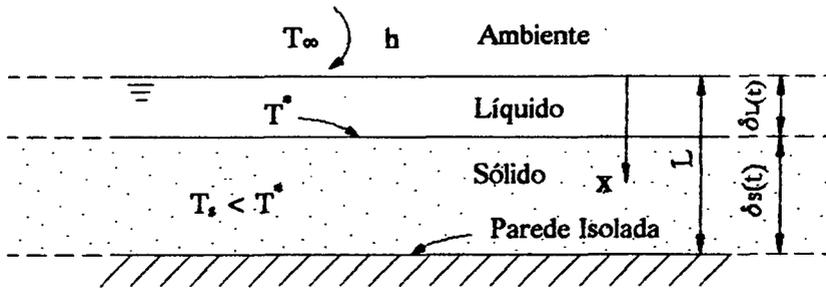


Fig. 2.12 Fusão de um sólido subresfriado

Observe-se que neste caso a condição no contorno onde o calor é fornecido é mais realista do que aquela associada ao problema de Stefan, uma vez que o calor é fornecido a partir de um meio a temperatura  $T_\infty$ , com um coeficiente de troca  $h$ , ou seja, a condição de Dirichlet é agora substituída pela condição de Robin.

A equação diferencial para o problema térmico no líquido é a seguinte

$$k_l \frac{\partial T_l^2}{\partial x^2} = \rho_l c_l \frac{\partial T_l}{\partial t} \quad (2.96)$$

e a condição de contorno na interface sólido-líquido ( $x = \delta$ ), considerando que  $T_s < T^*$ , fica então

$$-k_l \frac{\partial T_l}{\partial x} \Big|_{x=\delta} = \rho_s \lambda \frac{d\delta}{dt} - k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \Big|_{x=\delta} \quad (2.97)$$

Adotando as seguintes variáveis adimensionais

$$\theta_l = \frac{T_l - T^*}{T_\infty - T^*} = \frac{T_l - T^*}{\Delta T} \quad \theta_s = \frac{T_s - T^*}{T_\infty - T^*} = \frac{T_s - T^*}{\Delta T} \quad (2.98)$$

$$X = \frac{x}{L} \quad \Delta_l = \frac{\delta_l}{L} \quad \Delta_s = \frac{\delta_s}{L} \quad \eta_l(t) = \frac{x}{\delta_l(t)} = \frac{X}{\Delta_l(t)} \quad (2.99)$$

$$\tau = Fo Ste = \frac{\alpha t}{L^2} \frac{c \Delta T}{\lambda} \quad (2.100)$$

a eq. (2.96) torna-se, de forma idêntica ao problema de Stefan,

$$\frac{\partial \theta_l}{\partial \tau} - \frac{\eta_l}{\Delta_l} \frac{d\Delta_l}{d\tau} \frac{\partial \theta_l}{\partial \eta_l} = \frac{1}{\Delta_l^2 Ste} \frac{\partial^2 \theta_l}{\partial \eta_l^2} \quad (2.101)$$

e a condição de contorno em  $x = \delta$ , representada pela eq. (2.97), fica então

$$-\frac{\partial \theta_l}{\partial X} = \frac{d\Delta_l}{d\tau} - \frac{k_s}{k_l} \frac{\partial \theta_s}{\partial X} \quad (2.102)$$

Observe-se que a equação diferencial do domínio líquido, eq. (2.101), por tratar-se da mesma equação do problema de Stefan, é integrada numericamente de forma idêntica, e por este motivo esta integração não será repetida aqui.

A fim de imobilizar também o domínio sólido, seja a seguinte coordenada adimensional

$$\eta_s(t) = \frac{x - \delta_l}{\delta_s} = \frac{L X - L \Delta_l}{L \Delta_s} = \frac{X - \Delta_l(t)}{\Delta_s(t)} \quad (2.103)$$

observando que  $0 \leq \eta_s \leq 1$ .

Também de forma idêntica ao realizado no problema de Stefan, pode-se escrever, referente à eq. (2.102),

$$\frac{\partial \theta_l}{\partial X} = \frac{1}{\Delta_l} \frac{\partial \theta_l}{\partial \eta_l} \quad (2.104)$$

e

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial X} = \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \frac{\partial \eta_s}{\partial X} + \frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial X} \quad (2.105)$$

e como  $\partial \eta_s / \partial X = 1 / \Delta_s$  e  $\partial \tau / \partial X = 0$ , tem-se que

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial X} = \frac{1}{\Delta_s} \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \quad (2.106)$$

Substituindo as equações (2.104) e (2.106) na eq. (2.102), obtém-se

$$\frac{d\Delta_l}{d\tau} = -\frac{1}{\Delta_l} \frac{\partial \theta_l}{\partial \eta_l} + \frac{k_s}{\Delta_s k_l} \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \quad (2.107)$$

A equação anterior fornece  $d\Delta_l/d\tau$ , para ser usada na eq. (2.101).

Novamente o método numérico a ser utilizado é o dos volumes finitos, onde o domínio de solução é dividido em volumes de controle.

Na figura 2.13 é mostrada a discretização de todo o domínio, devendo-se observar que  $d\Delta_s/d\tau = -d\Delta_l/d\tau$ . Adotou-se ainda o número de volumes do líquido igual ao do sólido. Portanto  $\Delta\eta_s = \Delta\eta_l$ , já que tanto  $\eta_s$  como  $\eta_l$  variam de 0 a 1.

Discretizando então o lado direito da eq. (2.107), tem-se

$$\frac{d\Delta_l}{d\tau} = -\frac{1}{\Delta_l} \frac{(\theta_N - \theta_{N-1})}{\Delta\eta_l/2} + \frac{k_s}{\Delta_s k_l} \frac{(\theta_{N+1} - \theta_N)}{\Delta\eta_s/2} \quad (2.108)$$

mas  $\theta_N = 0$ , então

$$\left(\frac{d\Delta_l}{d\tau}\right)^0 = \frac{\theta_{l(N-1)}^0}{\Delta_l^0 (\Delta\eta_l/\sqrt{2})} + \frac{k_s \theta_{s(N+1)}^0}{k_l \Delta_s^0 (\Delta\eta_s/\sqrt{2})} \quad (2.109)$$

o que exige o conhecimento do campo de  $\theta$  também no sólido.

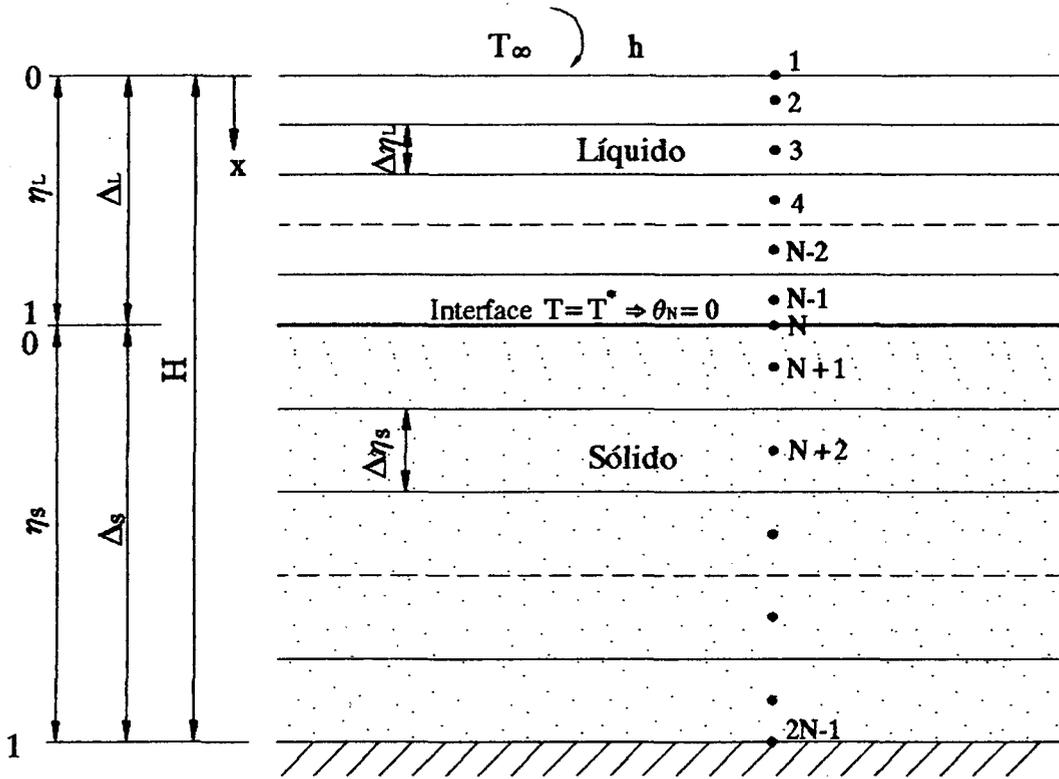


Fig. 2.13 Discretização do domínio de solução

Os próximos passos, por serem idênticos ao problema de Stefan, serão aqui simplesmente transcritos sequencialmente

$$\Delta_l^{1/2} \cong \Delta_l^0 + \left(\frac{d\Delta_l}{d\tau}\right)^0 \frac{\Delta\tau}{2} \quad (2.110)$$

$$\left(\frac{d\Delta_l}{d\tau}\right)^{1/2} = \frac{\theta_{N-1}^{1/2}}{\Delta_l^{1/2} (\Delta\eta_{l(N-1)}/\sqrt{2})} \quad (2.111)$$

$$\dot{m}_l = -\eta_l \left(\frac{d\Delta_l}{d\tau}\right)^{1/2} \quad (2.112)$$

$$\Delta_l = \Delta_l^0 + \frac{\Delta\tau}{2} \left[ \left( \frac{d\Delta_l}{d\tau} \right)^0 + \left( \frac{d\Delta_l}{d\tau} \right)^{1/2} \right] \quad (2.113)$$

$$a_{lP} \theta_{lP} = a_{lE} \theta_{lE} + a_{lW} \theta_{lW} + a_{lP}^0 \theta_{lP}^0 \quad (2.114)$$

onde

$$a_{lE} = \frac{\dot{m}_{le}}{\text{EXP} [\dot{m}_{le} (\eta_{lE} - \eta_{lP}) \Delta_l \text{Ste}] - 1} \quad (2.115)$$

$$a_{lW} = \frac{\dot{m}_{lv} \text{EXP} [\dot{m}_{lv} (\eta_{lP} - \eta_{lW}) \Delta_l \text{Ste}]}{\text{EXP} [\dot{m}_{lv} (\eta_{lP} - \eta_{lW}) \Delta_l \text{Ste}] - 1} \quad (2.116)$$

$$a_{lP}^0 = \frac{\Delta_l \text{Ste}}{\Delta\tau} (\eta_{le} - \eta_{lv}) \quad (2.117)$$

e

$$a_{lP} = a_{lE} + a_{lW} + a_{lP}^0 \quad (2.118)$$

Para o volume de controle adjacente à fronteira líquido-ambiente, a condição de controle requer que

$$h (\theta_\infty - \theta_1) = \frac{k_l}{\Delta x_l / 2} (\theta_1 - \theta_2) \quad (2.119)$$

mas  $\Delta x_l = \delta_l \Delta \eta_l$ ,  $\delta_l = \Delta_l H$  e  $\theta_\infty = 1$ . Rearranjando a eq. (2.119) tem-se

$$\frac{h H \Delta_l \Delta \eta_l}{2k_l} (1 - \theta_1) = (\theta_1 - \theta_2) \quad (2.120)$$

como  $Bi_l = (h H) / k_l$  tem-se ainda que

$$(2 + Bi_l \Delta_l \Delta \eta_l) \theta_1 = 2 \theta_2 + Bi_l \Delta_l \Delta \eta_l \quad (2.121)$$

portanto, na forma geral da eq. (2.114) tem-se, para o ponto nodal 1

$$a_{lE} = 2 \quad (2.122)$$

$$a_{lw} = 0 \quad (2.123)$$

$$a_{lp}^0 = Bi_l \Delta_l \Delta \eta_l \quad (2.124)$$

Tendo discretizado a equação diferencial associada ao problema térmico no líquido, a atenção agora será voltada para o problema térmico no sólido. Um balanço de energia térmica no sólido requer que

$$k_s \frac{\partial T_s^2}{\partial x^2} = \rho_s c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} \quad (2.125)$$

A condição de contorno na interface sólido-líquido,  $x = \delta$ , já está descrita pela eq. (2.97), e em  $x = H$  tem-se fluxo de calor nulo.

Adimensionalizando a eq. (2.125) fazendo uso das variáveis definidas nas equações (2.98) a (2.100), obtém-se

$$\frac{\partial^2 \theta_s}{\partial X^2} = Ste \frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} \quad (2.126)$$

Uma vez que  $\theta = \theta(\eta_s, \tau)$ , tem-se

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial X} = \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \frac{\partial \eta_s}{\partial X} + \frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial X} \quad (2.127)$$

mas  $\partial \tau / \partial X = 0$  e  $\partial \eta_s / \partial X = 1 / \Delta_s$ , então

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial X} = \frac{1}{\Delta_s} \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \quad (2.128)$$

ainda

$$\frac{\partial^2 \theta_s}{\partial X^2} = \frac{\partial}{\partial X} \left( \frac{\partial \theta_s}{\partial X} \right)$$

$$\frac{\partial^2 \theta_s}{\partial X^2} = \frac{\partial}{\partial X} \left( \frac{1}{\Delta_s} \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \right)$$

$$\frac{\partial^2 \theta_s}{\partial X^2} = \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \frac{\partial}{\partial X} \frac{1}{\Delta_s} + \frac{1}{\Delta_s} \frac{\partial}{\partial X} \left( \frac{\partial \theta_s}{\partial X} \right) \quad (2.129)$$

mas  $\partial(1/\Delta_s)/\partial X = 0$  então

$$\frac{\partial^2 \theta_s}{\partial X^2} = \frac{1}{\Delta_s} \frac{\partial}{\partial \eta_s} \left( \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \right) \frac{\partial \eta_s}{\partial X} \quad (2.130)$$

e como  $\partial \eta_s / \partial X = 1/\Delta_s$ , tem-se finalmente que

$$\frac{\partial^2 \theta_s}{\partial X^2} = \frac{1}{\Delta_s^2} \frac{\partial^2 \theta_s}{\partial \eta_s^2} \quad (2.131)$$

continuando

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} = \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \frac{\partial \eta_s}{\partial \tau} + \frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial \tau}$$

$$= \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{X}{\Delta_s} \right) - \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\Delta_l}{\Delta_s} \right) \right] + \frac{\partial \theta_s}{\partial \tau}$$

$$= \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \left[ - \frac{X}{\Delta_s^2} \frac{d\Delta_s}{d\tau} - \left( \frac{-\Delta_s \frac{d\Delta_s}{d\tau} - \Delta_l \frac{d\Delta_s}{d\tau}}{\Delta_s^2} \right) \right] + \frac{\partial \theta_s}{\partial \tau}$$

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} = \frac{1}{\Delta_s^2} \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \frac{d\Delta_s}{d\tau} \left[ -X + \Delta_s + \Delta_l \right] + \frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} \quad (2.132)$$

mas  $X = \eta_s \Delta_s + \Delta_l$ , então

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} = - \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \frac{d\Delta_s}{d\tau} \frac{1}{\Delta_s} (\eta_s - 1) + \frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} \quad (2.133)$$

Substituindo as equações (2.131) e (2.133) na eq. (2.126), obtém-se

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} - \frac{\eta_s - 1}{\Delta_s} \frac{d\Delta_s}{d\tau} \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} = \frac{1}{\Delta_s^2 Ste} \frac{\partial^2 \theta_s}{\partial \eta_s^2} \quad (2.134)$$

Comparando esta equação com a eq. (2.60), pode-se observar que o termo  $(\eta_s - 1)/\Delta_s$  é o único que difere do problema de Stefan, onde tinha-se  $\eta_l/\Delta_l$ .

Para facilitar a integração numérica da eq. (2.134), note-se que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \eta_s} \left( \frac{\eta_s - 1}{\Delta_s} \frac{d\Delta_s}{d\tau} \theta_s \right) &= \frac{\eta_s - 1}{\Delta_s} \frac{d\Delta_s}{d\tau} \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} + \theta_s \frac{\partial}{\partial \eta_s} \left( \frac{\eta_s - 1}{\Delta_s} \frac{d\Delta_s}{d\tau} \right) \\ \frac{\partial}{\partial \eta_s} \left( \frac{\eta_s - 1}{\Delta_s} \frac{d\Delta_s}{d\tau} \theta_s \right) &= \frac{\eta_s - 1}{\Delta_s} \frac{d\Delta_s}{d\tau} \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} + \frac{1}{\Delta_s} \frac{d\Delta_s}{d\tau} \theta_s \end{aligned} \quad (2.135)$$

Substituindo agora o primeiro termo do lado direito da equação anterior na equação (2.134), obtém-se

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} + \frac{1}{\Delta_s} \frac{d\Delta_s}{d\tau} \theta_s - \frac{\partial}{\partial \eta_s} \left( \frac{\eta_s - 1}{\Delta_s} \frac{d\Delta_s}{d\tau} \theta_s \right) = \frac{1}{\Delta_s^2 Ste} \frac{\partial^2 \theta_s}{\partial \eta_s^2} \quad (2.136)$$

ou, observando que

$$\frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} + \frac{1}{\Delta_s} \frac{d\Delta_s}{d\tau} \theta_s = \frac{1}{\Delta_s} \frac{\partial}{\partial \tau} (\Delta_s \theta_s) \quad (2.137)$$

tem-se

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\Delta_s \theta_s) - \frac{\partial}{\partial \eta_s} \left( (\eta_s - 1) \frac{d\Delta_s}{d\tau} \theta_s \right) = \frac{1}{\Delta_s Ste} \frac{\partial^2 \theta_s}{\partial \eta_s^2} \quad (2.138)$$

Reescrevendo a equação anterior em termos de fluxo

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\Delta_s \theta_s) + \frac{\partial}{\partial \eta_s} (J_s) = 0 \quad (2.139)$$

onde

$$J_s = \dot{m}_s \theta_s - \frac{1}{\Delta_s \text{Ste}} \frac{\partial \theta_s}{\partial \eta_s} \quad (2.140)$$

e

$$\dot{m}_s = -(\eta_s - 1) \frac{d\Delta_s}{d\tau} \quad (2.141)$$

A equação (2.139) possui forma idêntica à respectiva equação do líquido, (2.68), portanto a sua integração produz os mesmos coeficientes  $a_E$ ,  $a_W$  e  $a_P^0$ , trocando-se apenas os  $\eta$  e  $\dot{m}$ , que agora são os do sólido.

Conhecido o campo de temperaturas faz-se

$$\Delta_s^{1/2} \cong \Delta_s^0 + \left( \frac{d\Delta_s}{d\tau} \right)^0 \frac{\Delta\tau}{2} \quad (2.142)$$

mas como  $(d\Delta_s/d\tau)^0 = - (d\Delta_l/d\tau)^0$ , tem-se da equação anterior

$$\Delta_s^{1/2} \cong \Delta_s^0 - \left( \frac{d\Delta_l}{d\tau} \right)^0 \frac{\Delta\tau}{2} \quad (2.143)$$

Aplicando a eq. (2.109) no tempo  $\tau + \Delta\tau/2$ , mas mantendo os campos de  $\theta$  no tempo  $\tau$ , por não serem ainda conhecidos os campos de  $\theta$  no tempo  $\tau + \Delta\tau$ , obtém-se

$$\left( \frac{d\Delta_l}{d\tau} \right)^{1/2} = \frac{\theta_{l(N-1)}^0}{\Delta_l^{1/2} (\Delta\eta_l/2)} + \frac{k_s \theta_{s(N+1)}^0}{k_l \Delta_s^{1/2} (\Delta\eta_s/2)} \quad (2.144)$$

Ainda,  $\dot{m}_s = -(\eta_s - 1) (d\Delta_s/d\tau)$ , e como

$$\left( \frac{d\Delta_s}{d\tau} \right)^{1/2} = - \left( \frac{d\Delta_l}{d\tau} \right)^{1/2} \quad (2.145)$$

tem-se que

$$\dot{m}_s = (\eta_s - 1) \left( \frac{d\Delta_l}{d\tau} \right)^{1/2} \quad (2.146)$$

$\Delta$  espessura de sólido, no tempo  $\tau + \Delta\tau$ , pode ser

calculada da seguinte forma

$$\Delta_s = \Delta_s^0 + \frac{\Delta\tau}{2} \left[ \left( \frac{d\Delta_s}{d\tau} \right)^0 + \left( \frac{d\Delta_s}{d\tau} \right)^{1/2} \right] \quad (2.147)$$

ou

$$\Delta_s = \Delta_s^0 - \frac{\Delta\tau}{2} \left[ \left( \frac{d\Delta_l}{d\tau} \right)^0 + \left( \frac{d\Delta_l}{d\tau} \right)^{1/2} \right] \quad (2.148)$$

O algoritmo de solução, para a determinação do campo de temperaturas no sólido, será então

- (i) Conhecidos os valores de  $\theta_l^0$ ,  $\theta_s^0$ ,  $\Delta_l^0$ ,  $\Delta_s^0$  e  $(d\Delta_l/d\tau)^0$ , calcula-se  $\Delta_l^{1/2}$  pela eq. (2.110),  $\Delta_s^{1/2}$  pela eq. (2.143),  $(d\Delta_l/d\tau)^{1/2}$  pela eq. (2.144) e  $\dot{m}_s$  pela eq. (2.146).
- (ii) Calcula-se  $\Delta_s$  pela eq. (2.148).
- (iii) Com  $\theta_s^0$ ,  $\dot{m}_s$  e  $\Delta_s$ , calcula-se  $\theta_s^{\tau+\Delta\tau}$  pelo TDMA [Patankar, 1980, p. 52], por exemplo.
- (iv) Retorna-se ao passo (i), após ter resolvido o campo do líquido no novo avanço no tempo.

A inicialização do cálculo, é feita da mesma forma já descrita no problema de Stefan.

Tudo o que foi visto até o momento baseou-se no domínio mostrado na figura 2.13, ou seja, uma parte do domínio encontrava-se em estado líquido e outra em estado sólido.

Entretanto, como a condição inicial do sistema é  $T_s < T^*$ , para qualquer  $x$ , existe um primeiro período de tempo onde o sistema recebe calor do ambiente sem ocorrer mudança de fase (fusão), que será denominado de fase pré-fusão. O cálculo do campo de  $\theta_s$  durante esta fase é indispensável, uma vez que este campo será a condição inicial para a fase onde a fusão propriamente dita passa a ocorrer.

A figura 2.14 mostra a discretização do domínio, constituído somente por sólido, durante a fase pré-fusão.

A equação da condução do calor para este domínio é a seguinte

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \alpha_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} \quad (2.149)$$

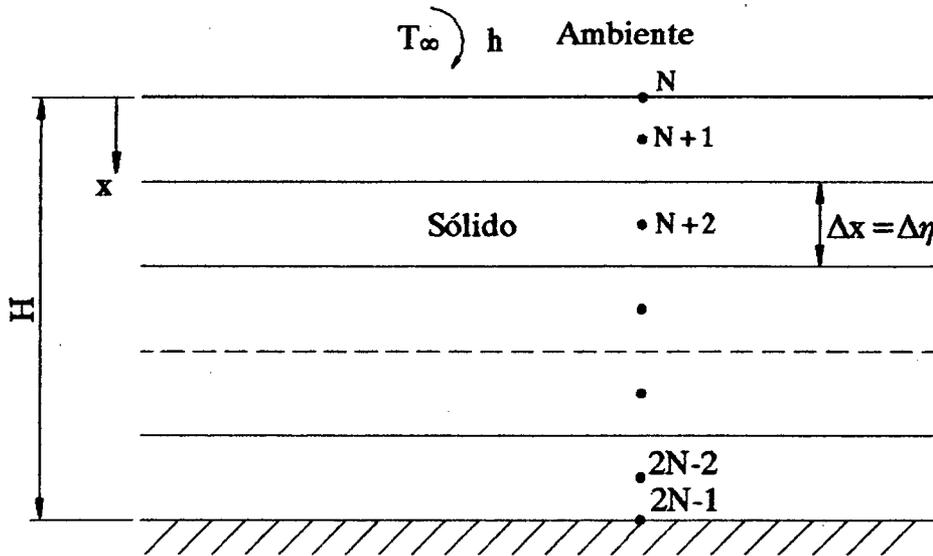


Fig. 2.14 Discretização do domínio na fase pré-fusão

Adotando as seguintes variáveis adimensionais

$$\theta_s = \frac{T_s - T^*}{T_\infty - T^*} = \frac{T_s - T^*}{\Delta T} \quad X = \frac{x}{H} \quad \tau = Fo Ste = \frac{\alpha_l t c_l \Delta T}{H^2 \lambda} \quad (2.150)$$

a eq. (2.149) fica

$$Ste \frac{\partial \theta_s}{\partial \tau} = \frac{\alpha_s}{\alpha_l} \frac{\partial^2 \theta_s}{\partial X^2} \quad (2.151)$$

Integrando a equação acima, segundo o método dos volumes finitos descrito por Patankar, 1980, obtém-se

$$a_{P \text{ oP}} \theta_P = a_{E \text{ oE}} \theta_E + a_{V \text{ oV}} \theta_V + a_{P \text{ oP}}^0 \theta_P^0 \quad (2.152)$$

onde para os pontos nodais internos, observando que  $\Delta X = \Delta \eta$

$$a_E = a_W = \frac{\alpha_s / \alpha_l}{\Delta\eta} \quad (2.153)$$

$$a_P^o = \frac{Ste \Delta\eta}{\Delta\tau} \quad (2.154)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_P^o \quad (2.155)$$

Para o ponto nodal  $N$ , da fronteira sólido-ambiente, a condição de contorno de Robin exige que

$$h(\theta_\infty - \theta_N) = \frac{k_s}{\Delta x / 2} (\theta_N - \theta_{N+1}) \quad (2.156)$$

e como  $\Delta x = H \Delta X$  e  $\theta_\infty = 1$ , rearranjando a equação anterior

$$\frac{h H \Delta X}{2k_s} (1 - \theta_N) = (\theta_N - \theta_{N+1}) \quad (2.157)$$

mas  $Bi_s = (h H) / k_s$  e  $\Delta X = \Delta\eta$ , assim

$$(2 + Bi_s \Delta\eta) \theta_N = 2 \theta_{N+1} + Bi_s \Delta\eta \quad (2.158)$$

portanto, na forma geral da eq. (2.152) tem-se que

$$a_E = 2 \quad (2.159)$$

$$a_W = 0 \quad (2.160)$$

$$a_P^o = Bi_s \Delta\eta \quad (2.161)$$

Para representar o fluxo nulo, na outra fronteira do domínio, faz-se  $\theta_{2N-1} = \theta_{2N-2}$ , onde os coeficientes, na forma geral da eq. (2.152), para  $\theta_{2N-2}$  são

$$a_E = 0 \quad (2.162)$$

$$a_W = \frac{\alpha_s / \alpha_l}{\Delta\eta} \quad (2.163)$$

$$a_p^o = \frac{Ste \Delta\eta}{\Delta\tau} \quad (2.164)$$

A fim de exemplificar um problema deste tipo, foi resolvido um caso onde uma barra de gelo com espessura de 35 mm, na configuração mostrada na figura 2.12, inicialmente a  $T_s = -15^\circ\text{C}$  é fundida num ambiente a  $T_\infty = 20^\circ\text{C}$ , segundo os seguintes parâmetros:  $Bi_l = 0,290698$ ,  $Bi_s = 0,078125$ ,  $Ste = 0,5$  e  $\alpha_s/\alpha_l = 3,720930$ . Foi empregada uma malha com 20 pontos nodais e um incremento de tempo  $\Delta\tau = 0,0125$ .

A figura 2.15 mostra os campos de temperaturas do sólido, na fase pré-fusão, em três instantes diferentes, desde a distribuição inicial de temperaturas até o final desta fase, que coincide com o início da fase de fusão.

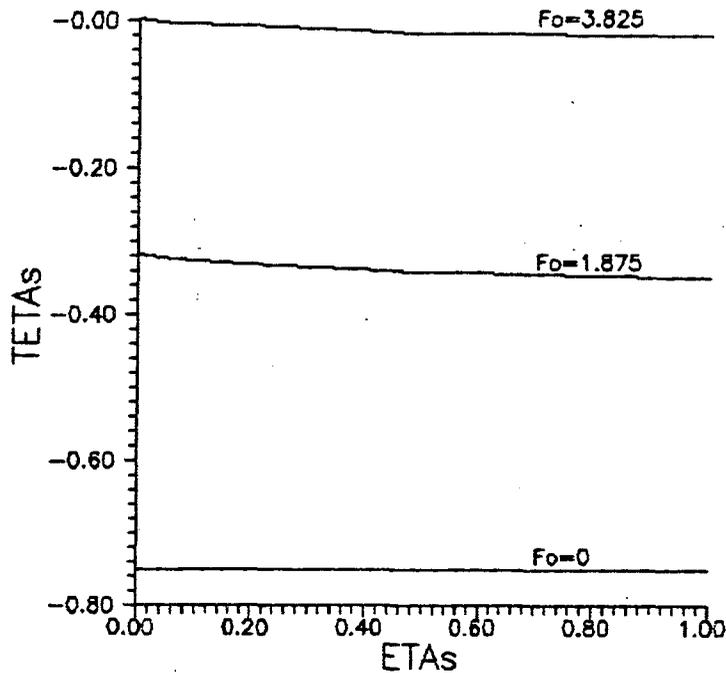


Fig. 2.15 Campos de temperaturas do sólido, na fase pré-fusão

A figura 2.16 mostra os campos de temperatura do líquido, na fase de fusão, em três instantes diferentes, desde o início da fusão, passando por um momento intermediário,  $Fo = 7,7$ , onde  $A_l = 0,499$ , até a fusão total do sólido,  $Fo = 12,025$ .

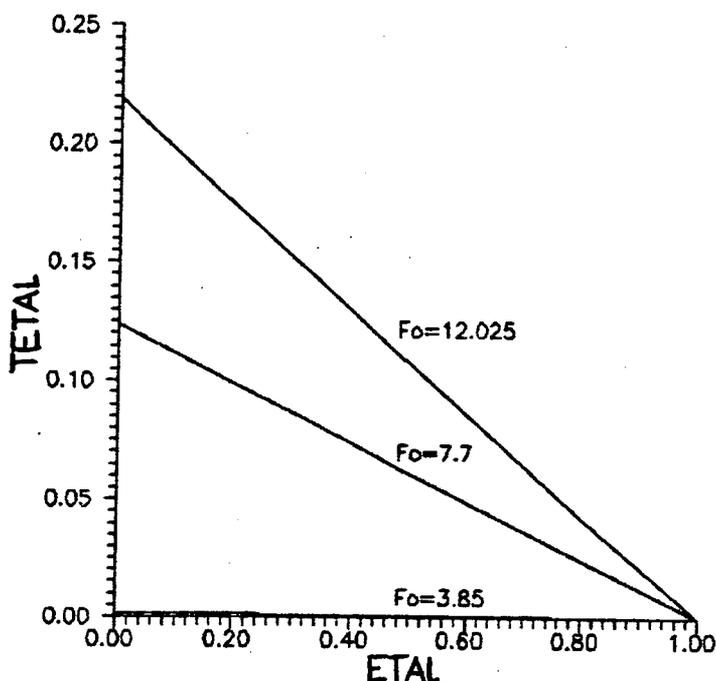


Fig. 2.16 Campos de temperaturas do líquido, na fase de fusão

#### 2.4.3 OS PROBLEMAS DE STEFAN E NEUMANN COM FORMULAÇÃO EM ENTALPIA

São várias as formulações em entalpia, para problemas de mudança de fase, disponíveis na literatura. Dentre tais formulações destacam-se aquelas apresentadas por Shamsundar e Sparrow, 1975, Voller e Cross, 1980, Bennon e Incropera, 1987, Voller e Prakash, 1987, Cao et al., 1989, Lacroix e Voller, 1990. Algumas incluem convecção natural, nos casos onde a mudança de fase ocorre numa temperatura discreta (substâncias puras e ligas eutéticas), e também difusão de espécies químicas, no caso de ligas não eutéticas.

Com o objetivo de exemplificar este tipo de abordagem, será apresentada aqui uma formulação em entalpia com malha fixa, aplicável inclusive à geometrias tridimensionais [Cao et al., 1989].

A equação da energia para um problema puramente difusivo, em coordenadas cartesianas bidimensionais, é dada por

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (2.165)$$

Note-se que

$$\frac{dh}{dT} = c(T) \quad (2.166)$$

onde  $h$  é a entalpia específica, e  $c$  é o calor específico a pressão constante.

Considerando que os calores específicos do sólido e do líquido são constantes, que a mudança de fase ocorre a uma temperatura discreta  $T^*$ , e convencionando que  $h = 0$  quando o material estiver na fase sólida a  $T^*$ , como pode ser visto na figura 2.17, tem-se para a fase sólida ( $h \leq 0$ ) que

$$T = T^* + \frac{h}{c_s} \quad (2.167)$$

onde  $c_s$  é o calor específico do sólido.

Na interface sólido-líquido ( $0 < h < \lambda$ )

$$T = T^* \quad (2.168)$$

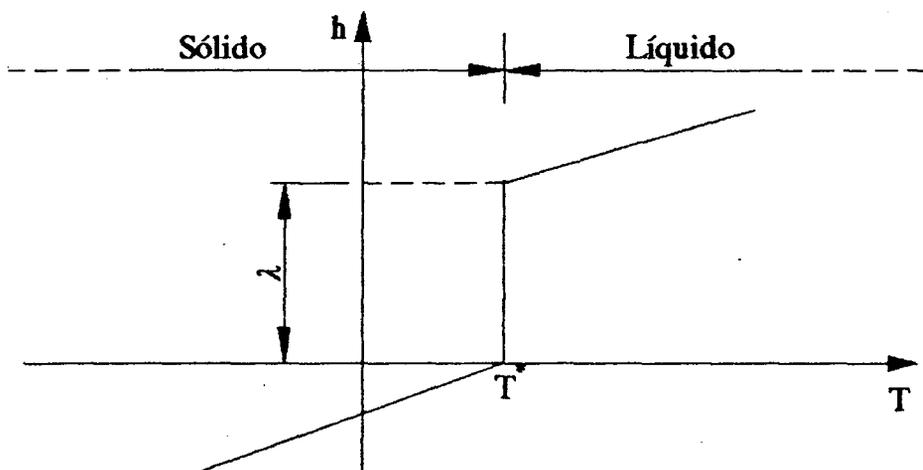


Fig. 2.17 Diagrama  $h \times T$  para uma substância pura ou liga eutética

e na fase líquida ( $h \geq \lambda$ )

$$T = T^* + \frac{(h - \lambda)}{c_l} \quad (2.169)$$

onde  $\lambda$  é o calor latente de fusão, e  $c_l$  é o calor específico do líquido.

Introduzindo a "temperatura de Kirchhoff" [Solomon et al., 1986]

$$T_k = \int_{T^*}^T k(\eta) d\eta \quad (2.170)$$

onde  $k(\eta)$  é a condutividade térmica obtém-se, para o sólido, considerando  $k$  constante, que

$$T_k = k_s (T - T^*) \quad (2.171)$$

Da mesma forma, para a interface sólido-líquido

$$T_k = 0 \quad (2.172)$$

e para o líquido

$$T_k = k_l (T - T^*) \quad (2.173)$$

Substituindo  $T$  da eq. (2.167) na eq. (2.171) obtém-se

$$T_k = \frac{k_s h}{c_s} \quad (2.174)$$

para a fase sólida.

Na interface

$$T_k = 0 \quad (2.175)$$

Substituindo  $T$  da eq. (2.169) na eq. (2.173) obtém-se

$$T_k = \frac{k_l(h - \lambda)}{c_l} \quad (2.176)$$

para a fase líquida.

Observando ainda que, de forma genérica,  $T = T_k/k + T^*$ , pode-se substituir tal expressão na eq. (2.165) e obter

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} = \frac{\partial^2 T_k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_k}{\partial y^2} \quad (2.177)$$

Introduzindo agora a seguinte função para  $T_k$

$$T_k = \Gamma(h)h + S(h) \quad (2.178)$$

e comparando esta função com as equações (2.174), (2.175) e (2.176), observa-se que

$$\Gamma(h) = \frac{k}{c_s} \quad \text{e} \quad S(h) = 0 \quad \text{para} \quad h \leq 0 \quad (\text{fase sólida}) \quad (2.179)$$

$$\Gamma(h) = 0 \quad \text{e} \quad S(h) = 0 \quad \text{para} \quad 0 < h < \lambda \quad (\text{interface}) \quad (2.180)$$

$$\Gamma(h) = \frac{k_l}{c_l} \quad \text{e} \quad S(h) = -\frac{\lambda k_l}{c_l} \quad \text{para} \quad h \geq \lambda \quad (\text{fase líquida}) \quad (2.181)$$

Substituindo a eq. (2.178) na eq. (2.177), obtém-se

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} = \frac{\partial^2(\Gamma h)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\Gamma h)}{\partial y^2} + P \quad (2.182)$$

onde

$$P = \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \quad (2.183)$$

A equação da energia foi então transformada numa equação não linear, com uma única variável dependente  $h$ .

Na região do líquido, longe da frente de mudança de fase, como mostra a figura 2.17, a eq. (2.182) reduz-se à seguinte forma padrão, linear, da equação da energia

$$\frac{\partial(\rho_l h)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_l \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_l \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (2.184)$$

e da mesma forma, na região do sólido

$$\frac{\partial(\rho_s h)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_s \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_s \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (2.185)$$

Na frente de mudança de fase, mostrada na figura 2.18, a equação não linear deve ser resolvida na forma mostrada em (2.182).

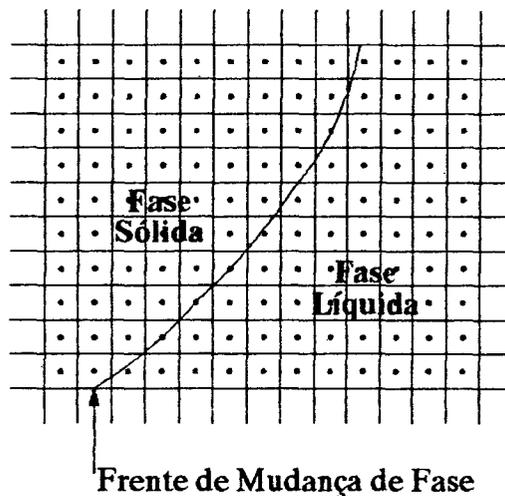


Fig. 2.18 Regiões do domínio de solução

Embora a presente formulação tenha sido descrita para situações onde a mudança de fase ocorre a uma temperatura discreta, ela pode ser aplicada a casos onde a mudança de fase ocorre ao longo de uma faixa de temperaturas. Este comportamento deve ser então devidamente representado em  $\Gamma(h)$  e  $S(h)$ , na eq. (2.178). Também podem ser incluídos termos convectivos, não havendo modificações em  $\Gamma(h)$  e  $S(h)$ , mas tendo-se que resolver o correspondente problema hidrodinâmico.

Tendo concluído a formulação do problema, passa-se ao método numérico para a sua solução. Por motivo de simplicidade, apenas na descrição do método, ater-se-á a uma situação

unidimensional.

Integrando a eq. (2.182) ao longo do volume sombreado mostrado na figura 2.19 tem-se,

$$\int_{\Delta V} \rho \frac{\partial h}{\partial t} dV = \int_{\Delta V} \left( \frac{\partial^2(\Gamma h)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right) dV \quad (2.186)$$

onde

$$\int_{\Delta V} \rho \frac{\partial h}{\partial t} dV = \rho \Delta x \frac{h_P - h_P^0}{\Delta t} \quad (2.187)$$

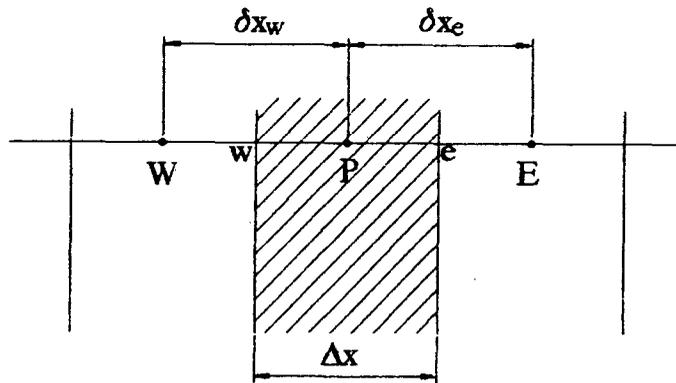


Fig. 2.19 Malha sobre o domínio de solução

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial^2(\Gamma h)}{\partial x^2} dV = \left( \frac{\partial(\Gamma h)}{\partial x} \right)_E - \left( \frac{\partial(\Gamma h)}{\partial x} \right)_W \quad (2.188)$$

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial^2(\Gamma h)}{\partial x^2} dV = \frac{\Gamma_E h_E - \Gamma_P h_P}{(\delta x)_E} - \frac{\Gamma_P h_P - \Gamma_W h_W}{(\delta x)_W} \quad (2.189)$$

$$\int_{\Delta V} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} dV = \frac{S_E - S_P}{(\delta x)_E} - \frac{S_P - S_W}{(\delta x)_W} \quad (2.190)$$

A equação discretizada, em forma genérica, pode então ser escrita

$$a_{PP} h_P = a_{EE} h_E + a_{WW} h_W + b \quad (2.191)$$

cujos coeficientes são dados por

$$a_E = \frac{\Gamma_E}{(\delta x)_e} \quad (2.192)$$

$$a_W = \frac{\Gamma_W}{(\delta x)_v} \quad (2.193)$$

$$b = \frac{\rho \Delta x h_P^0}{\Delta t} + \frac{S_E - S_P}{(\delta x)_e} - \frac{S_P - S_W}{(\delta x)_v} \quad (2.194)$$

$$a_P = \frac{\Gamma_P}{(\delta x)_e} + \frac{\Gamma_P}{(\delta x)_v} + \frac{\rho \Delta x}{\Delta t} \quad (2.195)$$

Concluída a discretização, e conhecidas as condições iniciais e de contorno, deve-se resolver a eq. (2.191) a cada incremento de tempo.

A fim de ilustrar esta formulação, passa-se agora a resolver o problema da solidificação de uma substância pura, num canal em forma quadrada, de comprimento infinito, resolvido por Voller e Cross, 1980. O canal está inicialmente cheio de líquido a temperatura de  $2^\circ\text{C}$ . No tempo  $t = 0$  a temperatura das suas paredes é colocada a  $-10^\circ\text{C}$  e assim mantida ao longo do tempo. A área da seção do canal é de  $1\text{ m}^2$  e as propriedades físicas da substância são as seguintes:  $T^* = 0^\circ\text{C}$ ,  $k_l = k_s = 2\text{ W/m}^\circ\text{C}$ ,  $c_l = c_s = 2,5\text{ MJ/kg}^\circ\text{C}$ ,  $\rho_l = \rho_s = 1\text{ kg/m}^3$  e  $\lambda = 100\text{ MJ/kg}$ .

Considerando a simetria do problema, somente um quarto do domínio é resolvido, como mostra a figura 2.20.

Para a solução é utilizada uma malha cartesiana, igualmente espaçada, de  $28 \times 28$  pontos nodais. O passo de tempo empregado para a solução,  $\Delta t$ , é de 1 minuto. Deve-se observar que contrariamente ao adotado em transferência de calor sem mudança de fase, onde os coeficientes de difusão térmica  $\Gamma$  são avaliados nas faces dos volumes de controle, no esquema em questão estes coeficientes são avaliados no centro de cada volume de controle. As equações algébricas são resolvidas pelo método linha por linha [Patankar, 1980].

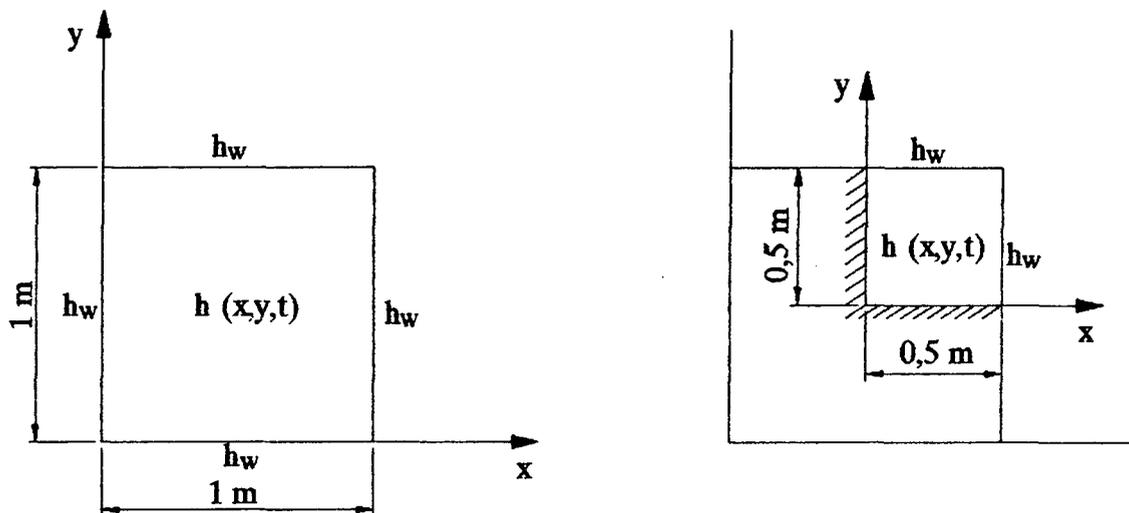


Fig. 2.20 Problema de Neumann bidimensional em canal quadrado

Os resultados apresentam excelente concordância com aqueles obtidos por Voller e Cross, sendo mostrada na figura 2.21 a evolução da frente de solidificação sobre o eixo  $x$ .

É importante observar que não há necessidade de rastrear a frente de mudança de fase, para resolver o problema. Entretanto pode-se localizá-la, a cada momento, a partir do valor de  $h$ , lembrando que na frente de mudança de fase  $0 < h < \lambda$ .

A oscilação verificada na curva tempo  $\times$  distância da figura 2.21 deve-se ao modo como foi calculada a localização da frente de mudança de fase. A maneira mais simples de calculá-la consiste em varrer os volumes de controle da fronteira, partindo da região líquida, perguntando se  $h < \lambda$ . Quando a resposta for afirmativa, assume-se que a frente de mudança de fase está no centro deste volume de controle. Este procedimento é satisfatório no caso de malhas refinadas, causando entretanto erros relativamente grandes em malhas menos refinadas. Na presente solução, a fim de melhorar a precisão, é primeiramente localizado o volume onde a mudança de fase está ocorrendo, do modo descrito acima. Feito isto é calculada a relação  $h/\lambda$ , que é assumida diretamente como sendo a fração de sólido do volume em questão. A

seguir esta fração de sólido é tomada como a fração da dimensão do volume de controle, sobre o eixo  $x$ , preenchida por sólido. Observe-se entretanto que neste procedimento ainda persiste um certo erro, pois embora o fenômeno em questão seja bidimensional, a fração de sólido é convertida numa dimensão proporcional somente sobre o eixo  $x$ .

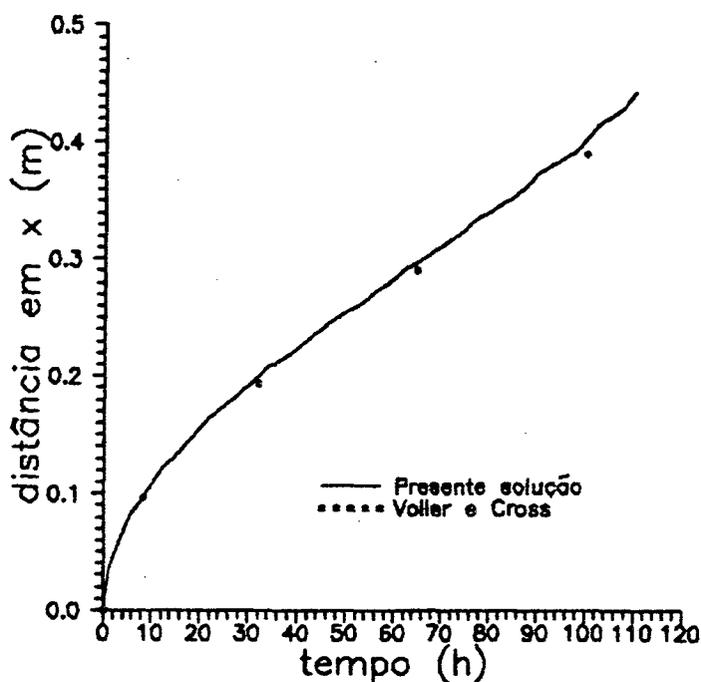


Fig. 2.21 Evolução da frente de solidificação sobre o eixo  $x$ , sendo a distância contada a partir da face direita do canal

A temperatura de cada ponto do domínio de solução também pode ser calculada, a cada momento, a partir das equações (2.167), (2.168) e (2.169).

### 3 MUDANÇA DE FASE EM PRESENÇA DE CONVECÇÃO NATURAL

#### 3.1 INTRODUÇÃO

O fornecimento ou a retirada de calor de um meio líquido sempre causam gradientes de temperatura neste meio, que por sua vez originam gradientes de densidade. Os gradientes de densidade podem, dependendo da configuração do sistema, causar correntes convectivas. Esta movimentação de fluido, uma vez presente, pode atuar de forma importante no processo de troca de calor e massa do sistema.

Em configurações horizontais, onde o aquecimento é feito pela face inferior, tem-se um problema de estabilidade. Até um determinado valor do número de Rayleigh,

$$Ra = \frac{g\beta(T_p - T^*)\delta^3}{\nu^2} Pr \quad (3.1)$$

denominado  $Ra$  crítico, existe apenas condução. Após este  $Ra$  surgem correntes convectivas. Na figura 3.1 é mostrado, em corte, um padrão que estas correntes podem assumir. Deve-se observar que neste caso a frente de mudança de fase assume uma forma irregular, já que o coeficiente de troca de calor é maior nas regiões onde o fluido ascendente atinge o sólido.

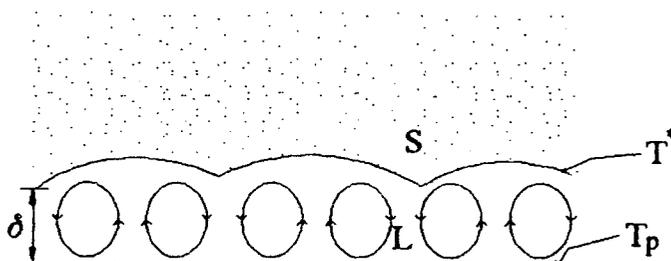


Fig. 3.1 Convecção natural em um sistema horizontal

Em sistemas verticais a convecção natural sempre está presente, ocorrendo gradualmente a mudança entre os regimes condutivo e convectivo.

### 3.2 FORMULAÇÃO EM TEMPERATURA

Na presença de convecção natural a determinação dos campos de temperatura e velocidade são problemas acoplados.

Uma abordagem pioneira deste tipo de problema foi realizada por Sparrow et al., 1977, para a geometria axissimétrica vertical mostrada na figura 3.2. Neste caso todo o sólido encontra-se a  $T^*$ , dispensando portanto a solução da equação da energia nesta região. Dados experimentais para esta mesma geometria, com parafina como material de mudança de fase, visando aplicações em armazenadores de energia térmica, são encontrados em Souza Mendes e Pinho Brasil, 1987.

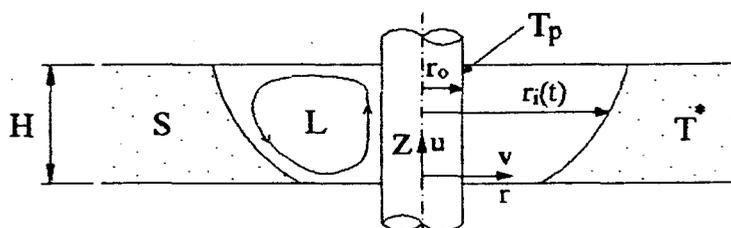


Fig. 3.2 Fusão com convecção natural em geometria axissimétrica

Nesta geometria a equação da energia é dada por

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial (uT)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial (rvT)}{\partial r} = \alpha \nabla^2 T \quad (3.2)$$

Para o cálculo de  $u$  e  $v$  é necessária a solução das

equações do movimento

$$\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rv)}{\partial r} = 0 \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(ruv)}{\partial r} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial z} + \nu \nabla^2 u - g \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rv^2)}{\partial r} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial r} + \nu \nabla^2 v - \frac{\nu v}{r^2} \quad (3.5)$$

A dependência de  $\rho$  com  $T$  pode ser expressa linearmente da seguinte forma

$$\rho = \rho^* - \rho^* \beta (T - T^*) \quad (3.6)$$

onde  $\beta$  é o coeficiente de expansão térmica do líquido.

A força de empuxo resultante, na unidade de volume, causadora das correntes convectivas, é a seguinte

$$F_e = - \frac{\partial p'}{\partial z} - \rho g \quad (3.7)$$

Multiplicando a equação acima por  $1/\rho^*$ , e substituindo  $\rho$  da equação 3.6, obtém-se

$$- \frac{1}{\rho^*} \frac{\partial p'}{\partial z} - \frac{\rho}{\rho^*} g = - \frac{1}{\rho^*} \frac{\partial p'}{\partial z} - g + g \beta (T - T^*) \quad (3.8)$$

$$= - \frac{1}{\rho^*} \frac{\partial}{\partial z} (p' + \rho^* g z) + g \beta (T - T^*) \quad (3.9)$$

redefinindo a pressão, de forma a incorporar a parcela hidrostática, resulta em

$$p = p' + \rho^* g z \quad (3.10)$$

e aproximando  $\rho/\rho^* = 1$  (aproximação de Boussinesq), obtém-se

$$- \frac{1}{\rho^*} \frac{\partial p'}{\partial z} - g = - \frac{1}{\rho^*} \frac{\partial p}{\partial z} + g \beta (T - T^*) \quad (3.11)$$

Substituindo esta nova expressão para o termo de empuxo, a equação 3.4 fica então

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(ruv)}{\partial r} = - \frac{1}{\rho^*} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \nabla^2 u + g \beta (T - T^*) \quad (3.12)$$

Na forma anterior a temperatura aparece explicitamente no termo fonte da equação do movimento. Gradientes de temperatura tornam este termo não nulo, induzindo o movimento do fluido.

O domínio de solução será agora imobilizado, de forma semelhante ao já realizado anteriormente (seções 2.4.1 e 2.4.2), com a seguinte transformação de coordenadas

$$\xi = \frac{z}{r_0} \quad e \quad \eta = \frac{(r - r_0)}{(r_i - r_0)} \quad (3.13)$$

que faz com que  $0 \leq \eta \leq 1$ , e observando também que  $r_i = r_i(z, t)$ , tem-se

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z} \quad (3.14)$$

mas

$$\frac{\partial \xi}{\partial z} = \frac{1}{r_0} \quad (3.15)$$

e

$$\frac{\partial \eta}{\partial z} = \frac{\partial \eta}{\partial r_i} \frac{dr_i}{dz} = \frac{\eta}{r_i - r_0} \frac{dr_i}{dz} \quad (3.16)$$

assim

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{r_0} \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\eta}{r_i - r_0} \frac{dr_i}{dz} \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (3.17)$$

Da mesma forma

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial r} = \frac{1}{r_i - r_0} \frac{\partial}{\partial \eta} \quad (3.18)$$

A fim de diminuir a complexidade das equações transformadas, sem prejuízo para a apresentação da metodologia, o segundo termo do lado direito da eq.(3.17) é desprezado, apenas neste operador. Isto significa assumir que a inclinação da frente de mudança de fase, dada por  $dr_i/dz$ , é pequena.

Adotando ainda as seguintes adimensionalizações

$$U = \frac{u}{\alpha/r_0}, \quad V = \frac{v}{\alpha/r_0}, \quad P = \frac{p}{\rho(\alpha/r_0)^2 \text{Pr}}, \quad \theta = \frac{T - T^*}{T_p - T^*} \quad (3.19)$$

$$\tau = \left( \frac{\alpha t}{r_0^2} \right) \left( \frac{c(T_p - T^*)}{\lambda} \right) = \text{Fo Ste} \quad (3.20)$$

$$\text{Ra} = \frac{g \beta (T_p - T^*) r_0^3}{\nu^2} \text{Pr} \quad \text{Ste} = \frac{c(T_p - T^*)}{\lambda} \quad (3.21)$$

o sistema de equações a ser resolvido é o seguinte

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{1}{R(Ri - 1)} \frac{\partial (RV)}{\partial \eta} = 0 \quad (3.22)$$

$$\frac{1}{\text{Pr}} \left( \text{Ste} \frac{\partial U}{\partial \tau} + \frac{\partial U^2}{\partial \xi} + \frac{1}{R(Ri - 1)} \frac{\partial (RUV)}{\partial \eta} \right) = - \frac{\partial P}{\partial \xi} + \text{Ra} \theta + \hat{\nabla}^2 U \quad (3.23)$$

$$\frac{1}{\text{Pr}} \left( \text{Ste} \frac{\partial V}{\partial \tau} + \frac{\partial (UV)}{\partial \xi} + \frac{1}{R(Ri - 1)} \frac{\partial (RV^2)}{\partial \eta} \right) = - \frac{\partial P}{\partial \eta} + \hat{\nabla}^2 V - \frac{V}{R^2} \quad (3.24)$$

$$\text{Ste} \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \frac{\partial (U\theta)}{\partial \xi} + \frac{1}{R(Ri - 1)} \frac{\partial (RV\theta)}{\partial \eta} = \hat{\nabla}^2 \theta \quad (3.25)$$

onde

$$Ri = \frac{r_i}{r_0}, \quad R = \frac{r}{r_0} = \eta (Ri - 1) + 1 \quad (3.26)$$

e  $\hat{\nabla}^2$  é o operador Laplaciano transformado,

$$\hat{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{R(Ri - 1)^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( R \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \quad (3.27)$$

Nesta altura tem-se 4 equações e 5 incógnitas, que são U, V,  $\theta$ , P e Ri. A equação que falta será obtida do seguinte balanço de energia na frente de mudança de fase, que tem a forma da parede circular de um tronco de cone,

$$-k A \frac{\partial T}{\partial n} = \rho_* \lambda \frac{\Delta \text{Vol}}{\Delta t} \quad (3.28)$$

onde  $\partial T / \partial n$  é o gradiente de temperatura na direção normal à superfície, e  $\Delta \text{Vol}$  é o volume de material fundido no tempo  $\Delta t$ .

Das figuras 3.2 e 3.3 tira-se que

$$A = 2\pi r_i \frac{\Delta z}{\sin \alpha}, \quad \Delta \text{Vol} = 2\pi r_i \Delta r_i \Delta z \quad (3.29)$$

e

$$\frac{\partial T}{\partial n} = \frac{\partial T}{\partial r} \sin \alpha - \frac{\partial T}{\partial z} \cos \alpha \quad (3.30)$$

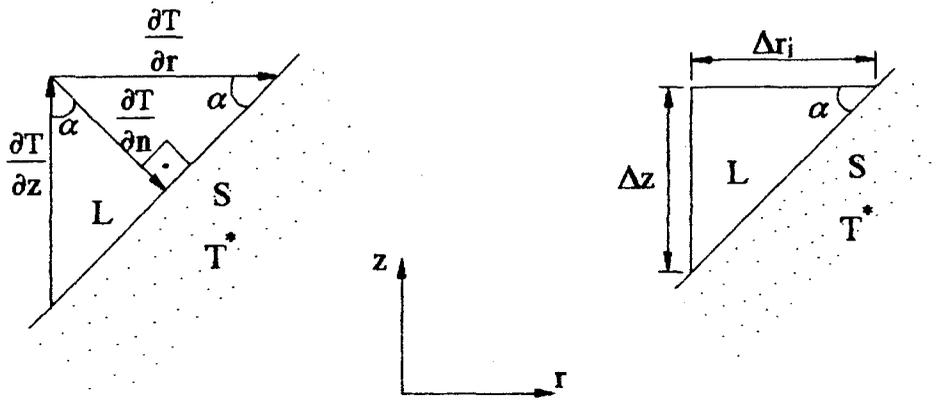


Fig. 3.3 Geometria da interface sólido-líquido

substituindo as equações (3.29) e (3.30) na equação (3.28) e rearranjando, obtém-se

$$k \left( \frac{\partial T}{\partial z} \cotg \alpha - \frac{\partial T}{\partial r} \right) = \rho_s \lambda \frac{\Delta r_i}{\Delta t} \quad (3.31)$$

Deve-se observar ainda que não existe gradiente de temperatura ao longo da interface, que está toda a  $T^*$ , ou seja,

$$\frac{\partial T}{\partial r} \cos \alpha + \frac{\partial T}{\partial z} \sin \alpha = 0 \quad (3.32)$$

multiplicando a equação anterior por  $1/\sin \alpha$ , e utilizando o fato de que

$$\cotg \alpha \cong \frac{\Delta r_i}{\Delta z} \quad (3.33)$$

obtém-se

$$\frac{\partial T}{\partial z} = - \frac{\partial T}{\partial r} \frac{\partial r_i}{\partial z} \quad (3.34)$$

Substituindo as equações (3.33) e (3.34) na equação (3.31), obtém-se

$$- k \frac{\partial T}{\partial r} \left[ \left( \frac{\Delta r_i}{\Delta z} \right)^2 + 1 \right] = \rho_s \lambda \frac{\Delta r_i}{\Delta t} \quad (3.35)$$

Desprezando o termo referente à inclinação da interface, conforme já realizado anteriormente na transformação de coordenadas, agora com menor erro por tratar-se do seu quadrado, e aproximando a razão  $\Delta r_i / \Delta t$  para a derivada, a equação (3.35) fica

$$- k \frac{\partial T}{\partial r} = \rho_s \lambda \frac{dr_i}{dt} \quad (3.36)$$

Discretizando esta equação no tempo, resulta em

$$r_i^{t+\Delta t} = r_i^t - \frac{k}{\rho_s \lambda} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r_i} \Delta t \quad (3.37)$$

ou, transformando as suas coordenadas e adimensionalizando, da mesma forma já realizada anteriormente, obtém-se a seguinte equação explícita para  $R_i$

$$R_i^{\tau+\Delta\tau} = R_i^\tau - \frac{1}{R_i^\tau - 1} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1} \Delta\tau \quad (3.38)$$

As condições de contorno são agora analisadas. Para a velocidade são assumidas as condições de não deslizamento e impermeabilidade em todos as fronteiras. A temperatura é uniforme na superfície do tubo,  $T = T_p$ , ou  $\theta = 1$  em  $\eta = 0$ . Na frente de mudança de fase a temperatura é uniforme e igual à temperatura de saturação,  $T = T^*$ , ou  $\theta = 0$  em  $\eta = 1$ . Na base,  $z = 0$ , e no topo,  $z = H$ , é assumida a condição de fluxo térmico nulo.

A condição de velocidade nula perpendicularmente à frente de mudança de fase é uma aproximação, já que esta desloca-se ao longo do tempo. Esta aproximação foi posteriormente

ratificada como sendo excelente, tanto para números de Prandtl altos [Bénard et al., 1986, Jany e Bejan, 1988], típicos de materiais de mudança de fase, como também para Pr baixos [Gobin e Bénard, 1989], encontrados em metais fundidos. Estas confirmações foram baseadas, no caso de Pr alto, em análises de ordem de magnitude, mostrando que as velocidades da frente de mudança de fase são muito menores do que as velocidades na camada limite do líquido. No caso de Pr baixo, especialmente em metais líquidos, a validação desta aproximação foi realizada através de comparações de simulações numéricas com resultados experimentais.

Uma vez estabelecido o sistema de equações governantes, bem como as suas condições de contorno, pode-se observar que o problema fica determinado por 4 parâmetros, que são :  $Ra$ ,  $H/r_0$ , Pr e Ste.

Alguns resultados obtidos por Sparrow et al., 1977, são mostrados a seguir.

A taxa de transferência de calor a partir da superfície do tubo é representada por  $Q$ , sendo portanto  $Q/H$  esta taxa de transferência na unidade de comprimento do tubo, e  $(Q/H)/k(T_p - T^*)$  sua adimensionalização. A figura 3.4 mostra o comportamento desta taxa de transferência de calor adimensional ao longo do tempo adimensional  $\tau = Fo Ste$ , para vários  $Ra$ , Pr, Ste, e  $H/r_0$ . Nos primeiros instantes de tempo o decaimento

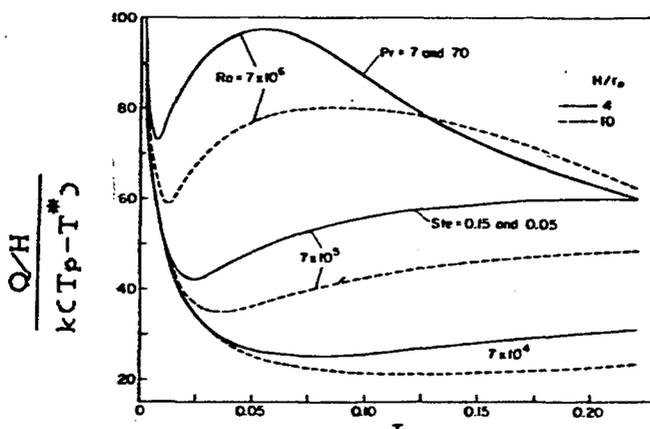


Fig 3.4 Taxa de transferência de calor adimensional ao longo do tempo adimensional, para vários  $Ra$ , Pr, Ste e  $H/r_0$ .

monotônico da taxa de troca de calor revela que o mecanismo é predominantemente condutivo. Logo após a convecção natural começa a participar ativamente do processo, causando o aparecimento de um mínimo, o crescimento até um máximo e o posterior decaimento. Para os números de Rayleigh mais baixos este comportamento é menos abrupto, mas continua ocorrendo ao longo do tempo.

Todos os casos foram simulados com  $Pr = 7$  e  $Ste = 0.15$ . Para  $Ra = 7 \times 10^6$  e  $H/r_0 = 4$  também foi simulada uma situação com  $Pr = 70$ . Conforme se pode observar na figura 3.4, o resultado é idêntico. As equações 3.23 e 3.24 mostram que se os resultados não se alteraram com  $Pr = 70$ , pode-se afirmar que este é na realidade o resultado para  $Pr \geq 7$ . Para  $Ra = 7 \times 10^5$  e  $H/r_0 = 4$ , também foi simulada uma situação com  $Ste = 0,05$ , não ocorrendo nenhuma diferença no resultado. As equações 3.23, 3.24 e 3.25 mostram a presença do número de Stefan no termo temporal, indicando que estes resultados são válidos então para  $Ste \leq 0,15$ .

A figura 3.5 mostra a posição da frente de fusão ao longo do tempo  $\tau$ . A inclinação desta frente ilustra a importância da convecção natural no processo, mais pronunciada, naturalmente, para o número de Rayleigh maior.

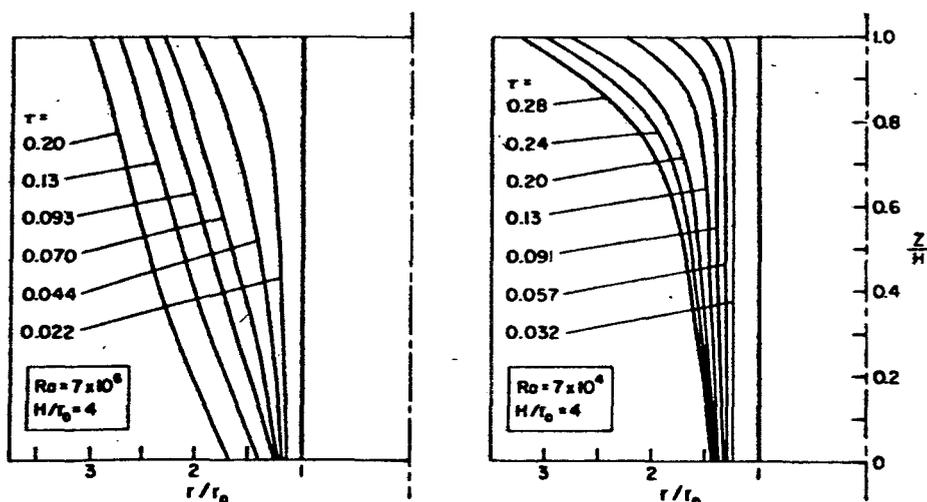


Fig 3.5 Posição da frente de fusão ao longo do tempo

Souza Mendes e Pinho Brasil, 1987, mostraram que para

baixos números de Rayleigh e tempo adimensional maior do que 0,1, as inclinações da frente de mudança de fase previstas pelo modelo anterior são menores do que aquelas observadas no experimento. Adicionalmente, para altos números de Rayleigh, quando os efeitos da convecção natural são dominantes sobre os efeitos da difusão, as velocidades de avanço da frente de mudança de fase, previstas para a região da base, são maiores do que as verificadas no experimento. São observadas ainda diferenças entre o número de Nusselt previsto e o medido. Tais discrepâncias estão associadas à simplificação realizada na equação (3.17), com o objetivo de diminuir a complexidade das equações transformadas.

### 3.3 FORMULAÇÃO EM ENTALPIA

Conforme já foi comentado, na seção 2.4.3, existem na literatura várias formulações em entalpia para problemas de mudança de fase. Naquela seção foi apresentada e exemplificada a formulação de Cao et al., 1989, para problemas envolvendo somente difusão. Nesta seção será apresentada esta mesma formulação, incluindo agora os termos convectivos.

A equação da energia, em coordenadas cartesianas bidimensionais, pode ser escrita da seguinte forma

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u h)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v h)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ k \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ k \frac{\partial T}{\partial y} \right] \quad (3.39)$$

Desenvolvendo os termos difusivos desta equação, em termos de entalpia, conforme já foi mostrado na seção 2.4.3, obtém-se

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u h)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v h)}{\partial y} = \frac{\partial^2(\Gamma h)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\Gamma h)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \quad (3.40)$$

Neste caso o fluxo total de energia é dado por

$$J = \rho u h + \rho v h - \frac{\partial(\Gamma h)}{\partial x} - \frac{\partial(\Gamma h)}{\partial y} \quad (3.41)$$

devendo-se observar que os termos difusivos são diferentes daqueles encontrados no fluxo total da formulação em temperatura, onde

$$J = \rho c u T + \rho c v T - k \frac{\partial T}{\partial x} - k \frac{\partial T}{\partial y} \quad (3.42)$$

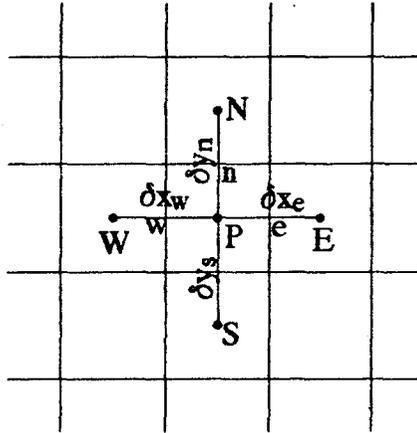


Fig. 3.6 Volume de controle para integração

Integrando a equação (3.40) em um volume de controle como o mostrado na figura 3.6, obtém-se

$$a_{PP} h_P = a_{EE} h_E + a_{WW} h_W + a_{NN} h_N + a_{SS} h_S + b \quad (3.43)$$

onde

$$a_P = a_{PE} + a_{PW} + a_{PN} + a_{PS} + \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} \rho^o \quad (3.44)$$

$$a_E = \Gamma_E D_e + \text{máx} [-F_e, 0] \quad , \quad a_{PE} = \Gamma_P D_e + \text{máx} [-F_e, 0] \quad (3.45)$$

$$a_W = \Gamma_W D_w + \text{máx} [F_w, 0] \quad , \quad a_{PW} = \Gamma_P D_w + \text{máx} [F_w, 0] \quad (3.46)$$

$$a_N = \Gamma_N D_n + \text{máx} [-F_n, 0] \quad , \quad a_{PN} = \Gamma_P D_n + \text{máx} [-F_n, 0] \quad (3.47)$$

$$a_S = \Gamma_S D_s + \text{máx} [F_s, 0] \quad , \quad a_{PS} = \Gamma_P D_s + \text{máx} [F_s, 0] \quad (3.48)$$

$$b = \frac{\rho_P^0 h_P^0 \Delta x \Delta y}{\Delta t} + D_E (S_E - S_P) - D_V (S_P - S_V) + D_N (S_N - S_P) - D_S (S_P - S_S) \quad (3.49)$$

$$D_E = \frac{\Delta y}{(\delta x)_E}, \quad D_V = \frac{\Delta y}{(\delta x)_V}, \quad D_N = \frac{\Delta x}{(\delta y)_N}, \quad D_S = \frac{\Delta x}{(\delta y)_S} \quad (3.50)$$

$$F_E = (\rho u)_E \Delta y, \quad F_V = (\rho u)_V \Delta y, \quad F_N = (\rho v)_N \Delta x, \quad F_S = (\rho v)_S \Delta x \quad (3.51)$$

Os termos do tipo máx [a,b] significam que é assumido o maior valor entre a e b. O superíndice "o" especifica que é assumido o valor da variável em questão no intervalo de tempo anterior ao que está sendo resolvido.

Quanto ao problema hidrodinâmico no líquido, este é equacionado de forma convencional. Assim, as equações governantes para o líquido, adotando-se a aproximação de Boussinesq, são as seguintes

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (3.52)$$

$$\rho \left( u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (3.53)$$

$$\rho \left( u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \rho_{ref} g \beta T \quad (3.54)$$

A fim de ilustrar uma aplicação do modelo será resolvido o problema da fusão de uma barra retangular, conforme mostrado na figura 3.7.

Inicialmente o material está todo sólido, a  $T^*$ . Num tempo  $t = 0$ , a parede da esquerda é colocada a  $T_p > T^*$ , enquanto que a parede da direita é mantida a  $T^*$ . As paredes superior e inferior são consideradas adiabáticas. Deve-se observar que o sólido é mantido durante todo o tempo a  $T^*$ , constituindo-se portanto num problema de Stefan.

Na cavidade onde o material encontra-se em estado líquido é assumida a condição de não escorregamento em todas as fronteiras.

A substância pura escolhida para a simulação é o estanho, com as seguintes propriedades físicas

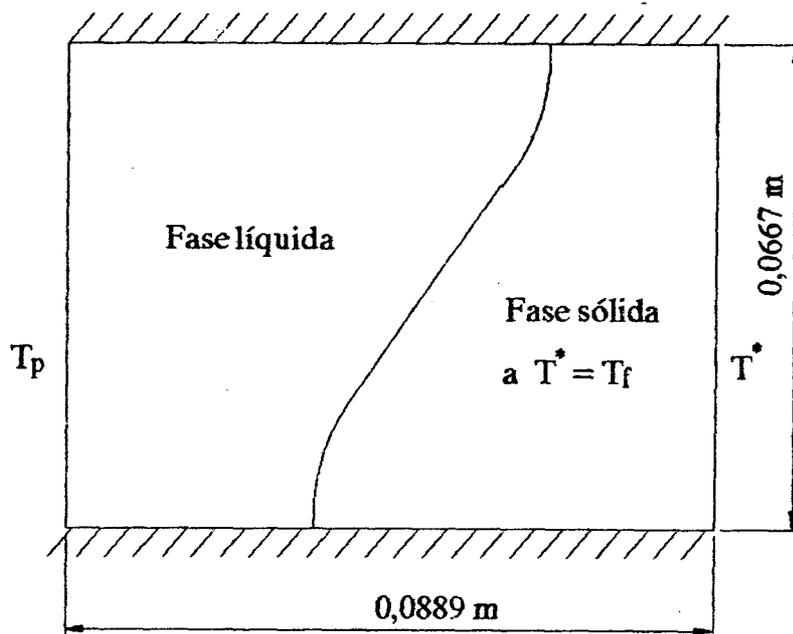


Fig. 3.7 Descrição do problema

densidade =  $6980 \text{ Kg/m}^3$

calor específico =  $257 \text{ J/Kg}^\circ\text{C}$

condutividade térmica =  $32,2 \text{ W/m}^\circ\text{C}$

difusividade térmica =  $1,795 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

viscosidade cinemática =  $2,81 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$

coeficiente de expansão volumétrica =  $106 \times 10^{-6} / ^\circ\text{C}$

temperatura de fusão =  $231,9 \text{ }^\circ\text{C}$

calor latente de fusão =  $60600 \text{ J/Kg}$

Assim,  $Pr = 0,0157$ ,  $Ra_H = 1,23 \times 10^5$  e, para  $T_p = 233,9 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $Ste = 0,00848$ .

Na solução das equações governantes foi utilizado o algoritmo SIMPLEC, para o acoplamento pressão e velocidade. É interessante observar que no presente caso tanto o SIMPLEC como o SIMPLER não apresentam vantagem em relação ao SIMPLE. A malha é cartesiana, de  $28 \times 28$  pontos nodais, refinada a partir da parede esquerda, que cede calor.

Foram empregados os passos de tempo de 1, 2, 5 e 10 segundos, ao longo da solução, além de diferentes subrelaxações

nas componentes da velocidade, correção da pressão e entalpia, visando minimizar o tempo de CPU .

Este problema foi resolvido parcialmente por Gobin e Benard, 1989, com uma formulação em temperatura, empregando uma técnica de imobilização da frente de fusão e uma transformação não ortogonal de coordenadas no domínio líquido [Faghri et al., 1984].

São disponíveis também resultados experimentais, produzidos por Gau e Viskanta, 1986 e Wolff e Viskanta, 1987. Deve-se observar entretanto que o experimento não coincide exatamente com o problema simulado, uma vez que o degrau de  $2^{\circ}\text{C}$  na temperatura, no tempo  $t = 0$  , na parede da esquerda não pode ser realizado experimentalmente. A temperatura correta somente foi alcançada 7 minutos após o início do processo. Pode-se portanto prever que a simulação fornecerá uma posição da frente de fusão mais avançada do que aquela observada experimentalmente, já que a maior taxa de transferência de calor ocorre justamente no início do processo, quando tem-se praticamente difusão pura.

Por este motivo a simulação realizada por Gobin e Benard, 1989, adota como condição inicial a situação medida no experimento após o tempo de 0,579 h . Contrariamente, a presente simulação desenvolve-se desde o início do processo.

Para uma comparação qualitativa entre o resultado experimental, o de Gobin e Benard e a presente simulação, são mostradas na figura 3.8 as posições da frente de fusão em dois instantes de tempo. Esta figura mostra uma boa concordância, quanto à forma da frente de fusão, entre a presente simulação e os dados experimentais, nos dois instantes de tempo. Provavelmente os desvios observados devem-se ao motivo descrito anteriormente. Some-se ainda a possibilidade de existirem discrepâncias entre as propriedades físicas do estanho das simulações e aquele efetivamente usado na experimentação, conforme comentado em Gobin e Benard, 1989.

Note-se ainda que na presente simulação não foi realizado um estudo de independência quanto à malha e ao incremento de tempo. Considerando que o número de Prandtl é

bastante pequeno, sendo em consequência disto a espessura da camada limite hidrodinâmica muito pequena, é possível que uma malha mais refinada altere levemente o resultado. Quanto ao incremento de tempo pode-se esperar pouca variação, uma vez que durante a maior parte da simulação este incremento foi de 1 segundo, já bastante pequeno portanto.

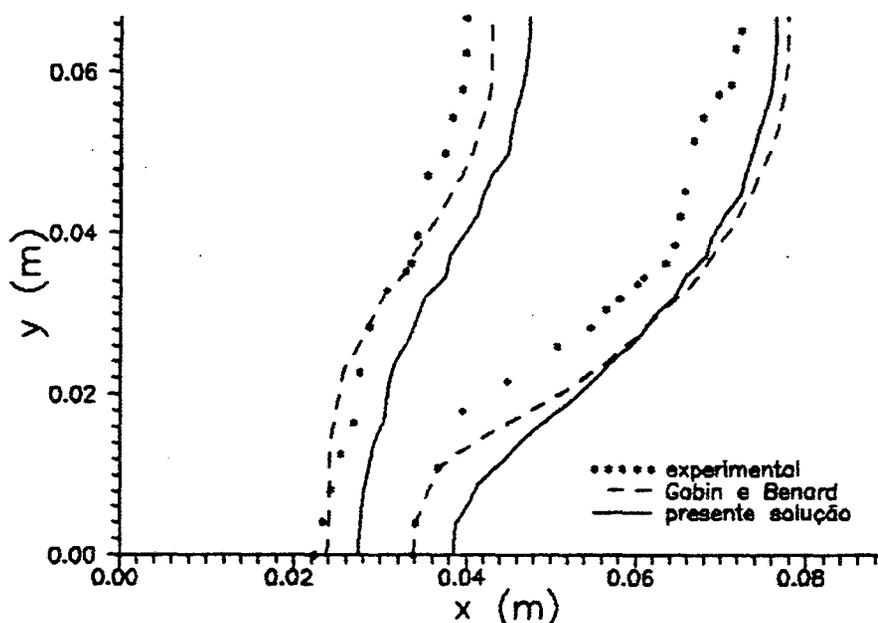


Fig. 3.8 Posição da frente de fusão nos tempos 1,012 h e 2,079 h

A figura 3.9 mostra as linhas de corrente no instante de tempo de 2,079 h, podendo-se observar nesta figura uma grande região de recirculação, bem como uma pequena zona, no canto superior esquerdo, onde o líquido se movimenta em sentido contrário ao do escoamento principal.

Nas simulações e no experimento em questão a cavidade de líquido está limitada na parte superior por uma parede, originando portanto uma condição de não escorregamento. Em certos experimentos entretanto é conveniente que a face superior fique livre. Uma situação com a condição de deslizamento foi então simulada, sendo mostrada uma comparação entre as duas situações

na figura 3.10 .

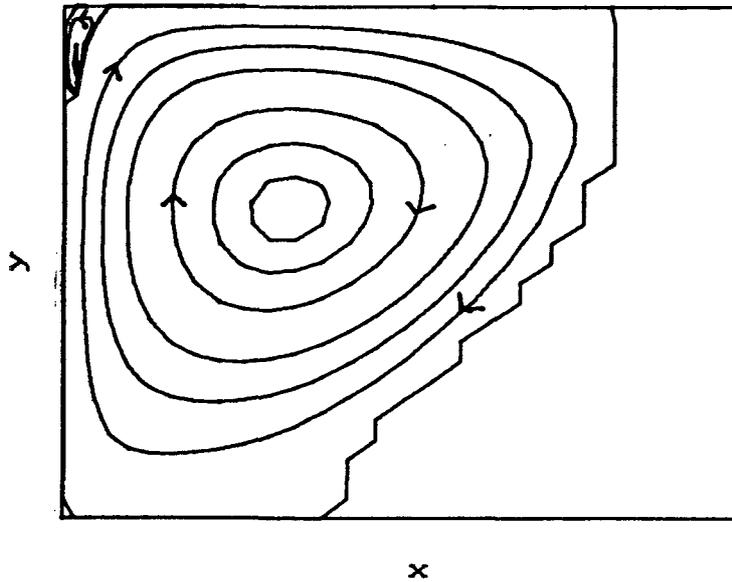


Fig. 3.9 Linhas de corrente no tempo de 2,079 h

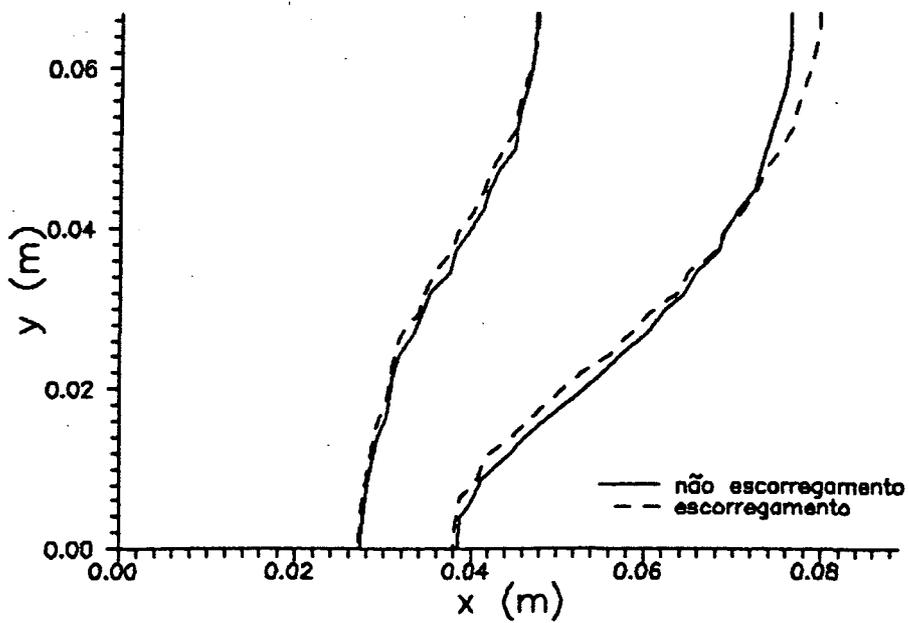


Fig. 3.10 Comparação entre os casos com e sem escorregamento na parede superior

No caso onde a superfície superior do líquido está livre, não havendo portanto a camada limite, o líquido incide na frente de fusão com maior quantidade de movimento, aumentando assim a troca de calor nesta região, e conseqüentemente a taxa de fusão. Este efeito é mais perceptível quando a cavidade de líquido é maior, acentuando os efeitos da convecção. Ao ceder mais calor para a parte superior da frente de fusão, os gradientes de temperatura ficam menores do centro para baixo, diminuindo em consequência a taxa de fusão neste trecho.

### 3.4 MUDANÇA DE FASE AO LONGO DE UMA FAIXA DE TEMPERATURAS

As substâncias puras e ligas eutélicas tratadas até aqui mudam de fase a uma temperatura constante. Contrariamente, a maioria das ligas metálicas apresentam a característica de mudarem de fase ao longo de uma faixa de temperaturas, correspondente à zona esponjosa.

Esta família de problemas pode ser abordada, por exemplo, pelo método da entalpia descrito anteriormente [Cao et al., 1989], através de formas adequadas para as expressões de  $\Gamma(h)$  e  $S(h)$ .

Considerando que os calores específicos do sólido e do líquido são constantes, que a mudança de fase ocorra com uma variação linear da temperatura, conforme mostrado na figura 3.11, e observando que agora  $h = 0$  corresponde à fase sólida com  $T = T_1$ , tem-se, para a fase sólida que

$$T = T_1 + \frac{h}{c_s} \quad (3.55)$$

Na zona esponjosa (  $0 < h < \lambda + c_s \Delta T$  )

$$T = T_1 + \Delta T \frac{h}{\lambda + c_s \Delta T} \quad (3.56)$$

e na fase líquida ( $h \geq \lambda + c_e \Delta T$ )

$$T = T_1 + \frac{h}{c_l} - \frac{\lambda + (c_e - c_l) \Delta T}{c_l} \quad (3.57)$$

onde  $\Delta T = (T_2 - T_1)$  e  $c_e$  é o calor específico da zona esponjosa.

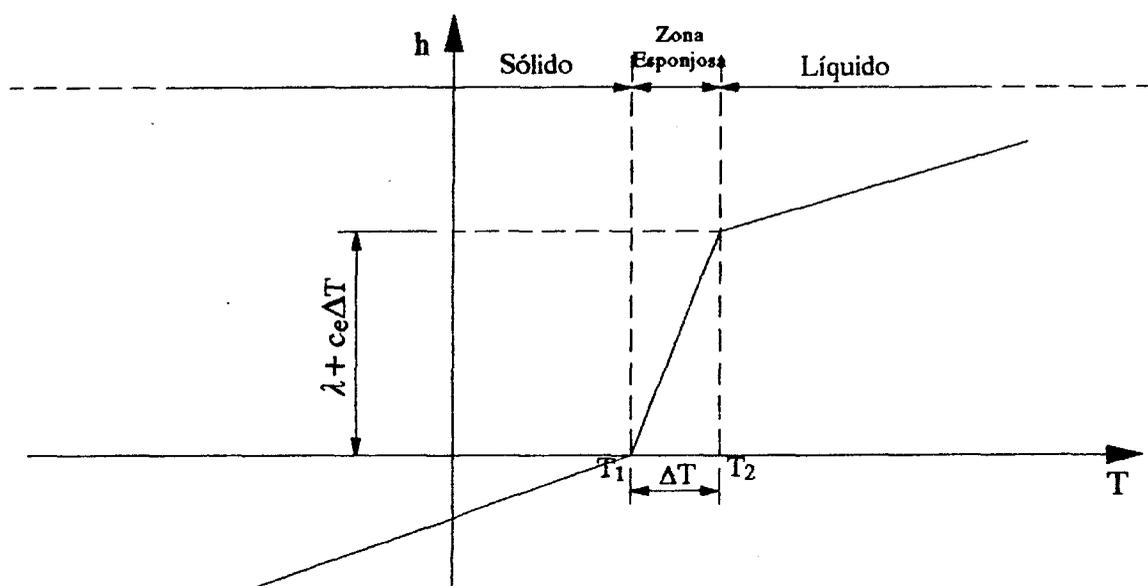


Fig. 3.11 Diagrama  $h \times T$  para uma liga não eutética

Introduzindo a "temperatura de Kirchhoff"

$$T_k = \int_{T_1}^T k(\eta) d\eta \quad (3.58)$$

onde  $k(\eta)$  é a condutividade térmica obtém-se, para o sólido, considerando  $k$  constante, que

$$T_k = k (T - T_1) \quad (3.59)$$

Da mesma forma, para a zona esponjosa

$$T_k = k_e (T - T_1) \quad (3.60)$$

onde  $k_s$  é a condutividade térmica desta zona, e para o líquido

$$T_k = k_l(T - T_1) \quad (3.61)$$

Procedendo da mesma forma que na seção 2.4.3, obtém-se que

$$\Gamma(h) = \frac{k_s}{c_s} \quad \text{e} \quad S(h) = 0 \quad \text{para a fase sólida} \quad (3.62)$$

$$\Gamma(h) = \frac{k_s \Delta T}{\lambda + c_s \Delta T} \quad \text{e} \quad S(h) = 0 \quad \text{para a zona esponjosa} \quad (3.63)$$

$$\Gamma(h) = \frac{k_l}{c_l} \quad \text{e} \quad S(h) = - \frac{k_l \left[ \lambda + (c_s - c_l) \Delta T \right]}{c_l} \quad \text{fase líquida} \quad (3.64)$$

Obtidas as expressões para  $\Gamma(h)$  e  $S(h)$ , os próximos passos desta formulação são idênticos aos já descritos na seção 2.4.3.

Embora tenha sido aqui abordada uma variação linear de  $h$  com  $T$ , na região esponjosa, este método é válido também para outras situações, passíveis de ocorrerem nas ligas não eutéticas.

Deve-se observar ainda que as propriedades físicas tais como  $k_s$  e  $c_s$  exigem a adoção de alguma hipótese, como por exemplo assumir que sejam funções de  $k_s, k_l$  e  $c_s, c_l$ , respectivamente.

## 4 ASPECTOS METALÚRGICOS DA SOLIDIFICAÇÃO

### 4.1 INTRODUÇÃO

O fenômeno da solidificação é de fundamental importância em vários processos de fabricação, envolvendo metais puros e ligas, sendo a fundição e a soldagem os mais frequentes dentre eles.

É no momento da solidificação que a maior eficiência no controle da qualidade do produto é alcançada [Pokorny, 1966], sendo assim, a simulação deste processo é de grande relevância científica e tecnológica.

Neste capítulo serão abordados os aspectos metalúrgicos da solidificação, a fim de fornecer subsídios para a compreensão do fenômeno físico que se quer simular. São também examinados os métodos encontrados na literatura metalúrgica para a simulação da solidificação, mais especificamente no caso da fundição, sob o ponto de vista da transferência de calor, massa e quantidade de movimento. Finalmente é comentado o grau de aproximação, neste tipo de simulação, encontrado na literatura especializada em ciências térmicas.

### 4.2 MICROESTRUTURA DA SOLIDIFICAÇÃO

Considere-se o caso mais frequente de fundição, que é aquela realizada em molde, conforme mostrado na figura 4.1 .

São normalmente observáveis três regiões distintas, quanto à macroestrutura.

Na interface metal-molde, devido ao maior gradiente térmico, especialmente no início do processo quando o molde está frio, são formados grãos pequenos, de orientação randômica. Esta região é denominada equiaxial externa.

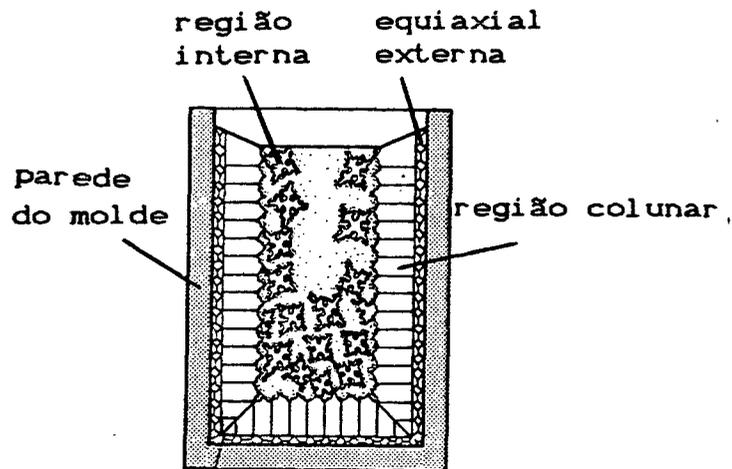


Fig. 4.1 Regiões comumente encontradas na fundição em molde

A partir da região equiaxial externa são formadas dendritas, que crescem em direção ao interior do molde, dando origem à região denominada colunar.

Ainda mais para o interior do molde, no volume que permanece em estado líquido, é observada muitas vezes a formação de outra zona equiaxial, denominada equiaxial interna. A transição da região colunar para a região equiaxial interna é fortemente dependente da intensidade da convecção que ocorre no líquido.

A morfologia da interface sólido-líquido apresenta-se bastante diferente, quando se trata de metais puros ou de ligas.

No caso de metais puros a interface sólido-líquido tem uma forma aproximadamente plana na região colunar, e cresce no sentido oposto ao fluxo de calor. A figura 4.2(a) mostra esta situação, onde também se pode observar o perfil de temperatura no líquido e no sólido. A figura 4.2(b) mostra uma região equiaxial externa, onde se pode observar o crescimento de um cristal, em forma dendrítica, no mesmo sentido do fluxo de calor.

A maior temperatura do cristal, possível de ser observada durante a solidificação, está associada às questões de estabilidade no momento da formação e crescimento das primeiras

porções de sólido. Assim, pode ocorrer o desprendimento de calor do cristal para o líquido circundante, que está a uma temperatura inferior à temperatura de fusão do metal.



(a) região colunar

(b) região equiaxial externa

Fig. 4.2 Morfologia da interface sólido-líquido e distribuição de temperatura em metais puros

No caso de ligas a região colunar possui uma fronteira puramente sólida em forma dendrítica, ocorrendo uma região esponjosa, onde coexistem sólido e líquido, conforme mostrado na figura 4.3(a). Nesta zona são determinadas todas as características da microestrutura da liga, tais como densidade, forma, tamanho, distribuição de concentração e porosidade. A figura 4.3(b) mostra uma região equiaxial externa em ligas.

A morfologia das regiões equiaxiais dos metais puros e das ligas é praticamente a mesma, podendo ocorrerem diferenças apenas na escala relativa das dendritas. Isto porque o seu crescimento nos metais puros é controlado pela troca de calor, enquanto que nas ligas este crescimento é controlado pela difusão de soluto.

As ligas podem ainda, em função de sua composição, solidificarem em forma eutética, na região equiaxial. Na figura 4.4, conforme Kurz e Fisher, 1986, são mostradas as diversas possibilidades, para uma liga Al-Cu; (a) substâncias puras (b) dendritas com zona esponjosa (c) dendritas com eutético interdendrítico (d) eutético.



(a) região colunar

(b) região equiaxial externa

Fig. 4.3 Morfologia da interface sólido-líquido e distribuição de temperatura em ligas

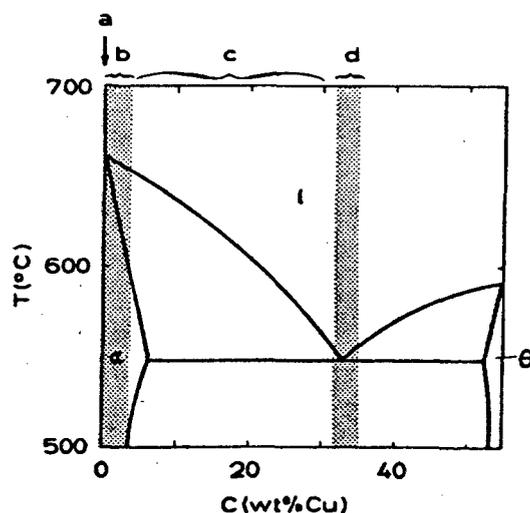


Fig. 4.4 Tipos principais de ligas, quanto à morfologia

As ligas eutéticas apresentam melhores características para fundição, tais como bom enchimento do molde, baixa contração, etc.. Pode-se citar, como exemplo, as ligas eutéticas Fe-C (ferro fundido) e Al-Si, que são de grande interesse prático.

A figura 4.5, conforme Kurz e Fisher, 1986, mostra o processo de crescimento na região equiaxial; (a) dendritas no caso de metais puros e ligas não eutéticas (b) eutético, com núcleos esféricos, no caso de ligas eutéticas.

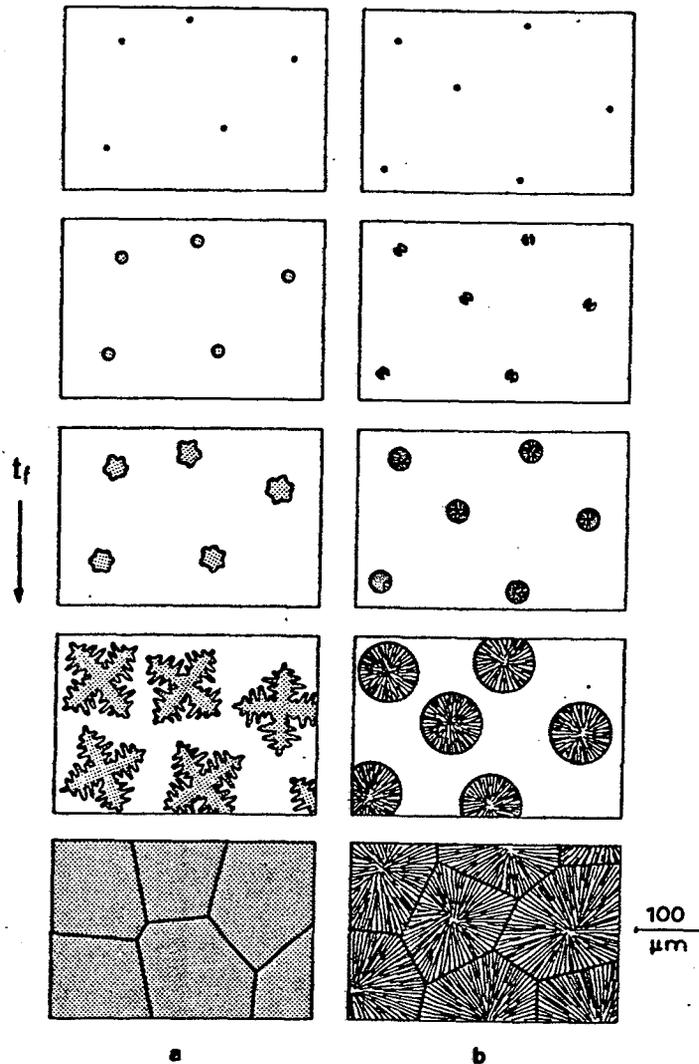


Fig. 4.5 Processo de solidificação equiaxial  
(a) dendrítica e (b) eutética

No caso de metais puros, uma vez concluído o processo de solidificação, a morfologia dendrítica desaparece, restando apenas os contornos de cada grão. Nas ligas, devido à microsegregação, a forma dendrítica ainda permanece após a solidificação.

É importante observar, entretanto, que nos processos de fundição muitas vezes as formas de crescimento dendrítica e eutética ocorrem simultaneamente.

### 4.3 FORMAÇÃO DOS NÚCLEOS

São denominados núcleos os pequenos volumes que começam a solidificar, a partir do líquido, no caso de uma região de solidificação equiaxial.

A formação de um núcleo exige um certo grau de subresfriamento, ou seja, a temperatura do líquido tem que ser inferior à temperatura de fusão.

A figura 4.6 mostra, ao longo do tempo, a curva de temperatura durante a nucleação numa região de solidificação equiaxial dendrítica de uma certa substância (a), a fração de sólido,  $f_s$ , (b) e número de grãos,  $N$ , (c).

Pode-se observar em (a) o subresfriamento inicial, um novo aumento na temperatura, e o seu decaimento definitivo. A curva (c) mostra o rápido surgimento de núcleos apenas no início do processo e o posterior crescimento destes núcleos, tornando-se os chamados grãos da microestrutura do metal.

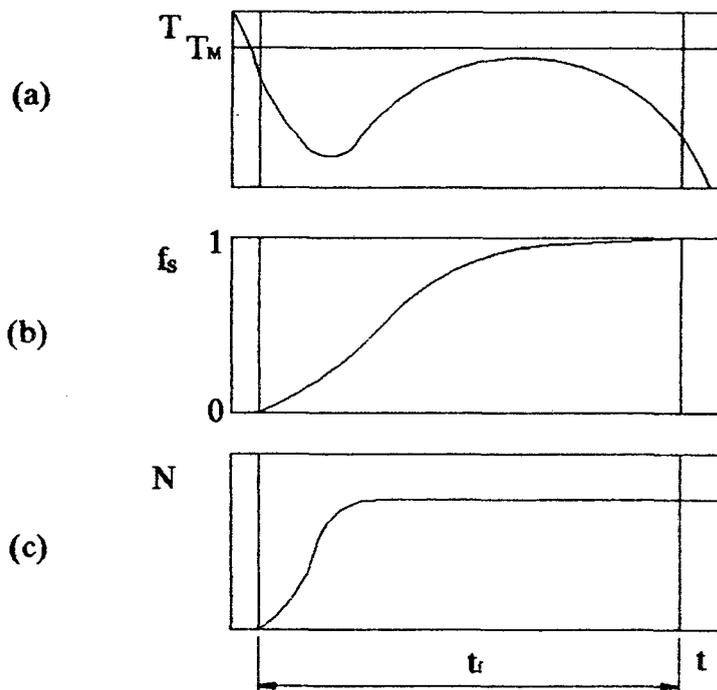


Fig. 4.6 Histórico da formação e crescimento de núcleos numa região de solidificação equiaxial dendrítica

#### 4.4 MODELAGEM UTILIZADA

Na literatura metalúrgica observa-se, para fins práticos envolvendo solidificação, a aplicação de modelos bastante simplificados. Dois livros clássicos de solidificação em metalurgia são os de Flemings, 1974, e Kurz e Fisher, 1986. Nestes livros são discutidos e apresentados modelos de solidificação contendo simplificações tais como: corpos semi-infinitos, interface sólido-líquido deslocando-se com velocidade constante, ausência de difusão de massa no sólido, etc.. Outro exemplo deste tipo de abordagem é o modelo de Schwarz, 1933, aqui descrito na seção 4.4.1.

Tentativas mais elaboradas de simulação, via numérica, são objeto de pesquisa na área de ciências térmicas. Entretanto, aparentemente tais modelos não têm sido absorvidos pelos metalurgistas, devendo-se realizar esforços no sentido de que isto venha a ocorrer.

Ainda não é possível a simulação completa do processo de solidificação em si, mesmo de substâncias puras, devido à sua elevada complexidade. A simulação do processo de solidificação em molde, típico da fundição, é uma tarefa ainda mais complexa, uma vez que possui a dificuldade adicional de considerar a resistência térmica variável peça-molde, ainda não equacionada de forma satisfatória [Sully; 1976, Jeyarajan e Pehlke; 1976, Ho e Pehlke; 1984, Zeng e Pehlke; 1985, Huang et al.; 1992].

Somente formulações mais recentes consideram as duas fases da zona esponjosa. Em 1987 Bennon e Incropera apresentaram um dos primeiros modelos levando em conta a transferência de calor, quantidade de movimento e espécies. Este modelo emprega a teoria clássica de mistura e é adequado para a simulação onde ocorrem estruturas do tipo dendrítica colunar. Prakash apresentou em 1990 um modelo que, contrariamente ao de Bennon e Incropera, equaciona as fases separadamente e pode ser aplicado inclusive à região equiaxial interna da solidificação de ligas metálicas. Entretanto, esta formulação não é capaz de prever o surgimento dos núcleos a partir do líquido. As simulações são

iniciadas já com uma certa fração de sólido.

Conforme se pode depreender do exposto anteriormente, embora estas aproximações do processo de solidificação sejam bastante complexas, ainda não levam em conta questões fundamentais de interesse metalúrgico. Entre elas se pode citar os fenômenos do tipo nucleação com subresfriamento e resistência térmica variável entre peça e molde.

#### 4.4.1 O MODELO DE SCHWARZ

Conforme já comentado este modelo contém hipóteses simplificativas tais como unidirecionalidade, corpos semi-infinitos, ausência de resistência térmica entre peça e molde e ausência de convecção natural. Entretanto ele é aqui descrito devido à sua importância histórica [Carslaw, Jaeger, 1959]. Utilizando a solução geral da equação da condução de calor em uma dimensão e em regime transiente,

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (4.1)$$

Schwarz, 1933, concebeu o modelo físico para solidificação mostrado na figura 4.7 [Müller, capítulo II].

No instante inicial todo o líquido está a  $T_v$ , temperatura em que o material a ser solidificado é vazado no molde, inicialmente a uma temperatura  $T_o$ . Decorrido algum tempo o sistema assume a configuração de temperaturas mostrada na figura 4.7. Observe-se que não existe nenhuma outra reação exotérmica no momento da solidificação, a não ser aquela que envolve o calor latente de fusão.

A solução da eq. (4.1) é dada por [apêndice]

$$T(x, t) = A + B \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{\alpha t}} \right) \quad (4.2)$$

Para o molde tem-se as seguintes condições de contorno, onde os subíndices  $m$ ,  $o$  e  $i$  referem-se, respectivamente, ao molde,

estado inicial e interface molde-sólido.

$$T_m = T_o, \text{ para } x \rightarrow -\infty \text{ e } \forall t$$

$$T_m = T_i, \text{ para } x = 0 \text{ e } \forall t$$

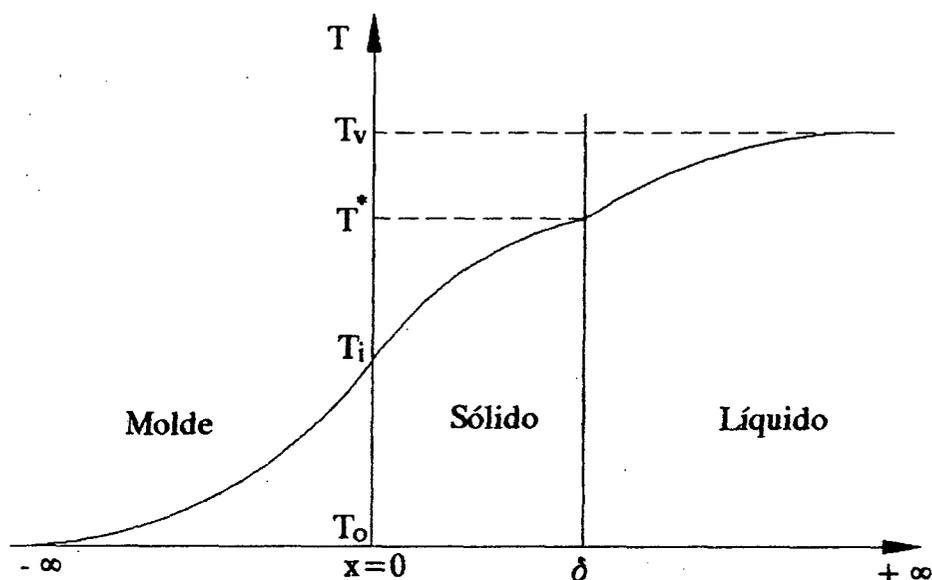


Fig. 4.7 Distribuição de temperaturas no modelo de Schwarz

Aplicando estas condições de contorno na eq. (4.2), obtém-se a distribuição de temperaturas ao longo do molde, dada por

$$T_m(x,t) = T_i + (T_i - T_o) \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{\alpha_m t}} \right) \quad (4.3)$$

Para o sólido tem-se as seguintes condições de contorno

$$T_s = T_i, \text{ para } x = 0 \text{ e } \forall t$$

$$T_s = T^*, \text{ para } x = \delta \text{ e } \forall t$$

Aplicando as condições de contorno, de forma semelhante ao já realizado nos problemas de Stefan e Neumann [apêndice], obtém-se

$$T_s(x,t) = T_i + \frac{T^* - T_i}{\operatorname{erf}(\Omega)} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_s t}}\right) \quad (4.4)$$

onde

$$\Omega = \frac{\delta}{2\sqrt{\alpha_s t}} = \text{constante} \quad (4.5)$$

neste contexto denominada de constante de solidificação.

Para o líquido tem-se as seguintes condições de contorno

$$\begin{aligned} T_l &= T^*, \text{ para } x = \delta \text{ e } \forall t \\ T_l &= T_v, \text{ para } x \rightarrow \infty \text{ e } \forall t \end{aligned}$$

Aplicando estas condições na eq. (4.2) obtém-se a distribuição de temperaturas ao longo do líquido,

$$T_l(x,t) = T^* + (T_v - T^*) \left[ \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha_l t}}\right) - \operatorname{erf}(\Gamma\Omega)}{1 - \operatorname{erf}(\Gamma\Omega)} \right] \quad (4.6)$$

onde

$$\Gamma = \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}} \quad (4.7)$$

As equações (4.3), (4.4) e (4.6) fornecem a distribuição de temperaturas ao longo do molde, sólido e líquido respectivamente. Entretanto não dispõe-se até aqui de equações para a determinação de  $T_i$  e  $\Omega$ .

Para a determinação de  $T_i$  é empregado o seguinte balanço de energia na interface molde-sólido

$$k_m \frac{\partial T_m}{\partial x} \Big|_{x=0} = k_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \Big|_{x=0} \quad (4.8)$$

Substituindo as derivadas obtidas a partir das eq. (4.3) e (4.4) na eq. (4.8) obtém-se

$$T_i = \frac{M T^* + T_o \operatorname{erf}(\Omega)}{M + \operatorname{erf}(\Omega)} \quad (4.9)$$

onde

$$M = \frac{k_s}{k_m} \sqrt{\frac{\alpha_m}{\alpha_s}} \quad (4.10)$$

chamada constante do molde.

Note-se que  $T_i$  é constante ao longo de todo o processo de solidificação.

De forma semelhante, para a determinação de  $\Omega$  é empregado um balanço de energia na interface sólido-líquido, que neste caso deve considerar o calor latente necessário para a mudança de fase,

$$k_s \left. \frac{\partial T_s}{\partial x} \right|_{x=\delta} = \lambda \rho_s \frac{d\delta}{dt} + k_l \left. \frac{\partial T_l}{\partial x} \right|_{x=\delta} \quad (4.11)$$

As derivadas  $\partial T_s / \partial x$  e  $\partial T_l / \partial x$  são obtidas das equações (4.4) e (4.6), respectivamente. A velocidade de solidificação  $d\delta/dt$  é obtida explicitando-se  $\delta$  na eq. (4.5) e derivando em relação ao tempo. Substituindo estas informações na eq. (4.11) obtém-se a expressão final de Schwarz para a determinação da constante de solidificação  $\Omega$

$$\frac{m \theta e^{-\Gamma^2 \Omega^2}}{1 - \operatorname{erf}(\Gamma \Omega)} - \frac{e^{-\Omega^2}}{M + \operatorname{erf}(\Omega)} + \frac{\sqrt{\pi} \Omega}{\operatorname{Ste}_s} = 0 \quad (4.12)$$

onde

$$m = \frac{k_l}{k_s} \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}} \quad (4.13)$$

$$\theta = \frac{T_v - T^*}{T^* - T_0} \quad (4.14)$$

$$\operatorname{Ste}_s = \frac{c_s (T^* - T_0)}{\lambda} \quad (4.15)$$

Em função dos valores que possam assumir os parâmetros  $M$ ,  $m$ ,  $\Gamma$  e  $\theta$  pode-se identificar as soluções clássicas de Stefan e Neumann, bem como outras soluções de interesse metalúrgico como casos particulares da solução de Schwarz [Müller, capítulo II], que são descritos a seguir.

Se  $(k\rho c)_m \gg (k\rho c)_s$ , então  $M \rightarrow 0$  e conforme a eq. (4.9)  $T_i \rightarrow T_0$ , recaindo no caso de temperatura prescrita na interface molde-sólido ou seja, no problema de Neumann.

A eq. (4.12) particularizada e a distribuição de temperaturas para este caso são as seguintes

$$\frac{m \theta e^{-\Gamma^2 \Omega^2}}{1 - \operatorname{erf}(\Gamma \Omega)} - \frac{e^{-\Omega^2}}{\operatorname{erf}(\Omega)} + \frac{\sqrt{\pi} \Omega}{Ste_s} = 0 \quad (4.16)$$

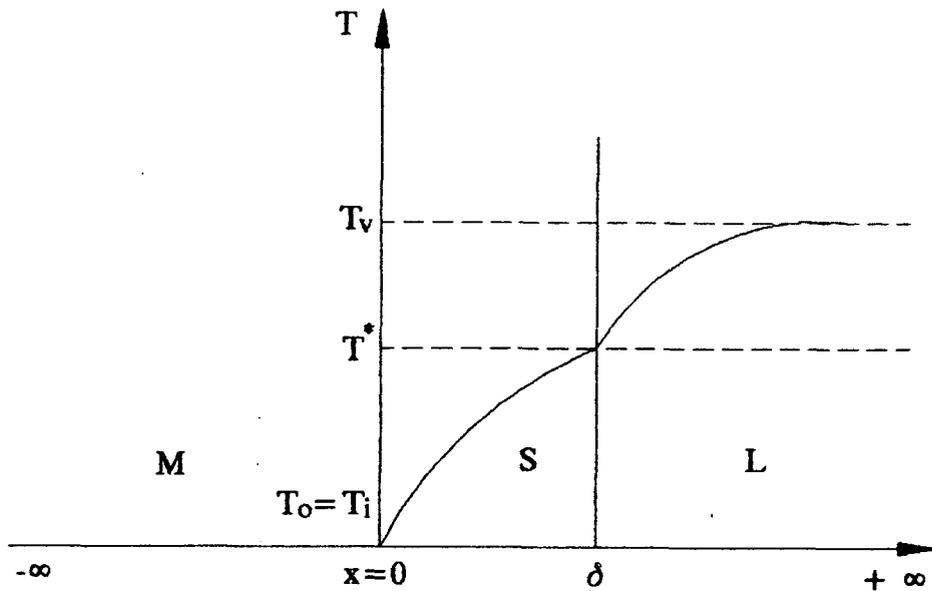


Fig. 4.8  $M \rightarrow 0$  ; solução de Neumann

Se  $M \rightarrow 0$  e além disto  $m = \Gamma = 1$  ( $k$  e  $\alpha$  do sólido e do líquido são iguais) tem-se a solução de Lightfoot, cuja eq. (4.12) particularizada e a distribuição de temperaturas são mostradas a seguir.

$$\left( \frac{\theta}{1 - \operatorname{erf}(\Omega)} - \frac{1}{\operatorname{erf}(\Omega)} \right) e^{-\Omega^2} + \frac{\sqrt{\pi} \Omega}{Ste_s} = 0 \quad (4.17)$$

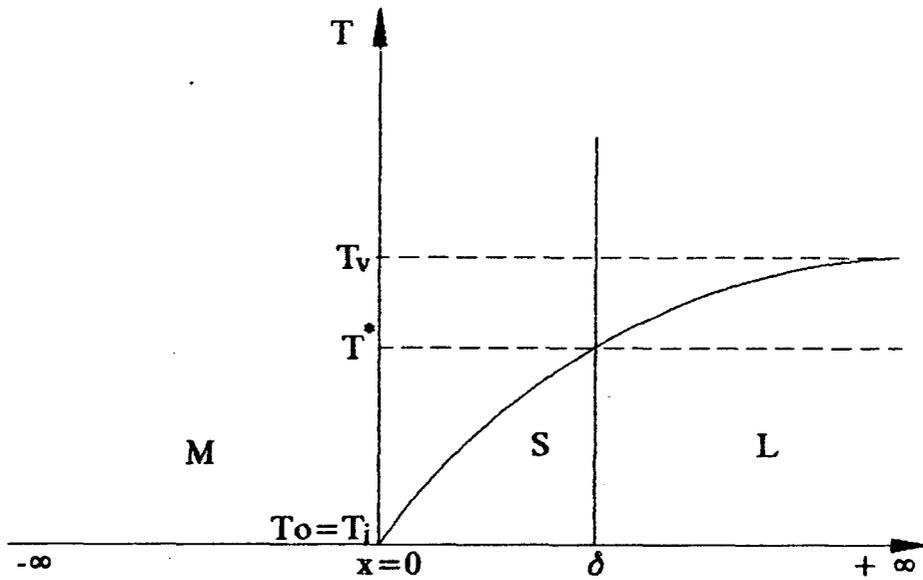


Fig. 4.9  $M \rightarrow 0$  e  $m = \Gamma = 1$  ; solução de Lightfoot

Se o material é vazado no molde já na sua temperatura de fusão ( $T_v = T^*$ ) então  $\theta = 0$ , constituindo-se na solução de Lyubov, mostrada a seguir.

$$\left[ M + \operatorname{erf}(\Omega) \right] \Omega e^{\Omega^2} - \frac{Ste_m}{\sqrt{\pi}} = 0 \quad (4.18)$$

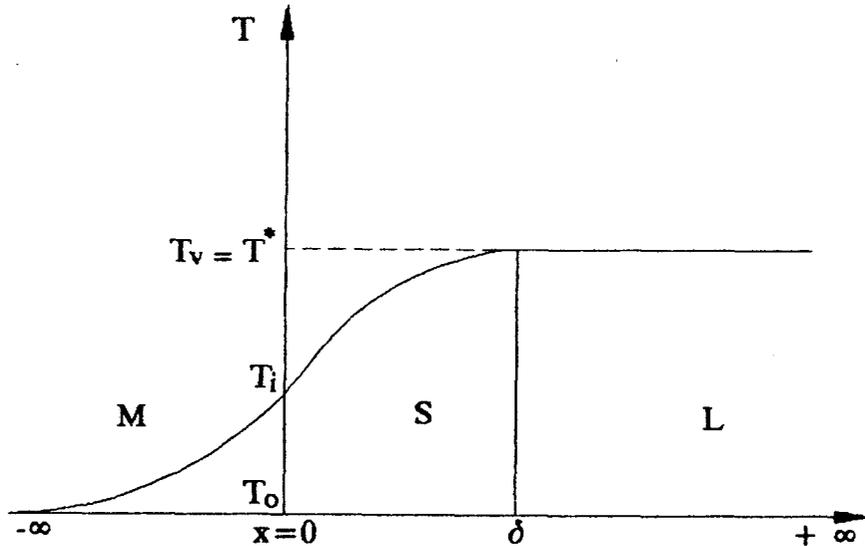


Fig. 4.10  $\theta = 0$  ; solução de Lyubov

Se  $(kpc)_m \ll (kpc)_s$  então  $M \gg 1$  e conforme a eq. (4.9)  $T_i \rightarrow T^*$ . Se além disto  $\theta = 0$  tem-se então a solução de Chvorinoff, mostrada a seguir.

$$M \Omega e^{\Omega^2} - \frac{Ste_s}{\sqrt{\pi}} = 0 \quad (4.19)$$

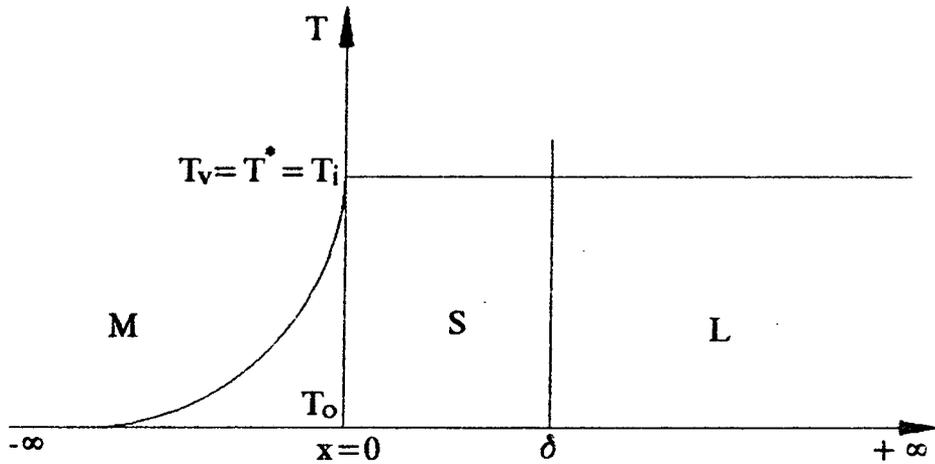


Fig. 4.11  $M \gg 1$  e  $\theta = 0$  ; solução de Chvorinoff

Se  $M \rightarrow 0$  e  $\theta = 0$  , tem-se o problema clássico de Stefan, cuja solução é mostrada a seguir

$$\Omega e^{\Omega^2} \operatorname{erf}(\Omega) - \frac{Ste_s}{\sqrt{\pi}} = 0 \quad (4.20)$$

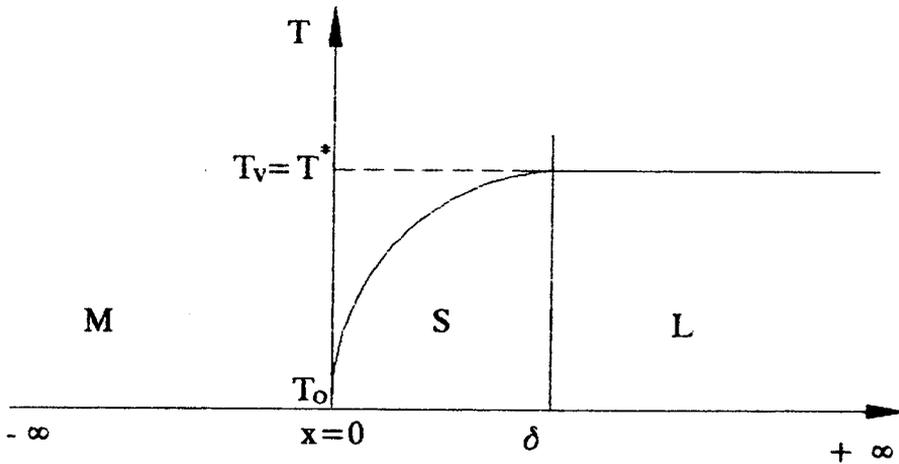


Fig. 4.12  $M \rightarrow 0$  e  $\theta = 0$  ; solução de Stefan

## 5 MUDANÇA DE FASE EM LIGAS BINÁRIAS

### 5.1 INTRODUÇÃO

O modelo de Cao et al., 1989, apresentado no capítulo 3, para a solução de problemas de mudança de fase não considera a transferência de espécies químicas. Desta forma este modelo não é adequado à solução do problema específico da solidificação em metalurgia, já que não é capaz de determinar a distribuição final dos componentes de uma certa liga, requisito altamente desejável sob o ponto de vista metalúrgico. Mesmo tratando-se apenas da inclusão da convecção natural no modelo, esta diz respeito apenas à convecção induzida por gradientes de temperatura, não incluindo portanto os gradientes de densidade decorrentes dos gradientes de concentração.

A determinação da distribuição final dos componentes de uma liga exige a inclusão de uma equação a mais no modelo. Trata-se da equação da conservação das espécies químicas.

Os modelos de simulação associados a problemas de mudança de fase em ligas binárias podem ser subdivididos em dois grupos. Tais grupos são explorados a seguir.

O primeiro deles divide o domínio em duas partes, uma referente ao sólido e outra referente ao líquido. As equações são resolvidas separadamente, sendo que o acoplamento entre os dois domínios é realizado através das condições de contorno da interface sólido-líquido. Esta técnica exige uma precisa localização da interface ao longo de todo o processo, tarefa nem sempre fácil, principalmente no caso de ligas, já que a zona esponjosa apresenta-se usualmente com uma complexa geometria. A necessidade de malhas computacionais móveis, ou da imobilização do domínio através da transformação de coordenadas exige, na maioria dos casos, hipóteses simplificativas em relação à geometria da interface.

O segundo grupo descreve o fenómeno levando em conta nas equações governantes as frações de sólido e de líquido que ocorrem em cada local do domínio. Desta forma todo o domínio pode ser tratado pelo mesmo conjunto de equações conservativas. Estas são as chamadas formulações contínuas, que apresentam a vantagem de permitirem o uso de uma malha computacional única em todo o domínio de solução. Também é dispensada a necessidade do rastreamento da frente de mudança de fase, embora seja possível localizá-la a qualquer momento.

As formulações contínuas podem ainda ser subdivididas, no caso de sistemas binários sólido-líquido, nos chamadas modelos de fase única e nos modelos de dupla fase. Os modelos de fase única [Bennon e Incropera; 1987, Prakash e Voller; 1989, Voller, Brent e Prakash; 1989] empregam a teoria clássica de mistura, somando as equações para cada fase e trabalhando com as variáveis dependentes da mistura. Os modelos de dupla fase resolvem separadamente as equações para o sólido e para o líquido, acoplando as duas fases através de termos que representam as trocas que ocorrem na interface sólido-líquido. Um exemplo deste tipo de abordagem é o modelo de Prakash, 1990, que, contrariamente aos modelos de fase única, realiza um balanço em separado para a interface. Este modelo é capaz de simular uma solidificação do tipo equiaxial, embora não possa prever a formação dos núcleos a partir de uma situação de puro líquido.

Uma vez que uma boa parte dos trabalhos encontrados na literatura adota o modelo contínuo de fase única, tal formulação é descrita em maiores detalhes na seção que se segue.

## 5.2 MODELO CONTINUO

Nesta seção é descrito um modelo contínuo de fase única que emprega a teoria clássica de mistura resolvendo as equações de conservação da quantidade de movimento, calor e espécies químicas em sistemas binários sólido-líquido que solidificam em forma dendrítica colunar [Bennon e Incropera, 1987].

A primeira confrontação deste modelo com resultados experimentais da solidificação de uma solução de cloreto de amônia-água, em cavidade retangular resfriada pela lateral, mostrou concordância apenas qualitativa [Christenson e Incropera, 1989, e Christenson et al., 1989]. Em 1990 Neilson e Incropera simularam a solidificação unidirecional de uma solução de cloreto de amônia-água, resfriada pela base. Nesta situação o modelo foi capaz de prever segregações do tipo canal vertical.

Espera-se que certas soluções aquosas como cloreto de amônia-água, cloreto de sódio-água e outras se comportem como ligas metálicas ao solidificarem dendriticamente, reproduzindo em níveis de temperatura bem mais baixos os fenômenos de micro e macrosegregação de interesse metalúrgico. Por este motivo estas soluções são empregadas em experimentações, a fim de gerar resultados que proporcionem a validação dos modelos matemáticos criados para a simulação do fenômeno da solidificação.

Quanto à teoria clássica de mistura, o modelo em questão assume os seguintes princípios :

1. Os componentes da mistura podem ser vistos como subsistemas isolados, desde que suas interações com os outros componentes sejam adequadamente tratados.
2. Todas as propriedades da mistura podem ser obtidas através das propriedades dos componentes.
3. O comportamento médio da mistura é governado por equações similares as dos seus componentes, individualmente.

Quanto ao desenvolvimento das equações de conservação de quantidade de movimento, calor e espécies, são assumidas as seguintes hipóteses :

1. A mistura em questão está saturada, ou seja, os seus

componentes ocupam todo o espaço disponível.

2. Na fase líquida tem-se escoamento laminar, de um fluido newtoniano, com viscosidade constante.
3. A densidade é constante em cada fase, exceto para as variações que originam as forças de empuxo na fase líquida.
4. É utilizada a aproximação de Boussinesq.
5. Existe equilíbrio termodinâmico entre fases.
6. A difusividade de espécies é nula na fase sólida.
7. A fase sólida não se deforma, e não possui tensões internas.
8. A região esponjosa é vista como um meio poroso.

Um sistema de  $\alpha$  constituintes e  $K$  fases é visto como um contínuo, onde qualquer localização  $r$  pode ser simultaneamente ocupada por qualquer constituinte, em qualquer fase. A velocidade média dos constituintes que compõem a fase  $K$ , relativamente a um sistema de referência fixo, é representado por  $\mathbf{V}_K$  e é chamado velocidade de fase. A velocidade absoluta de cada constituinte  $\alpha$ , na fase  $K$ , relativamente ao mesmo sistema de referência é denominada  $\mathbf{V}_K^\alpha$ . A velocidade de difusão do constituinte  $\alpha$  na fase  $K$  é então  $\mathbf{V}_K^\alpha - \mathbf{V}_K$ , conforme mostrado na figura 5.1.

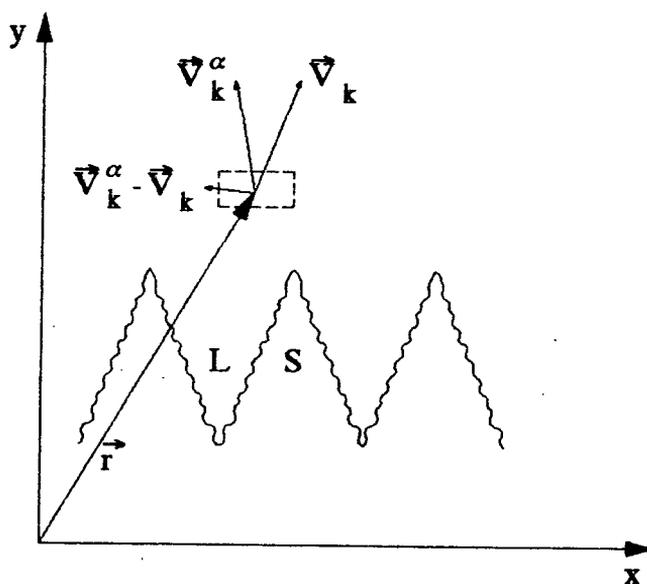


Fig. 5.1 Velocidade de difusão do constituinte  $\alpha$  na fase  $K$

Sejam  $\rho_K^\alpha$  e  $g_K^\alpha$  a densidade e a fração em volume do constituinte  $\alpha$  na fase K, respectivamente. A densidade parcial do constituinte  $\alpha$  na fase K pode ser expressa como

$$\bar{\rho}_K^\alpha = g_K^\alpha \rho_K^\alpha \quad (5.1)$$

Da mesma forma  $\rho_K$  e  $g_K$  são definidos como a densidade e a fração em volume da fase K, respectivamente. A densidade parcial da fase K em um certo volume de mistura é então

$$\bar{\rho}_K = g_K \rho_K \quad (5.2)$$

e em consequência disto

$$\sum_K \bar{\rho}_K = \rho \quad (5.3)$$

onde  $\rho$  é a densidade da mistura.

A fração em massa ou concentração do constituinte  $\alpha$  na fase K é

$$f_K^\alpha = \frac{\bar{\rho}_K^\alpha}{\bar{\rho}_K} \quad (5.4)$$

e a fração em massa da fase K na mistura é

$$f_K = \frac{\bar{\rho}_K}{\sum_K \bar{\rho}_K} \quad (5.5)$$

ou, empregando a eq. (5.3)

$$f_K = \frac{\bar{\rho}_K}{\rho} \quad (5.6)$$

Observe-se que a hipótese de que a mistura é saturada implica em que

$$\sum_K g_K = 1 \quad (5.7)$$

Para coerência do modelo contínuo descrito até aqui,

define-se

$$k = \sum_K g_K k_K \quad (5.8)$$

$$V = \sum_K f_K V_K \quad (5.9)$$

$$h = \sum_K f_K h_K \quad (5.10)$$

$$f^\alpha = \sum_K f_K f_K^\alpha \quad (5.11)$$

onde  $k$  é a condutividade térmica da mistura e  $h$  a sua entalpia.

A equação de conservação para uma variável genérica escalar  $\phi$ , associada à fase  $K$  da mistura, para um volume de controle fixo e arbitrário  $\bar{V}$ , com área superficial  $A$  pode ser escrita da seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\bar{V}} \rho_K \phi_K d\bar{V}_K + \int_A \rho_K V_K \phi_K \cdot n dA_K = \int_A -J_K \cdot n dA_K + \int_{\bar{V}} S_K d\bar{V}_K \quad (5.12)$$

onde  $n$  é o vetor unitário normal à superfície,  $J_K$  o vetor fluxo difusivo através da superfície e  $S_K$  é o termo fonte de  $\phi_K$  por unidade de volume.

Assumindo que  $dA_K$  seja igual a  $g_K dA$ , e realizando as integrações da eq. (5.12), obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}_K \phi_K) + \nabla \cdot (\bar{\rho}_K V_K \phi_K) = -\nabla \cdot (g_K J_K) + g_K S_K \quad (5.13)$$

#### CONSERVAÇÃO DA MASSA

A fim de obter uma equação de conservação da massa para a fase  $K$  faz-se na eq. (5.13)  $\phi_K = 1$ ,  $J_K = 0$ , e  $S_K = \dot{M}_K$ , resultando

$$\frac{\partial \bar{\rho}_K}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}_K V_K) = g_K \dot{M}_K \quad (5.14)$$

Uma equação para todo domínio, equação do contínuo, é obtida somando-se a equação acima para cada fase

$$\frac{\partial}{\partial t} (\sum_K \bar{\rho}_K) + \nabla \cdot (\sum_K \bar{\rho}_K \mathbf{V}_K) = \sum_K g_K \dot{M}_K \quad (5.15)$$

Qualquer quantidade de massa que surja ou desapareça de uma fase necessariamente desaparece ou surge em outra, assim

$$\sum_K g_K \dot{M}_K = 0 \quad (5.16)$$

Substituindo ainda a eq. (5.3) no primeiro termo da eq. (5.15), e a eq. (5.6) no segundo termo, obtém-se

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \sum_K f_K \mathbf{V}_K) = 0 \quad (5.17)$$

Empregando agora a eq. (5.9) no segundo termo obtém-se a equação de conservação da massa para a mistura

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (5.18)$$

#### CONSERVAÇÃO DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO

Por conveniência o desenvolvimento desta equação é realizado no sistema cartesiano de coordenadas. Para obter uma equação de conservação da quantidade de movimento para a fase K, na direção x, faz-se na eq. (5.13)  $\phi_K = u_K$ ,  $J_K = -s_{Kx}$  e  $S_K = \rho_K B_{Kx} + \dot{G}_{Kx}$ , resultando

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}_K u_K) + \nabla \cdot (\bar{\rho}_K \mathbf{V}_K u_K) = \nabla \cdot (g_K s_{Kx}) + \bar{\rho}_K B_{Kx} + g_K \dot{G}_{Kx} \quad (5.19)$$

O vetor fluxo  $s_{Kx}$  representa a componente do tensor tensão da fase K na direção x, enquanto que  $B_{Kx}$  representa a

componente da força de campo da fase K na direção x . A produção de quantidade de movimento na fase K devida às interações entre as fases, tais como arrasto e sustentação, na direção x é representada por  $\dot{G}_{Kx}$  .

Da mesma forma adotada anteriormente para a conservação da massa, a equação para o contínuo é obtida somando-se a eq. (5.19) para cada fase

$$\frac{\partial}{\partial t} (\sum_K \bar{\rho}_K u_K) + \nabla \cdot (\sum_K \bar{\rho}_K V_K u_K) = \nabla \cdot (\sum_K g_K s_{Kx}) + \sum_K \bar{\rho}_K B_{Kx} + \sum_K g_K \dot{G}_{Kx} \quad (5.20)$$

Decompondo a componente do tensor tensão na parte devida à pressão e na parte devida à tensão de cisalhamento,

$$s_{Kx} = -p_K i + t_{Kx} \quad (5.21)$$

Assumindo que  $F_x$  seja a componente líquida na direção x da força devida à interação entre as fases,

$$F_x = \sum_K g_K \dot{G}_{Kx} \quad (5.22)$$

Visando colocar a equação numa forma adequada para a sua solução, o fluxo convectivo de quantidade de movimento é decomposto na contribuição devida ao movimento médio da mistura e na contribuição devida ao movimento de cada fase em relação à média da mistura,

$$\sum_K \bar{\rho}_K V_K u_K = \rho V u + \sum_K \bar{\rho}_K (V_K - V)(u_K - u) \quad (5.23)$$

onde, em consonância com a eq. (5.9) ,

$$u = \frac{1}{\rho} \sum_K \bar{\rho}_K u_K = \sum_K f_K u_K \quad (5.24)$$

Aplicando o mesmo princípio para a componente em x da força de corpo, define-se

$$B_x = \frac{1}{\rho} \sum_K \bar{\rho}_K B_{Kx} = \sum_K f_K B_{Kx} \quad (5.25)$$

O primeiro termo da eq. (5.20) pode ser reescrito empregando a eq. (5.24), da seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial t} (\sum_K \bar{\rho}_K u_K) = \frac{\partial}{\partial t} (\rho \frac{1}{\rho} \sum_K \bar{\rho}_K u_K) = \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) \quad (5.26)$$

O segundo termo do lado direito da eq. (5.20) pode ser reescrito empregando a eq. (5.25), da seguinte forma

$$\sum_K \bar{\rho}_K B_{Kx} = \frac{1}{\rho} \rho \sum_K \bar{\rho}_K B_{Kx} = \rho B_x \quad (5.27)$$

A eq. (5.20) pode então ser reescrita substituindo-se as respectivas relações,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \nabla \cdot (\rho V u) = \nabla \cdot (\sum_K g_K t_{Kx}) - \nabla \cdot \left( \sum_K \bar{\rho}_K (V_K - V)(u_K - u) \right) + \\ - \frac{\partial}{\partial x} (\sum_K g_K p_K) + \rho B_x + F_x \end{aligned} \quad (5.28)$$

A especificação do vetor tensão associado à fase K na direção x,  $t_{Kx}$ , requer a condição de que esta fase tenha continuidade. Isto significa que pode-se unir quaisquer dois pontos pertencentes a esta fase, através de uma linha contínua, sem sair dela. Assim, na zona esponjosa que ocorre na solidificação de uma mistura binária, tanto a matriz sólida como o líquido são considerados meios contínuos. Por outro lado, no caso de uma mistura de líquido contendo material sólido em suspensão, a fase sólida não é contínua. A relação constitutiva empregada para a avaliação de  $t_{Kx}$  além de pressupor esta continuidade também assume que cada fase é composta por um fluido newtoniano, sendo a fase sólida dotada de uma alta viscosidade.

A variação espacial muitas vezes existente na fração em volume da fase K,  $g_K$ , gera a necessidade de uma média a ser adotada nas equações constitutivas. Desta forma a equação constitutiva para o vetor tensão a ser adotada é

$$t_{Kx} = \mu_K \frac{\nabla(g_K u_K)}{g_K} - \frac{2}{3} \mu_K \frac{\nabla \cdot (g_K V_K) 1}{g_K} + \frac{t_{Kx}^{\circ}}{g_K} \quad (5.29)$$

ou

$$g_K t_{Kx} = \mu_K \nabla(g_K u_K) - \frac{2}{3} \mu_K \nabla \cdot (g_K V_K) 1 + t_{Kx}^{\circ} \quad (5.30)$$

onde  $\mu_K$  é a viscosidade da fase K e  $t_{Kx}^{\circ}$  é a tensão viscosa não incluída no termo  $\mu_K \nabla(g_K u_K)$ , expressa em coordenadas cartesianas da seguinte forma

$$t_{Kx}^{\circ} = \mu_K \frac{\partial}{\partial x} (g_K V_K) \quad (5.31)$$

Substituindo  $t_{Kx}^{\circ}$  da eq. (5.31) na eq. (5.30),

$$g_K t_{Kx} = \mu_K \nabla(g_K u_K) + \mu_K \frac{\partial}{\partial x} (g_K V_K) - \frac{2}{3} \mu_K \nabla \cdot (g_K V_K) 1 \quad (5.32)$$

Desenvolvendo o primeiro termo do lado direito da eq. (5.28),

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\sum_K g_K t_{Kx}) &= \nabla \cdot \left( \sum_K \mu_K \nabla(g_K u_K) \right) + \\ &+ \nabla \cdot \left( \sum_K \left[ \mu_K \frac{\partial}{\partial x} (g_K V_K) - \frac{2}{3} \mu_K \nabla \cdot (g_K V_K) 1 \right] \right) \end{aligned} \quad (5.33)$$

e considerando  $\mu_K$  constante,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left( \sum_K \left[ \mu_K \frac{\partial}{\partial x} (g_K V_K) - \frac{2}{3} \mu_K \nabla \cdot (g_K V_K) 1 \right] \right) &= \\ &= \sum_K \left[ \nabla \cdot \left( \frac{\partial}{\partial x} \mu_K (g_K V_K) \right) - \nabla \cdot \left( \frac{2}{3} \mu_K \nabla \cdot (g_K V_K) 1 \right) \right] \\ &= \sum_K \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_K \nabla \cdot (g_K V_K) \right) - \frac{2}{3} \mu_K \nabla \cdot \left( \frac{\partial}{\partial x} (g_K V_K) \right) \right] \\ &= \sum_K \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu_K \nabla \cdot (g_K V_K) - \frac{2}{3} \mu_K \nabla \cdot (g_K V_K) \right] \\ &= \sum_K \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{3} \mu_K \nabla \cdot (g_K V_K) \right] \end{aligned} \quad (5.34)$$

Substituindo a eq. (5.34) na eq. (5.33)

$$\nabla \cdot (\sum_K g_K t_{Kx}) = \nabla \cdot \left( \sum_K \mu_K \nabla(g_K u_K) \right) + \sum_K \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{3} \mu_K \nabla \cdot (g_K V_K) \right] \quad (5.35)$$

Substituindo a eq. (5.35) na eq. (5.28) e reorganizando,

$$\frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V u) = \nabla \cdot \left( \sum_k \mu_k \nabla (g_k u_k) \right) - \nabla \cdot \left( \sum_k \bar{\rho}_k (V_k - V) (u_k - u) \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \sum_k \left[ \frac{1}{3} \mu_k \nabla \cdot (g_k V_k) - g_k p_k \right] \right) + \rho B_x + F_x \quad (5.36)$$

ou fazendo

$$p = \sum_k \left( g_k p_k - \frac{1}{3} \mu_k \nabla \cdot (g_k V_k) \right) \quad (5.37)$$

a eq. (5.28) fica

$$\frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V u) = \nabla \cdot \left( \sum_k \mu_k \nabla (g_k u_k) \right) - \nabla \cdot \left( \sum_k \bar{\rho}_k (V_k - V) (u_k - u) \right) + \frac{\partial p}{\partial x} + \rho B_x + F_x \quad (5.38)$$

Para a determinação da componente líquida na direção  $x$  da força devida à interação entre fases,  $F_x$ , a zona esponjosa é considerada um meio poroso. Assim, da Lei de Darcy

$$F_x = \frac{\mu_l}{K_x} (g_l u_r) \quad (5.39)$$

onde o subíndice  $l$  refere-se ao líquido,  $K_x$  é a componente da permeabilidade anisotrópica deste meio na direção  $x$ , e  $u_r$  é a componente na direção  $x$  da velocidade relativa entre as fases líquida e sólida, ou seja

$$u_r = u_l - u_s \quad (5.40)$$

onde o subíndice  $s$  refere-se ao sólido.

A hipótese de que a fase sólida não possui tensões internas e portanto não se deforma, é assim representada matematicamente

$$\nabla (g_s u_s) = 0 \quad (5.41)$$

Para os próximos passos no desenvolvimento da eq. (5.38) assume-se ainda que as tensões viscosas resultantes dos gradientes locais de densidade são desprezíveis, ou seja

$$\nabla \left( \frac{\rho}{\rho_l} \right) = 0 \quad (5.42)$$

Também são empregadas as seguintes identidades

$$g_l = \left( \frac{\rho}{\rho_l} \right) f_l \quad (5.43)$$

e

$$f_l u_r = u - u_s \quad (5.44)$$

O primeiro termo do lado direito da eq. (5.38) pode então ser desenvolvido da seguinte forma

$$\nabla \cdot \left( \sum_K \mu_K \nabla(g_K u_K) \right) = \nabla \cdot \left( \mu_l \nabla(g_l u_l) + \mu_s \nabla(g_s u_s) \right) \quad (5.45)$$

Empregando a eq. (5.41) a eq. (5.45) se torna

$$\nabla \cdot \left( \sum_K \mu_K \nabla(g_K u_K) \right) = \nabla \cdot \left( \mu_l (g_l \nabla u_l + u_l \nabla g_l) \right) \quad (5.46)$$

Empregando a eq. (5.43) a eq. (5.46) resulta em

$$\nabla \cdot \left( \sum_K \mu_K \nabla(g_K u_K) \right) = \nabla \cdot \left( \mu_l \left[ \left( \frac{\rho}{\rho_l} \right) f_l \nabla u_l + u_l \nabla \left[ \left( \frac{\rho}{\rho_l} \right) f_l \right] \right] \right) \quad (5.47)$$

Utilizando agora a eq. (5.42) tem-se

$$\nabla \cdot \left( \sum_K \mu_K \nabla(g_K u_K) \right) = \nabla \cdot \left( \mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \left[ f_l \nabla u_l + u_l \nabla f_l \right] \right) \quad (5.48)$$

$$\nabla \cdot \left( \sum_K \mu_K \nabla(g_K u_K) \right) = \nabla \cdot \left( \mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla(f_l u_l) \right) \quad (5.49)$$

Fazendo uso novamente da eq. (5.41) resulta em

$$\nabla \cdot \left( \sum_K \mu_K \nabla(g_K u_K) \right) = \nabla \cdot \left( \mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla u \right) \quad (5.50)$$

A Lei de Darcy, eq. (5.39), pode ser modificada empregando-se a eq. (5.43) e posteriormente a eq. (5.44)

$$F_x = \frac{\mu_l \rho}{K_x \rho_l} f_l u_r \quad (5.51)$$

$$F_x = \frac{\mu_l \rho}{K_x \rho_l} (u - u_s) \quad (5.52)$$

O segundo termo do lado direito da eq. (5.38) representa as forças de inércia referentes às velocidades relativas entre fases, ocorrendo somente na zona esponjosa. Entretanto a permeabilidade desta região é normalmente muito baixa, fazendo com que o termo referente à Lei de Darcy, eq. (5.52), seja muito maior do que este, constituindo-se em motivo suficiente para desprezá-lo.

Substituindo então as eqs. (5.50) e (5.52) na eq. (5.38) obtém-se

$$\frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V u) = \nabla \cdot \left( \mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla u \right) - \frac{\mu_l \rho}{K_x \rho_l} (u - u_s) - \frac{\partial p}{\partial x} + \rho B_x \quad (5.53)$$

Observe-se que na região líquida  $K_x$  tende ao infinito e  $\rho = \rho_l$ , reduzindo esta equação à forma clássica da equação de Navier-Stokes para fluidos newtonianos. Na região sólida  $K_x$  tende a zero, devendo-se então prescrever velocidade nula em todo o sólido. No caso por exemplo da solidificação em lingotamento contínuo, prescreve-se a velocidade de deslocamento do lingote em toda a região sólida.

Prescott et al., 1991, revisaram o desenvolvimento desta equação empregando mais argumentação matemática e menos argumentação física, chegando a um resultado semelhante. É também mostrado neste artigo que a equação de conservação da quantidade de movimento para o contínuo obtida por Beckermann e Viskanta, 1988, através de médias realizadas nos volumes de controle é equivalente à eq. (5.53), obtida através da teoria de mistura.

## CONSERVAÇÃO DA ENERGIA

A equação que descreve a conservação da energia para a fase K é obtida fazendo-se na eq. (5.13)  $\phi_K = h_K$ ,  $J = -k_K \nabla T$  e  $S_K = \dot{E}_K$ , resultando

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}_K h_K) + \nabla \cdot (\bar{\rho}_K \mathbf{V}_K h_K) = \nabla \cdot (g_K k_K \nabla T) + g_K \dot{E}_K \quad (5.54)$$

onde é assumida a condição de equilíbrio termodinâmico local, ou seja,  $T_K = T$ . O termo fonte  $\dot{E}_K$  representa a produção de energia associada à fase K.

Da mesma forma já realizada nas equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, a obtenção da equação de conservação da energia para o contínuo é feita somando-se a eq. (5.54) para cada fase. Observando que  $\sum_K g_K \dot{E}_K = 0$ , obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_K \bar{\rho}_K h_K \right) + \nabla \cdot \left( \sum_K \bar{\rho}_K \mathbf{V}_K h_K \right) = \nabla \cdot \left( \sum_K g_K k_K \nabla T \right) \quad (5.55)$$

Conforme já realizado na equação da conservação da quantidade de movimento linear, o termo convectivo pode ser decomposto na contribuição devida ao movimento médio da mistura e na contribuição devida ao movimento das fases K em relação à média da mistura, como segue

$$\sum_K \bar{\rho}_K \mathbf{V}_K h_K = \rho \mathbf{V} h + \sum_K \bar{\rho}_K (\mathbf{V}_K - \mathbf{V})(h_K - h) \quad (5.56)$$

onde a entalpia da mistura é dada por

$$h = \frac{1}{\rho} \sum_K \bar{\rho}_K h_K = \sum_K f_K h_K \quad (5.57)$$

O somatório do termo temporal é desenvolvido da seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\sum_K \bar{\rho}_K h_K) &= \frac{\partial}{\partial t} \left( \rho \sum_K \frac{\bar{\rho}_K}{\rho} h_K \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \left( \rho \sum_K f_K h_K \right) \\ \frac{\partial}{\partial t} (\sum_K \bar{\rho}_K h_K) &= \frac{\partial}{\partial t} (\rho h) \end{aligned} \quad (5.58)$$

Lembrando ainda que a condutividade térmica da mistura é dada pela eq. (5.8), a eq. (5.55) pode ser reescrita na seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot (\rho V h) = \nabla \cdot (k \nabla T) - \nabla \cdot \left( \sum_K \bar{\rho}_K (V_K - V) (h_K - h) \right) \quad (5.59)$$

Nesta equação a entalpia da fase K é definida como

$$h_K = \int_0^T c_K dT + h_K^0 \quad (5.60)$$

onde  $c_K$  é o calor específico efetivo da fase K, assim definido

$$c_K = \frac{\nabla h}{\nabla T} + \frac{\nabla (h_K - h)}{\nabla T} \quad (5.61)$$

e  $h_K^0$  é a entalpia da fase K no estado inicial.

Para um sistema bifásico sólido-líquido a entalpia do sólido, conforme pode ser visualizado na figura 5.2, é avaliada através da eq. (5.60) como segue

$$h_s = c_s (T - T_0) + h_s^0 \quad (5.62)$$

assumindo que  $T_0 = 0$  e  $h_s^0 = h_s|_{T_0} = 0$ , a eq. (5.62) reduz-se a

$$h_s = c_s T \quad (5.63)$$

A entalpia do líquido pode ser escrita como

$$h_l = c_l T + h_f + c_l (T - T_0) \quad (5.64)$$

onde  $T_e$  é a temperatura eutética e  $h_f$  é a entalpia de fusão, ou seja,

$$h_f = (h_l - h_s) |_{T=T_e} \quad (5.65)$$

A fim de eliminar a temperatura como uma variável dependente explícita na eq. (5.59), isola-se  $\nabla T$  na eq. (5.61),

$$\nabla T = \frac{\nabla h}{c_K} + \frac{\nabla (h_K - h)}{c_K} \quad (5.66)$$

e substitui-se esta expressão de  $\nabla T$  na eq. (5.59), obtendo

$$\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V h) = \nabla \cdot \left[ \frac{k}{c} \nabla h \right] + \nabla \cdot \left[ \frac{k}{c_K} \nabla (h_K - h) \right] + \nabla \cdot \left[ \sum_K \bar{\rho}_K (V_K - V) (h_K - h) \right] \quad (5.67)$$

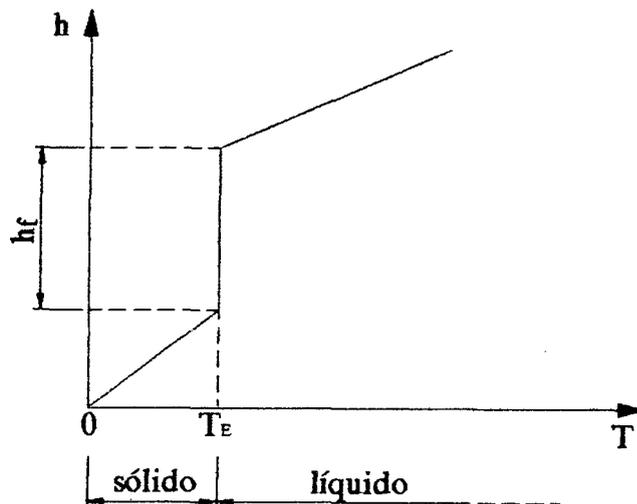


Fig. 5.2 Diagrama  $h \times T$  para uma substância binária sólido-líquido

Observe-se entretanto que a temperatura segue sendo uma variável do problema, agora implícita, pois está presente na definição da entalpia da fase K, eq. (5.60).

Desenvolvendo o último termo da eq. (5.67) tem-se

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \left( \sum_K \bar{\rho}_K (V_K - V)(h_K - h) \right) &= \nabla \cdot \rho \left( f_s (V_s - V)(h_s - h) + f_l (V_l - V)(h_l - h) \right) \\
&= \nabla \cdot \rho \left( f_s (V_s - V)(h_s - h) + (f_l V_l - f_l V)(h_l - h) \right) \\
&= \nabla \cdot \rho \left( f_s (V_s - V)(h_s - h) + (V - f_s V_s - f_l V)(h_l - h) \right) \\
&= \nabla \cdot \rho \left( f_s (V_s - V)(h_s - h) - f_s (V_s - V)(h_l - h) \right) \\
&= \nabla \cdot \left( \rho f_s (V - V_s)(h_l - h_s) \right) \tag{5.68}
\end{aligned}$$

substituindo a eq. (5.68) na eq. (5.67) e fazendo por simplicidade  $K = s$ , resulta em

$$\begin{aligned}
\frac{\partial (\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V h) &= \nabla \cdot \left( \frac{k}{c_s} \nabla h \right) + \nabla \cdot \left( \frac{k}{c_s} \nabla (h_s - h) \right) + \\
&\quad - \nabla \cdot \left( \rho f_s (V - V_s)(h_l - h_s) \right) \tag{5.69}
\end{aligned}$$

O último termo desta equação representa o fluxo de energia associado ao movimento relativo entre fases.

#### CONSERVAÇÃO DE ESPÉCIES

A equação de conservação da espécie  $\alpha$  na fase  $K$  é obtida fazendo-se na eq. (5.13)  $\phi_K = f_K^\alpha$ ,  $J_K^\alpha = -\rho_K D_{KK}^\alpha \nabla f_K^\alpha$  e

$$S_K^\alpha = \dot{M}_K^\alpha,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}_K f_K^\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho}_K V_K f_K^\alpha) = \nabla \cdot (\rho f_K D_{KK}^\alpha \nabla f_K^\alpha) + g_K \dot{M}_K^\alpha \tag{5.70}$$

onde  $\dot{M}_K^\alpha$  representa a produção ou destruição da espécie  $\alpha$  na fase  $K$ , e  $D_{KK}^\alpha$  o coeficiente de difusão de massa da espécie  $\alpha$  na fase  $K$ .

A equação contínua de conservação da espécie  $\alpha$  é obtida somando-se a eq. (5.70) para cada fase. Observando que

$\sum_K g_K \dot{M}_K^\alpha = 0$ , pois a produção ou destruição da espécie  $\alpha$  na fase  $K$  precisa necessariamente estar acompanhada da destruição ou produção da mesma quantidade desta espécie em outra fase, obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_K \bar{\rho}_K f_K^\alpha \right) + \nabla \cdot \left( \sum_K \bar{\rho}_K \mathbf{V}_K f_K^\alpha \right) = \nabla \cdot \left( \sum_K \rho f_K D_K^\alpha \nabla f_K^\alpha \right) \quad (5.71)$$

Da mesma forma já adotada nas outras equações de conservação, o fluxo convectivo da espécie  $\alpha$  pode ser decomposto numa parte referente à média da mistura e em outra referente ao movimento das fases  $K$  em relação à média da mistura, como segue

$$\sum_K \bar{\rho}_K \mathbf{V}_K f_K^\alpha = \rho \mathbf{V} f^\alpha + \sum_K \bar{\rho}_K (\mathbf{V}_K - \mathbf{V}) (f_K^\alpha - f^\alpha) \quad (5.72)$$

onde a concentração da espécie  $\alpha$  na mistura é dada por

$$f^\alpha = \frac{1}{\rho} \sum_K \bar{\rho}_K f_K^\alpha = \sum_K f_K f_K^\alpha \quad (5.73)$$

Substituindo a eq. (5.72) na eq. (5.71) e tratando o termo temporal conforme já foi feito nas outras equações de conservação (ver por exemplo eq. (5.58)), tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho f^\alpha) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} f^\alpha) = \nabla \cdot \left( \sum_K \rho f_K D_K^\alpha \nabla f_K^\alpha \right) - \nabla \cdot \left[ \sum_K \bar{\rho}_K (\mathbf{V}_K - \mathbf{V}) (f_K^\alpha - f^\alpha) \right] \quad (5.74)$$

Particularizando novamente para uma mistura binária sólido-líquido, a difusão de massa no sólido é desprezível se comparada à difusão de massa no líquido ( $D_s^\alpha \ll D_l^\alpha$ ). Empregando também a identidade

$$\nabla f_l^\alpha = \nabla f^\alpha + \nabla (f_l^\alpha - f^\alpha) \quad (5.75)$$

o primeiro termo do lado direito da eq. (5.74) pode ser desenvolvido da seguinte forma

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left( \sum_K \rho f_K D_K^\alpha \nabla f_K^\alpha \right) &= \nabla \cdot (\rho f_l D_l^\alpha \nabla f_l^\alpha) \\ &= \nabla \cdot (\rho D \nabla f^\alpha) + \nabla \cdot \left[ \rho D \nabla (f_l^\alpha - f^\alpha) \right] \end{aligned} \quad (5.76)$$

onde

$$D = f_l D_l^\alpha \quad (5.77)$$

O segundo termo do lado direito da eq. (5.74) pode ser desenvolvido como segue

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left( \sum_k \bar{\rho}_k (v_k - v) (f_k^\alpha - f^\alpha) \right) &= \\ &= \nabla \cdot \rho \left[ f_s (v_s - v) (f_s^\alpha - f^\alpha) + f_l (v_l - v) (f_l^\alpha - f^\alpha) \right] \\ &= \nabla \cdot \rho \left[ f_s (v_s - v) (f_s^\alpha - f^\alpha) + (f_l v_l - f_l v) (f_l^\alpha - f^\alpha) \right] \\ &= \nabla \cdot \rho \left[ f_s (v_s - v) (f_s^\alpha - f^\alpha) + (v - f_s v_s - f_l v) (f_l^\alpha - f^\alpha) \right] \\ &= \nabla \cdot \rho \left[ f_s (v_s - v) (f_s^\alpha - f^\alpha) - f_s (v_s - v) (f_l^\alpha - f^\alpha) \right] \\ &= \nabla \cdot \left[ \rho f_s (v - v_s) (f_l^\alpha - f_s^\alpha) \right] \quad (5.78) \end{aligned}$$

Substituindo as eq. (5.76) e (5.78) na eq. (5.74), tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho f^\alpha) + \nabla \cdot (\rho v f^\alpha) &= \nabla \cdot (\rho D \nabla f^\alpha) + \nabla \cdot \left[ \rho D \nabla (f_l^\alpha - f^\alpha) \right] + \\ &- \nabla \cdot \left[ \rho f_s (v - v_s) (f_l^\alpha - f_s^\alpha) \right] \quad (5.79) \end{aligned}$$

Os primeiros dois termos do lado direito desta equação representam o fluxo líquido difusivo da espécie  $\alpha$ . O último termo representa o fluxo de espécies devido ao movimento relativo entre fases.

É importante observar que no caso de misturas binárias é suficiente resolver a eq. (5.80) somente para uma espécie, uma vez que

$$\sum_\alpha f^\alpha = 1 \quad (5.80)$$

## RELAÇÕES COMPLEMENTARES

O fechamento do sistema de equações de conservação que governam o problema, eqs. (5.18), (5.53), (5.69) e (5.79), requer relações complementares para a determinação da fração em massa de uma fase na mistura,  $f_k$ , assim como a sua composição  $f_k^\alpha$ .

Para um grande número de aplicações práticas em sistemas binários, pode-se assumir a hipótese de equilíbrio local de composição na interface entre as fases. Isto não impede entretanto a existência de gradientes de composição entre as fases, implicando na realidade em que a resistência ao transporte de constituintes através da interface seja desprezível. Sob estas condições pode-se relacionar o contínuo e a composição das fases com a temperatura, através de um diagrama de equilíbrio de fases. Um exemplo deste tipo de diagrama para uma mistura binária com fases sólida e líquida é mostrado na figura 5.3.

Em conformidade com o diagrama da figura 5.3 a conservação da espécie  $\alpha$  pode ser expressa como segue

$$f^\alpha = f_s f_s^\alpha + f_l f_l^\alpha \quad (5.81)$$

Para a condição de saturação pode-se afirmar que

$$f_s + f_l = 1 \quad (5.82)$$

Substituindo esta equação na eq. (5.81) obtém-se outra expressão para  $f_s$ ,

$$\begin{aligned} f^\alpha &= f_s f_s^\alpha + (1 - f_s) f_l^\alpha \\ &= f_s (f_s^\alpha - f_l^\alpha) + f_l^\alpha \\ f_s &= \frac{f_l^\alpha - f^\alpha}{f_l^\alpha - f_s^\alpha} \end{aligned} \quad (5.83)$$

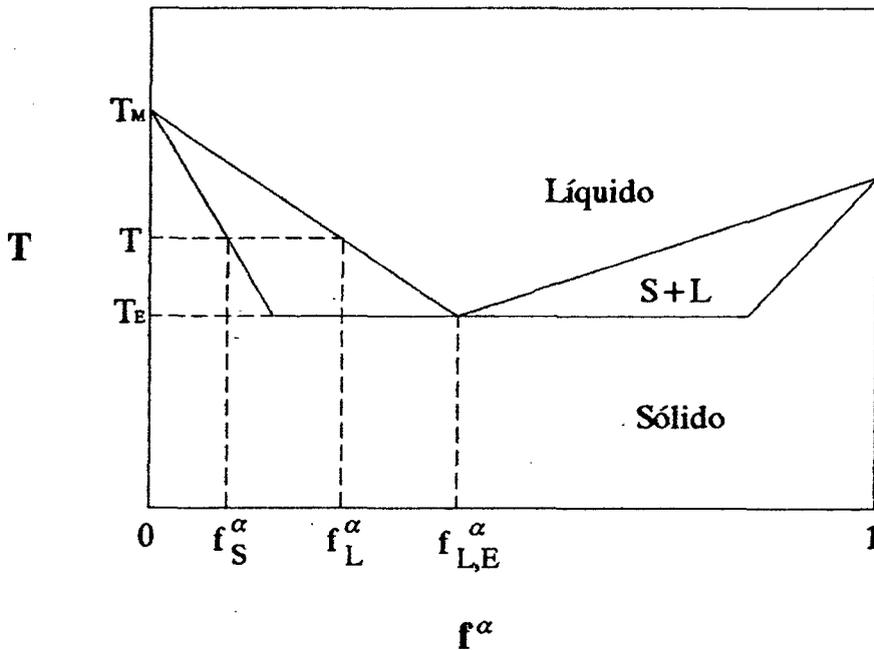


Fig. 5.3 Diagrama de equilíbrio de fases para uma mistura binária sólido-líquido

No caso da opção de trabalhar com o diagrama de fases, é conveniente definir uma razão de partição das frações em massa do soluto  $\alpha$ , entre as fases sólida e líquida, como segue

$$K_P = \frac{f_S^\alpha}{f_L^\alpha} \quad (5.84)$$

Na condição em que o soluto  $\alpha$  tem solubilidade limitada na fase sólida  $K_P < 1$ . No caso limite onde a solubilidade de  $\alpha$  é igual nas duas fases  $K_P \rightarrow 1$ , a mudança de fase ocorre a uma temperatura discreta, não existindo portanto zona esponjosa.

Aproximando a pequena curvatura das linhas do diagrama de equilíbrio de fases para retas, a eq.(5.83) pode também ser expressa da seguinte forma

$$f_s = \frac{1}{1 - K_P} \left( \frac{T - T_{\text{liq}}}{T - T_M} \right) \quad (5.85)$$

onde  $T$  é a temperatura local,  $T_{liq}$  é a temperatura do líquido correspondente a  $f^\alpha$ , e  $T_M$  é a temperatura de fusão da mistura para  $f^\alpha \rightarrow 0$ . É possível ainda através das eqs. (5.81) e (5.84) relacionar as composições das fases e da mistura, resultando

$$f_s^\alpha = \left( \frac{K_P}{1 + f_s^\alpha (K_P - 1)} \right) f^\alpha \quad (5.86)$$

e

$$f_l^\alpha = \left( \frac{1}{1 + f_s^\alpha (K_P - 1)} \right) f^\alpha \quad (5.87)$$

Quanto à permeabilidade da região bifásica, levando em conta a necessidade de considerar a morfologia da zona esponjosa, bem como a sua variação ao longo do processo de mudança de fase, Bennon e Incropera, 1987, sugerem a equação de Kozeny-Carman (ou Blake-Kozeny),

$$K_x = K = K_o \left( \frac{g_l^3}{(1 - g_l)^2} \right) \quad (5.88)$$

onde  $K_o$  é uma constante que depende da morfologia da zona esponjosa. Na região sólida  $g_l = 0$  e portanto  $K = 0$ . Na região líquida  $g_l = 1$  e portanto  $K \rightarrow \infty$ . Entretanto segundo Bird et al., 1960, a eq. (5.88) é válida de um modo geral para  $g_l < 0,5$ . Sendo assim é desejável o emprego de uma correlação mais adequada, já que no caso da simulação de um processo de solidificação tem-se  $g_l$  variando desde  $g_l = 1$  até  $g_l = 0$ . Para uma discussão mais detalhada do escoamento na região esponjosa sob o ponto de vista dos meios porosos sugere-se, por exemplo, Kaviany, 1992.

## 5.2.1 MÉTODO DE SOLUÇÃO

As equações (5.18), (5.53), (5.69) e (5.79) são agora discretizadas segundo o método dos volumes finitos, conforme descrito por Patankar, 1980. É também empregado o seu algoritmo de propósitos gerais para a solução do sistema de equações algébricas resultante.

Observe-se que todas as equações foram desenvolvidas de modo a poderem ser escritas para a variável genérica  $\phi$ , referente à mistura sólido-líquido, na seguinte forma padrão

$$\frac{\partial (\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V\phi) = \nabla \cdot (\Gamma_{\phi} \nabla \phi) + S_{\phi} \quad (5.89)$$

Integrando esta equação em um volume de controle típico parcialmente solidificado como o mostrado na figura 5.4, no sistema cartesiano de coordenadas, em duas dimensões, e introduzindo o coeficiente de relaxação  $\alpha$ , obtém-se [Patankar, 1980]

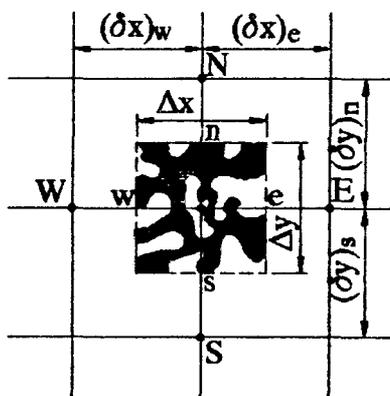


Fig. 5.4 Volume de controle parcialmente solidificado

$$\frac{a_P}{\alpha} \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b + (1-\alpha) \frac{a_P}{\alpha} \phi_P^* \quad (5.90)$$

onde

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_P^0 - S_P \Delta x \Delta y \quad (5.91)$$

$$a_E = D_{\bullet} + [-F_{\bullet}, 0] \quad (5.92)$$

$$a_V = D_V + [-F_V, 0] \quad (5.93)$$

$$a_N = D_n + [-F_n, 0] \quad (5.94)$$

$$a_S = D_{\bullet} + [-F_{\bullet}, 0] \quad (5.95)$$

$$a_P^0 = \frac{\rho_P^0 \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (5.96)$$

$$b = S_C \Delta x \Delta y + a_P^0 \phi_P^0 \quad (5.97)$$

$$D_{\bullet} = \frac{\Gamma_{\bullet} A_{\bullet}}{(\delta x)_{\bullet}} \quad (5.98)$$

$$D_V = \frac{\Gamma_V A_V}{(\delta x)_V} \quad (5.99)$$

$$D_n = \frac{\Gamma_n A_n}{(\delta y)_n} \quad (5.100)$$

$$D_{\bullet} = \frac{\Gamma_{\bullet} A_{\bullet}}{(\delta y)_{\bullet}} \quad (5.101)$$

$$F_{K,\bullet} = (\rho f_{K K} u_K A)_{\bullet} \quad (5.102)$$

$$F_{K,V} = (\rho f_{K K} u_K A)_V \quad (5.103)$$

$$F_{K,n} = (\rho f_{K K} v_K A)_n \quad (5.104)$$

$$F_{K,\bullet} = (\rho f_{K K} v_K A)_{\bullet} \quad (5.105)$$

Nesta metodologia o termo fonte é linearizado da seguinte forma

$$S_{\phi} = S_C + S_P \phi_P \quad (5.106)$$

Os termos do tipo [a,b] significam que é assumido o maior valor entre a e b. O superíndice o refere-se ao valor da variável  $\phi$  no intervalo de tempo anterior ao que está sendo resolvido, enquanto que o superíndice \* refere-se ao valor da

variável  $\phi$  na iteração anterior.

Nas definições dos fluxos de massa  $F$  estes são generalizados através do subíndice  $k$ , podendo assumir os valores da própria mistura de fases, puro sólido ou ainda puro líquido [Bennon e Incropera, 1988]. O princípio da conservação da massa estabelece que na interface de um volume de controle

$$F_{s,i} + F_{l,i} = F_i \quad (5.107)$$

Nos problemas que não envolvem mudança de fase o termo fonte  $S_\phi$  abriga usualmente os termos referentes ao gradiente de pressão, forças de corpo e surgimento ou desaparecimento da variável  $\phi$ . Além destes, na presente formulação também são incluídos no termo fonte as parcelas referentes ao movimento relativo entre as fases, à mudança de fase e ao escoamento através da zona esponjosa.

Observe-se que na equação da energia, eq. (5.69), o termo difusivo não tem simplesmente a forma  $-\Gamma_\phi \nabla \phi$ . O fluxo difusivo completo,  $J^D$ , é o seguinte

$$J^D = -\frac{k}{c_s} \nabla h - \frac{k}{c_s} \nabla (h_s - h) \quad (5.108)$$

De maneira semelhante o termo convectivo não tem mais a forma padrão  $\rho V \phi$ . O fluxo convectivo completo,  $J^C$ , é o seguinte

$$J^C = \rho V h + \rho f_s (V - V_s) (h_l - h_s) \quad (5.109)$$

O segundo termo do lado direito da eq. (5.108) e também o da eq. (5.109) são alojados no termo fonte. O mesmo ocorre com a equação da conservação das espécies, eq. (5.79).

Como consequência desta decomposição dos fluxos a adoção dos esquemas "power-law", exponencial e híbrido [Patankar, 1980], para a interpolação da variável dependente nas faces dos volumes de controle, baseados no número de Peclet da mistura sólido-líquido ( $Pe_\phi = \rho u \delta x / \Gamma_\phi$ ) podem gerar resultados fisicamente inconsistentes. Deve-se então adotar o número de Peclet associado

à fase K

$$Pe_K = \frac{\rho_K u_K \delta x}{\Gamma_K} \quad (5.110)$$

De um modo geral, para sistemas do tipo sólido-líquido os números de Peclet associados à conservação da quantidade de movimento e de espécies são suficientemente grandes, de modo a gerar bons resultados com o esquema "upwind". Entretanto, na equação da conservação da energia este esquema tende a gerar transportes difusivos de energia térmica maiores do que os reais, mesmo que fisicamente consistentes. Este problema é mais pronunciado no caso de substâncias com alta condutividade térmica, o que causa números de Peclet da fase pequenos, como por exemplo nos metais.

Quanto ao problema da difusão numérica, deve-se ter especial cuidado nos testes de refinamento da malha para a solução da equação de conservação das espécies, uma vez que o número de Peclet associado a esta equação é bastante alto.

A integração do termo fonte  $S_\phi$  da equação genérica (5.89) é realizado ao longo do volume de controle mostrado na figura 5.4, como segue

$$\bar{S} = \int_0^m \int_0^v S_\phi \, dx dy = (S_c + S_p \phi_p) \Delta x \Delta y \quad (5.111)$$

Colocando nesta forma o termo referente à equação de Darcy na equação da conservação da quantidade de movimento, eq. (5.53), tem-se

$$\bar{S}^{Da} = - \frac{\mu_l \rho}{K_x \rho_l} (u - u_s) \Delta x \Delta y = (S_c^{Da} + S_p^{Da} u) \Delta x \Delta y \quad (5.112)$$

onde

$$S_c^{Da} = \frac{\mu_l \rho}{K_x \rho_l} u_s \quad (5.113)$$

$$S_p^{Da} = - \frac{\mu_l \rho}{K_x \rho_l} \quad (5.114)$$

Nas equações de conservação da energia (5.69) e das espécies (5.79), tem-se termos difusivos da forma

$$S^D = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \psi) \quad (5.115)$$

onde a variável  $\psi$  representa  $(h_e - h)$  na equação da energia e  $(f_l^\alpha - f^\alpha)$  na equação das espécies.

Uma vez que a eq. (5.115) representa apenas uma parte do fluxo difusivo, estes termos fonte são discretizados considerando-se uma variação linear da variável  $\psi$  de um volume de controle para outro, assim

$$\begin{aligned} S^D \Delta x \Delta y &= \int_e^n \int_e^w \nabla \cdot (\Gamma \nabla \psi) \, dx dy \\ &= \int_e^n \int_e^w \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \, dx dy + \int_e^n \int_e^w \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \, dx dy \\ &= \int_e^n \left[ \left( \Gamma \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_e - \left( \Gamma \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_w \right] dy + \int_e^w \left[ \left( \Gamma \frac{\partial \psi}{\partial y} \right)_n - \left( \Gamma \frac{\partial \psi}{\partial y} \right)_s \right] dx \\ &= \frac{\Gamma_e A_e}{(\delta x)_e} (\psi_E - \psi_P) - \frac{\Gamma_w A_w}{(\delta x)_w} (\psi_P - \psi_W) + \\ &\quad + \frac{\Gamma_n A_n}{(\delta y)_n} (\psi_N - \psi_P) - \frac{\Gamma_s A_s}{(\delta y)_s} (\psi_P - \psi_S) \\ &= D_e \psi_E + D_w \psi_W + D_n \psi_N + D_s \psi_S - (D_e + D_w + D_n + D_s) \psi_P \end{aligned} \quad (5.116)$$

ou, usando  $\psi$  da iteração anterior inclusive no ponto P, o que implica em que  $S_P^0 = 0$ ,

$$S_C^D = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left( D_e \psi_E^* + D_w \psi_W^* + D_n \psi_N^* + D_s \psi_S^* - (D_e + D_w + D_n + D_s) \psi_P^* \right) \quad (5.117)$$

A parte convectiva do termo fonte destas mesmas equações tem a forma genérica

$$\begin{aligned}
 S^C &= - \nabla \cdot \left[ \rho f_s (V - V_s) (\phi_l - \phi_s) \right] \\
 &= - \nabla \cdot \left[ \rho (f_s \phi_l - f_s \phi_s) (V - V_s) \right] \quad (5.118)
 \end{aligned}$$

substituindo na eq. (5.118) a relação  $- f_s \phi_s = f_l \phi_l - \phi$ , resulta em

$$\begin{aligned}
 S^C &= - \nabla \cdot \left[ \rho (f_s \phi_l + f_l \phi_l - \phi) (V - V_s) \right] \\
 &= - \nabla \cdot \left[ \rho (\phi_l - \phi) (V - V_s) \right] \quad (5.119)
 \end{aligned}$$

Observe-se que  $S^C$  é diferente de zero somente na zona esponjosa, já que na zona de puro líquido  $\phi = \phi_l$  e na zona de puro sólido  $V = V_s$ .

A identidade

$$- \rho (\phi_l - \phi) (V - V_s) = \rho V \phi - (\rho f_s V_s \phi_s + \rho f_l V_l \phi_l) \quad (5.120)$$

permite exprimir  $S^C$  da seguinte forma

$$S^C = S_m^C - (S_s^C + S_l^C) \quad (5.121)$$

onde o subíndice  $m$  refere-se à mistura sólido-líquido, sendo empregado aqui apenas para diferenciar de  $S^C$ . Ainda

$$S_m^C = \nabla \cdot (\rho V \phi) \quad (5.122)$$

e

$$S_k^C = \nabla \cdot (\rho f_{kK} V_{kK} \phi_{kK}) \quad (5.123)$$

Integrando a eq. (5.121) ao longo do volume de controle da figura 5.4, tem-se

$$\begin{aligned}
 \bar{S}_m^C \Delta x \Delta y &= \int_0^n \int_0^{\tilde{y}} \nabla \cdot (\rho V \phi) \, dx dy \\
 &= \int_0^n \int_0^{\tilde{y}} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u \phi) \, dx dy + \int_0^n \int_0^{\tilde{y}} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v \phi) \, dx dy
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^m \left( (\rho u \phi)_e - (\rho u \phi)_v \right) dy + \int_0^w \left( (\rho v \phi)_n - (\rho v \phi)_s \right) dx \\
&= (C \rho u A)_e \phi_e - (C \rho u A)_v \phi_v + (C \rho v A)_n \phi_n - (C \rho v A)_s \phi_s \\
&= F_e \phi_e - F_v \phi_v + F_n \phi_n - F_s \phi_s
\end{aligned} \tag{5.124}$$

ou, usando  $\phi$  da iteração anterior e observando que  $S_p^c = 0$ ,

$$\bar{S}_m^c = \frac{1}{\Delta x \Delta y} (F_e \phi_e^* - F_v \phi_v^* + F_n \phi_n^* - F_s \phi_s^*) \tag{5.125}$$

Adotando o esquema "upwind",

$$\begin{aligned}
\bar{S}_m^c = \frac{1}{\Delta x \Delta y} & \left( [F_e, 0] + [-F_v, 0] + [F_n, 0] + [-F_s, 0] \right) \phi^* + \\
& - [-F_e, 0] \phi_e^* - [F_v, 0] \phi_v^* - [-F_n, 0] \phi_n^* - [F_s, 0] \phi_s^*
\end{aligned} \tag{5.126}$$

Finalmente, para os termos referentes às fases K,

$$\bar{S}_k^c = \frac{1}{\Delta x \Delta y} (F_{k,e} \phi_{k,e}^* - F_{k,v} \phi_{k,v}^* + F_{k,n} \phi_{k,n}^* - F_{k,s} \phi_{k,s}^*) \tag{5.127}$$

adotando o esquema "upwind" obtém-se uma equação semelhante à eq. (5.126), e colocando na forma da eq. (5.121),

$$S_c^c = \bar{S}_m^c - (\bar{S}_e^c + \bar{S}_l^c) \tag{5.128}$$

### 5.3 ANALOGIAS ENTRE LIGAS METÁLICAS E SOLUÇÕES AQUOSAS

O fenômeno da solidificação em ligas metálicas não eutéticas envolve mecanismos de difusão de calor e massa, que por sua vez podem causar correntes convectivas. Somando-se a isto a possibilidade da ocorrência de uma região esponjosa entre as regiões de puro sólido e puro líquido é fácil concluir que trata-se de um fenômeno de grande complexidade. A fim de melhor compreender estes mecanismos vários pesquisadores tais como McDonald e Hunt, 1969, Szekely e Jassal, 1978, Christenson e Incropera, 1989, Braga e Viskanta, 1990, entre outros recorreram a soluções aquosas. Isto deve-se ao fato destas soluções, tais como  $\text{NH}_4\text{Cl}-\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NaCl}-\text{H}_2\text{O}$  e  $\text{Na}_2\text{CO}_3-\text{H}_2\text{O}$  solidificarem em forma dendrítica, a temperaturas próximas à temperatura ambiente e apresentarem boa transparência, permitindo assim a visualização ao longo de todo o processo.

Em 1990 Neilson e Incropera simularam a solidificação de uma solução de cloreto de amônia-água resfriada pela base. O objetivo foi o de mostrar a potencialidade do modelo criado por Bennon e Incropera, 1987, para a simulação da mudança de fase em sistemas binários sólido-líquido. Nesta simulação o modelo foi capaz de prever a formação de macrosegregações do tipo canal vertical, objeto da preocupação dos metalurgistas na solidificação de ligas metálicas.

Entretanto a analogia entre soluções aquosas e ligas metálicas não é total já que, conforme observaram Prescott e Incropera, 1991, o número de Prandtl das soluções aquosas ( $\text{Pr} \cong 9$  para  $\text{NH}_4\text{Cl}-\text{H}_2\text{O}$ ) é geralmente muito maior do que o das ligas metálicas ( $\text{Pr} \cong 0,02$  para  $\text{Pb}-\text{Sn}$ ).

Outra diferença relevante reside no parâmetro  $N$ , que mede a importância relativa entre o empuxo originado por gradientes de concentração e aquele originado por gradientes de temperatura, assim definido

$$N = \frac{\beta_{\alpha} \Delta f^{\alpha}}{\beta_T \Delta T} \quad (5.129)$$

onde  $\beta_{\alpha}$  e  $\beta_T$  são os coeficientes de expansão mássico e térmico, respectivamente, e  $f^{\alpha}$  é a fração em massa do soluto  $\alpha$  na mistura. Na solução  $\text{NH}_4\text{Cl}-\text{H}_2\text{O}$   $N = -1,4$ , enquanto que na liga  $\text{Pb}-\text{Sn}$   $N = -14$ .

Deve-se observar ainda a existência de uma diferença significativa entre a permeabilidade do meio poroso formado pela região bifásica nos dois casos. A permeabilidade, conforme pode ser verificado na eq. (5.88), é fortemente dependente de  $g_l$  (fração em volume do líquido na região bifásica). Como a curva de variação de  $g_l$  desde  $g_l = 1$  (puro líquido) até  $g_l = 0$  (puro sólido) é diferente nos dois casos, a permeabilidade também o é.

O exposto até aqui mostra que deve-se ter muita prudência ao tentar tirar conclusões aplicáveis a ligas metálicas a partir de experimentos com soluções aquosas.

## 6 MODELO EM DUAS FASES PARA LIGAS BINARIAS

### 6.1 INTRODUÇÃO

No modelo contínuo ou de mistura apresentado no capítulo 5 [Bennon e Incropera, 1987] as equações são inicialmente escritas para cada fase separadamente e logo após somadas, constituindo-se a partir deste ponto num modelo de mistura. Modelos deste tipo são chamados modelos de uma fase. Este procedimento carrega consigo a impossibilidade de um tratamento detalhado da interface sólido-líquido, uma vez que ela virtualmente desaparece no momento em que as equações são somadas.

Os modelos de mistura assumem forçosamente a hipótese da existência de equilíbrio termodinâmico. É perdida assim a possibilidade de tratar adequadamente as resistências interfaciais, tanto térmicas como mássicas. Em outras palavras, ao discretizar o domínio em volumes para a solução do sistema de equações, nos volumes em mudança de fase é assumida a hipótese de que  $T_l = T_s$ . A própria temperatura da interface nem mesmo consta na formulação.

Os modelos em duas fases, contrariamente, ao tratarem separadamente cada fase, admitem um equacionamento formal da interface. A hipótese de equilíbrio termodinâmico não mais necessita ser adotada. Assim, nos volumes que contêm a interface entre as fases líquida e sólida,  $T_l \neq T_s \neq T_i$ , sendo  $T_i$  a temperatura da interface. Observe-se que na própria interface,  $T_l = T_s = T_i$ , o que é chamado equilíbrio termodinâmico local.

Quanto à morfologia da interface sólido-líquido, esta pode variar desde totalmente plana até a complexa forma dendrítica. A determinação desta morfologia depende da adoção de um modelo capaz de descrever a estabilidade da interface. No livro texto de Kurz e Fisher, 1986, por exemplo, encontra-se um equacionamento relativamente simples para este fim. Neste

modelo é adotada a forma elíptica para as estruturas, conforme é mostrado na figura 6.1 . A figura 6.2 mostra diferentes formas interfaciais para o caso da liga Al-2%Cu. Na construção da figura foi adotado um gradiente térmico na interface, do lado do líquido, de 10 K/mm . São plotados o espaçamento dendrítico primário,  $\lambda_1$  , e o raio de curvatura das estruturas formadas,  $R = b^2/a$  , em função da velocidade de avanço da interface. A interface assume uma forma plana para baixas velocidades de avanço da interface, passa por formas celulares, posteriormente dendríticas e retorna novamente para a forma plana quando grandes velocidades de avanço da interface são alcançadas. Naturalmente as microestruturas, e conseqüentemente as propriedades físicas resultantes da liga variam para cada velocidade de avanço da interface.

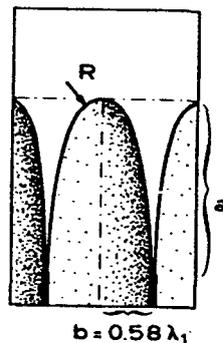


Fig. 6.1 Forma elíptica adotada para a interface no modelo descrito por Kurz e Fisher

No crescimento de cristais, tanto pelo método de Bridgman como pelo método de Czochralski, ocorrem interfaces planas. Na fundição predominam as formas celular e dendrítica. Na soldagem pode ocorrer desde a forma plana até a dendrítica. Uma discussão mais pormenorizada associada a tal assunto é encontrada em Battle, 1992.

No caso de uma solidificação direcional onde a extração do calor é realizada pela base, não existe a possibilidade da ocorrência de correntes convectivas. Da mesma forma se o componente de menor densidade da liga solidificar numa razão

maior do que o de maior densidade, não existe a possibilidade da ocorrência de gradientes inversos de densidade que possam desestabilizar o sistema, dando origem a correntes de convecção natural.

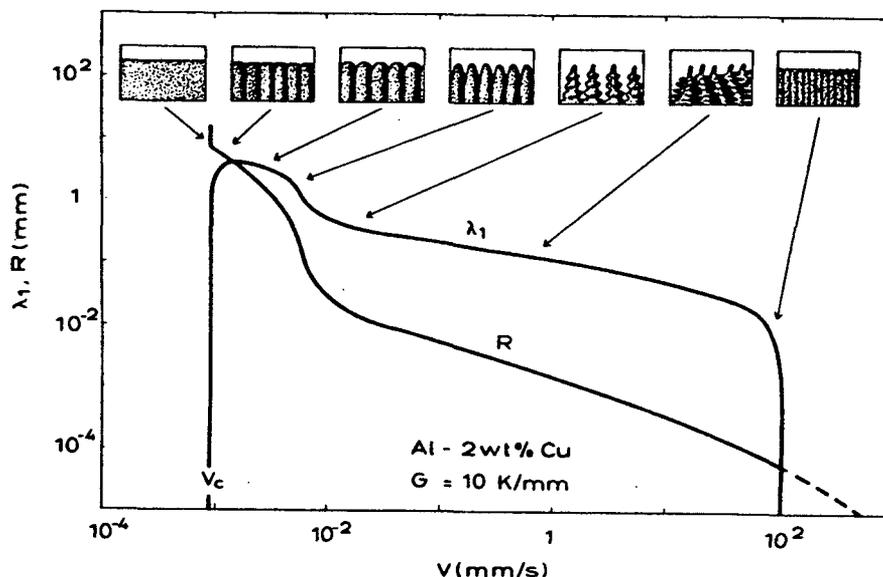


Fig. 6.2 Morfologia da interface segundo Kurz e Fisher

No final da década de 70 e início da de 80 alguns pesquisadores concentraram esforços no modelamento da solidificação direcional. Os exemplos mais representativos deste esforço, para o caso de metais puros, são os trabalhos de Garcia e Prates, 1978, Garcia, Clyne e Prates, 1979, Clyne e Garcia, 1980, e para o caso de ligas os trabalhos de Clyne, 1982, e Clyne, 1984. Nestes trabalhos as ligas são abordadas sob o ponto de vista térmico, não sendo portanto tratado o acoplamento dos problemas térmico e mássico.

Uma vez discutidos aspectos tais como modelos de mistura e modelos em duas fases, equilíbrio termodinâmico, morfologia da interface e natureza da extração do calor, passa-se agora a descrever um modelo pormenorizado e eficiente do ponto

de vista computacional, para atacar a transferência de calor e massa em ligas metálicas. Trata-se de um modelo em duas fases, aplicável a situações com interfaces plana ou celular, para o caso da solidificação unidirecional onde os mecanismos de transferência de calor e massa são difusivos.

6.2 PROBLEMA TÉRMICO

No que segue considera-se que o calor seja removido pela base, conforme mostra a figura 6.3 . Admite-se a existência de uma resistência térmica peça-molde, incorporada ao coeficiente global de transferência de calor  $U$ .

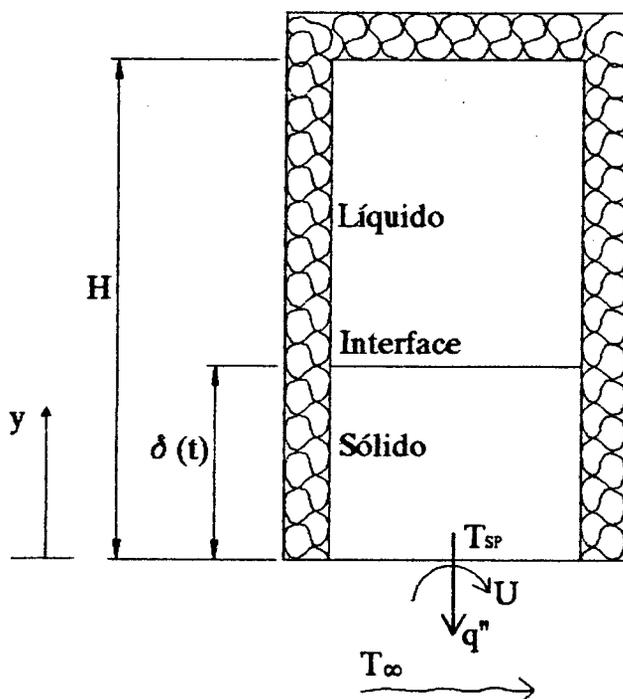


Fig. 6.3 Modelo físico do problema

A conservação de energia térmica para o sólido pode ser

escrita, no sistema cartesiano de coordenadas, da seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho_s c_s T_s \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left[ k_s \frac{\partial T_s}{\partial y} \right] \quad [W/m^3] \quad (6.1)$$

e para o líquido,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho_l c_l T_l \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left[ k_l \frac{\partial T_l}{\partial y} \right] \quad [W/m^3] \quad (6.2)$$

Com o objetivo de utilizar nas eqs. (6.1) e (6.2) a entalpia, define-se a entalpia da fase K como

$$h_k = \int_o^T c_k dT + h_k^o \quad (6.3)$$

onde o índice "o" refere-se à origem arbitrada. Assim, a entalpia da fase sólida é avaliada da seguinte forma

$$h_s = c_s ( T_s - T_o ) + h_s^o \quad (6.4)$$

Assumindo que  $h_s^o = h_s |_{T_o} = 0$ , a eq. (6.4) reduz-se a

$$h_s = c_s ( T_s - T_o ) \quad (6.5)$$

De forma similar a entalpia do líquido pode ser escrita como

$$h_l = c_s ( T_{sol} - T_o ) + h_f + c_l ( T_l - T_{liq} ) \quad (6.6)$$

onde  $T_{liq}$  é a temperatura correspondente à linha de líquido no diagrama de equilíbrio de fases da liga, para a concentração inicial do líquido, e  $T_{sol}$  é a correspondente temperatura sobre a linha de sólido (ver figura 6.4). Observe-se que uma vez assumida a existência de equilíbrio termodinâmico local entre as fases,  $T_{sol} = T_{liq}$ , conforme pode ser visto no diagrama mostrado na figura 6.4. Como é usual na abordagem do tema, apenas por simplicidade, as linhas do diagrama são aproximadas por retas.

O calor latente de fusão é representado por  $h_f$ . Em termos de entalpia,

$$h_f = h_{li} - h_{si} \tag{6.7}$$

onde o subíndice "i" refere-se à interface.

Reescrevendo então as eq. (6.1) e (6.2) em termos de entalpia obtém-se, para o sólido

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho_s h_s \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{k_s}{c_s} \frac{\partial h_s}{\partial y} \right] \quad [W/m^3] \tag{6.8}$$

e para o líquido

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho_l h_l \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{k_l}{c_l} \frac{\partial h_l}{\partial y} \right] \quad [W/m^3] \tag{6.9}$$

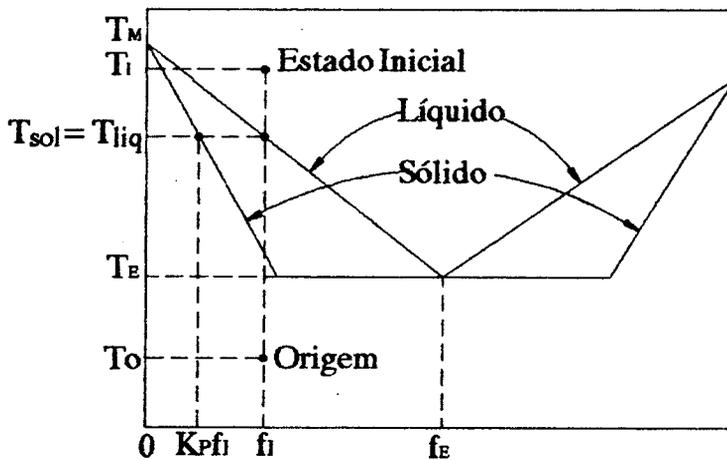


Fig. 6.4 Diagrama de equilíbrio de fases do tipo de liga binária em questão

A fim de gerar mais subsídios para a determinação das entalpias na interface,  $h_{si}$  e  $h_{li}$ , realiza-se nela um balanço de

calor. Na ausência de qualquer fenômeno associado à instabilidade no momento da nucleação, pode-se escrever que

$$\rho_s h_f \frac{d\delta}{dt} + \frac{k_l}{c_l} \left. \frac{\partial h_l}{\partial y} \right|_{y=\delta} = \frac{k_s}{c_s} \left. \frac{\partial h_s}{\partial y} \right|_{y=\delta} \quad (6.10)$$

onde  $d\delta/dt$  é a velocidade de avanço da interface.

Como condições de contorno e inicial para o sólido tem-se, conforme as figuras 6.3 e 6.4, convertendo as temperaturas em entalpias com base no calor específico do sólido a pressão constante,  $c_s$ , que

$$q'' = \frac{U}{c_s} \left[ h_{sp} - h_{\infty} \right] \quad \text{em } y = 0 \text{ e qualquer } t \quad (6.11)$$

$$h_s = h_{si} \quad \text{em } y = \delta(t) \text{ e qualquer } t \quad (6.12)$$

$$h_s = h_{sol} \quad \text{em } t = 0 \text{ e } y = 0 \quad (6.13)$$

Assume-se para a condição de contorno 6.11 que o coeficiente de troca de calor,  $U$ , seja conhecido. Neste coeficiente são levadas em conta tanto as resistências térmicas associadas ao molde, como a resistência associada à troca de calor por convecção com o meio externo. Não há aqui nenhuma intenção de analisar com profundidade o problema da resistência térmica variável peça-molde, já comentado nas seções 1.2 e 4.4 desta tese.

Na condição inicial 6.13 assume-se que tão logo a liga seja vazada no molde a solidificação inicia junto à sua base. O desuperaquecimento do líquido em contato com a base do molde, local por onde o calor é retirado, é imediato. Desta forma a entalpia do estado inicial, ou de vazamento, é reduzida de  $h_I$  para  $h_{liq}$ . Logo após, na solidificação propriamente dita, a entalpia é novamente reduzida de  $h_{liq}$  para  $h_{sol}$ . Estas entalpias são as correspondentes às temperaturas  $T_I$ ,  $T_{liq}$  e  $T_{sol}$  no diagrama de fases da liga, mostrado na figura 6.4.

Como condições de contorno e inicial para o líquido tem-se, conforme as figuras 6.3 e 6.4,

$$\frac{\partial h_l}{\partial y} = 0 \quad \text{em } y = H \text{ e qualquer } t \quad (6.14)$$

$$h_l = h_{li} \quad \text{em } y = \delta(t) \text{ e qualquer } t \quad (6.15)$$

$$h_l = h_I \quad \text{em } t = 0 \text{ e } y > 0 \quad (6.16)$$

A condição inicial 6.16 especifica que todo o líquido está na entalpia inicial, ou de vazamento, com excessão daquele que solidifica junto ao molde ( $y = 0$ ), conforme já foi comentado.

### 6.3 PROBLEMA MASSICO

A conservação da massa do componente  $\alpha$  da liga na fase sólida é descrita pela seguinte equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho_s f_s^\alpha \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \rho_s D_s^\alpha \frac{\partial f_s^\alpha}{\partial y} \right] \quad [\text{Kg/sm}^3] \quad (6.17)$$

onde  $\rho_s$  é a densidade da liga na fase sólida,  $f_s^\alpha$  é a fração em massa ou concentração do componente  $\alpha$  na fase sólida da liga, e  $D_s^\alpha$  é a difusividade mássica deste componente na fase sólida da liga.

De forma similar, para o líquido

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho_l f_l^\alpha \right] = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \rho_l D_l^\alpha \frac{\partial f_l^\alpha}{\partial y} \right] \quad [\text{Kg/sm}^3] \quad (6.18)$$

As ligas ou misturas tratadas nesta tese são binárias, ou seja, são compostas por um solvente e um soluto. A partir deste ponto assume-se que o componente  $\alpha$  a quem se referem as eq. (6.17) e (6.18) é o soluto, deixando-se portanto de referenciar este superíndice.

O balanço de massa na interface, para gerar mais

subsídeos na determinação das concentrações,  $f_{si}$  e  $f_{li}$ , pode ser expresso pela seguinte equação

$$\rho_s \left( f_{li} - f_{si} \right) \frac{d\delta}{dt} = - \rho_l D_l \left. \frac{\partial f_l}{\partial y} \right|_{y=\delta} + \rho_s D_s \left. \frac{\partial f_s}{\partial y} \right|_{y=\delta} \quad (6.19)$$

Como condições de contorno e inicial para o sólido tem-se, conforme as figuras 6.3 e 6.4 ,

$$\frac{\partial f_s}{\partial y} = 0 \quad \text{em } y = 0 \text{ e qualquer } t \quad (6.20)$$

$$f_s = f_{si} \quad \text{em } y = \delta(t) \text{ e qualquer } t \quad (6.21)$$

$$f_s = K_P f_I \quad \text{em } t = 0 \text{ e } y = 0 \quad (6.22)$$

A aproximação das linhas do diagrama de fases por retas, conforme já foi comentado, incorre num  $K_P$  constante (razão de partição entre as fases, definido na eq. (5.84)), para uma certa liga.

Como condições de contorno e inicial para o líquido tem-se, conforme as figuras 6.3 e 6.4 ,

$$\frac{\partial f_l}{\partial y} = 0 \quad \text{em } y = H \text{ e qualquer } t \quad (6.23)$$

$$f_l = f_{li} \quad \text{em } y = \delta(t) \text{ e qualquer } t \quad (6.24)$$

$$f_l = f_I \quad \text{em } t = 0 \text{ e } y > 0 \quad (6.25)$$

A formulação do problema está agora terminada, e se constitui em quatro equações diferenciais acopladas. As condições de balanço na interface sólido-líquido, onde ocorre a mudança de fase, incorporam as descontinuidades de fluxo de calor e de soluto conforme as eqs. (6.10) e (6.19). A seguir será explorada a metodologia de solução do problema.

6.4 MÉTODO DE SOLUÇÃO

O problema em consideração não possui solução analítica e desta forma a solução é obtida numericamente.

A discretização das equações diferenciais (6.8), (6.9), (6.17) e (6.18), bem como a sua solução, é obtida através do método dos volumes finitos [Patankar, 1980].

A integração destas equações ao longo de um volume de controle que contenha somente sólido ou somente líquido é realizada da maneira usual, conforme já explorado em capítulos anteriores, não sendo por esta razão aqui descrita.

Concentrando agora a discussão num volume de controle que contenha a interface sólido-líquido, denominado volume interfacial, existem dois procedimentos distintos para a abordagem do problema.

No primeiro deles escolhe-se um incremento de tempo adequado  $\Delta t$ , calculando a seguir o avanço da interface a cada incremento. Este procedimento é ilustrado na figura 6.5.

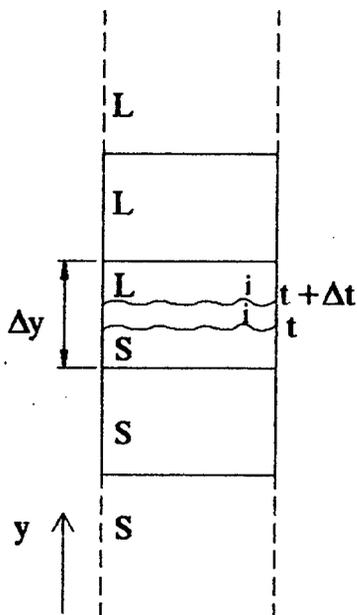


Fig. 6.5 Solidificação de uma fração do volume de controle a ser determinada, para um dado  $\Delta t$

No segundo, contrariamente, uma vez escolhida a malha para a solução do problema, passa-se a calcular o incremento de tempo necessário para a solidificação completa do volume de controle que contém a interface. A figura 6.6 mostra este procedimento.

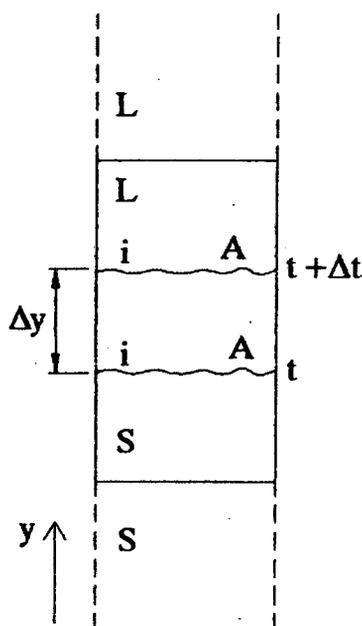


Fig. 6.6 Solidificação completa de um volume de controle num intervalo de tempo a ser calculado

O primeiro procedimento foi implementado e testado ao longo do desenvolvimento desta tese. Entretanto ele não foi adotado em função de problemas associados à eficiência numérica do esquema. A necessidade de resolver as frações sólida e líquida dentro do volume bifásico retarda significativamente a convergência, que tem que ser alcançada a cada incremento de tempo. Considerando que os incrementos de tempo precisam ser pequenos, especialmente nos momentos finais da solidificação de cada volume bifásico, o tempo computacional exigido para uma solução completa é bastante alto.

O segundo procedimento foi o adotado, e juntamente com a metodologia proposta resultou em tempos computacionais relativamente pequenos.

A fim de não incorrer no fato gerador do excessivo

tempo computacional do primeiro procedimento, calcula-se aqui os valores das variáveis junto à interface, prescrevendo-os em seguida para todo o volume interfacial. Para fins de cálculo, a interface é assumida então como estando, ao longo do intervalo de tempo  $\Delta t$ , estacionada no centro do volume bifásico conforme ilustra a figura 6.7. Nesta figura pode-se observar a decomposição do domínio nas partes sólida e líquida, assim como a relação de cada fase com a interface.

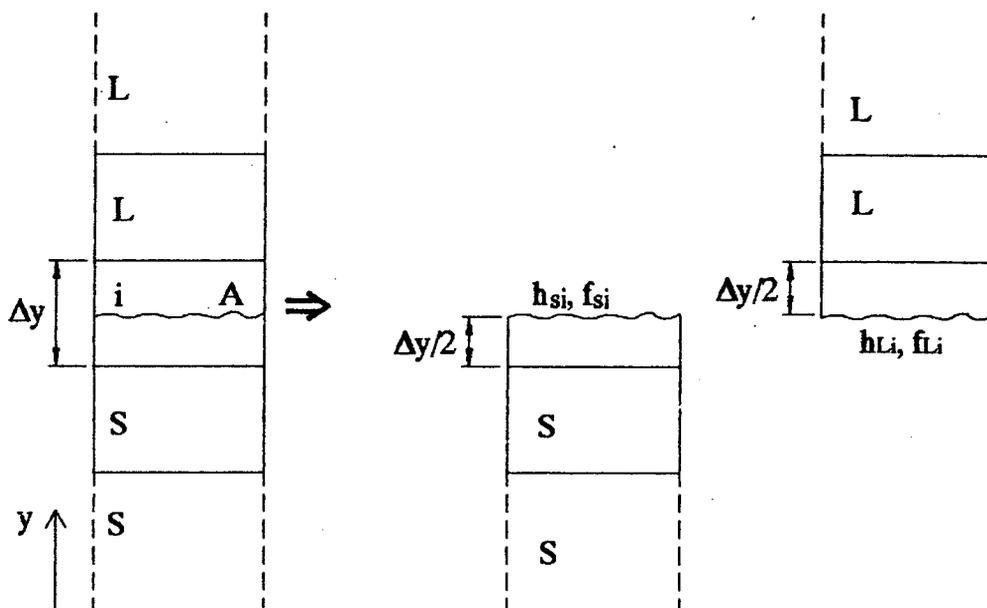


Fig. 6.7 Decomposição do domínio em cada fase e relação com a interface

Uma vez calculada a concentração do líquido junto à interface,  $f_{li}$ , tira-se através do diagrama de equilíbrio de fases a sua entalpia,  $h_{li}$ . Note-se que da definição de  $K_F$ , eq. (5.84),  $f_{si} = K_F f_{li}$ , e da eq. (6.7),  $h_{si} = h_{li} - h_f$ .

Do exposto até aqui conclui-se que as duas variáveis fundamentais a serem buscadas ao marchar-se no tempo são  $f_{li}$  e  $\Delta t$ . Isto é feito a seguir, através dos balanços de calor, eq. (6.10), e massa, eq. (6.19), na interface. Note-se que a utilização de um intervalo de tempo variável, calculado a cada instante, é uma das contribuições do modelo proposto.

O balanço de calor na interface, já integrado no tempo

e também ao longo de um volume interfacial, conforme mostrado na figura 6.8, e assumindo que  $\rho_s = \rho_l = \rho$ , pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \frac{\rho \text{ Vol}}{\Delta t} \left[ \left( h_l^t - h_{li} \right) + h_f + \left( h_{si} - h_s \right) \right] + H_{il} \left( h_{lN} - h_{li} \right) = \\ = H_{ts} \left( h_{si} - h_{ss} \right) \quad [W] \quad (6.26) \end{aligned}$$

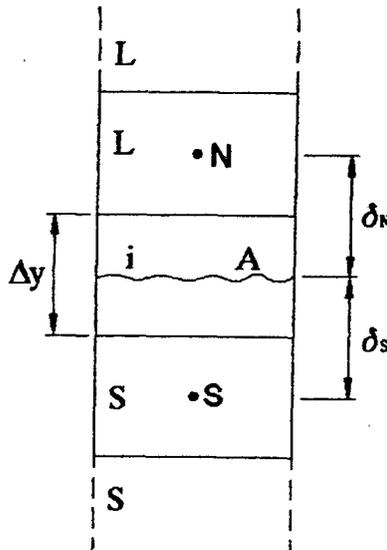


Fig. 6.8 Volume de controle interfacial

onde Vol é o volume do volume de controle interfacial e

$$H_{il} = \frac{k_l A}{c_l \delta_N} \quad [Kg/s] \quad (6.27)$$

$$H_{ts} = \frac{k_s A}{c_s \delta_S} \quad [Kg/s] \quad (6.28)$$

O superíndice t refere-se ao tempo correspondente ao início da solidificação do volume de controle interfacial, ou final da solidificação do volume anterior. A ausência de superíndice nas outras entalpias, com exceção de  $h_f$  que independe do tempo, refere-se ao tempo  $t + \Delta t$ . Conforme mencionado, durante o intervalo  $\Delta t$  todo o volume interfacial muda da fase líquida para a sólida.

Pequenos aumentos na área da interface, em função da ocorrência de morfologias celulares, podem ser considerados na área A que consta nos coeficientes  $H_{ll}$  e  $H_{ls}$  da eq. (6.26). Por outro lado os grandes aumentos de área, típicos das morfologias dendríticas, exigem um tratamento específico, uma vez que, dependendo do tamanho podem ocupar mais de um volume de controle.

Considerando que  $h_f = h_{li} - h_{si}$  e rearranjando os termos da eq. (6.26), obtém-se

$$\frac{\rho \text{ Vol}}{\Delta t} \left( h_l^t - h_s \right) + H_{ll} \left( h_{lN} - h_{li} \right) = H_{ls} \left( h_{si} - h_{ss} \right) \quad (6.29)$$

A equação anterior representa a equação de trabalho para o balanço de energia na interface.

O balanço de massa na interface, já integrado no tempo e também ao longo de um volume interfacial, conforme mostrado na figura 6.8 , e assumindo que  $\rho_s = \rho_l = \rho$  , pode ser escrito como segue

$$\begin{aligned} \frac{\rho \text{ Vol}}{\Delta t} \left[ \left( f_l^t - f_{li} \right) + \left( f_{li} - f_{si} \right) + \left( f_{si} - f_s \right) \right] + H_{ml} \left( f_{lN} - f_{li} \right) = \\ = H_{ms} \left( f_{si} - f_{ss} \right) \quad [\text{Kg/s}] \end{aligned} \quad (6.30)$$

onde

$$H_{ml} = \frac{\rho D_l A}{\delta_N} \quad [\text{Kg/s}] \quad (6.31)$$

$$H_{ms} = \frac{\rho D_s A}{\delta_s} \quad [\text{Kg/s}] \quad (6.32)$$

Os comentários já feitos para o balanço de energia quanto aos aumentos de área da interface decorrentes de sua morfologia também são válidos aqui.

Simplificando a eq. (6.30) obtém-se a equação de trabalho para o balanço de soluto na interface

$$\frac{\rho \text{ Vol}}{\Delta t} \left( f_l^t - f_s \right) + H_{ml} \left( f_{lN} - f_{li} \right) = H_{ms} \left( f_{si} - f_{ss} \right) \quad (6.33)$$

Note-se que  $h_s$  e  $f_s$  não estão disponíveis e devem ser obtidos por interpolação. Quando o volume interfacial é um dos volumes localizados no interior da malha, conforme mostra a figura 6.9, tem-se que

$$h_s = FG h_{ss} + (1 - FG) h_{si} \tag{6.34}$$

onde

$$FG = \frac{\Delta y/2}{\Delta y/2 + \delta_s} \tag{6.35}$$

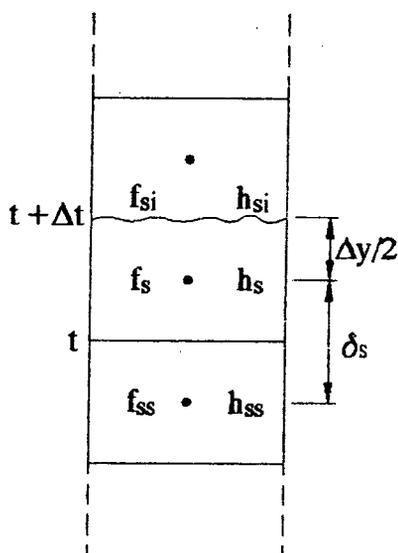


Fig. 6.9 Volume interfacial ocorrendo no interior da malha

Da eq. (6.7) tem-se que

$$h_{si} = h_{li} - h_f \tag{6.36}$$

e do diagrama de fases

$$h_{li} = h_M - (h_M - h_E) \frac{f_{li}}{f_E} \tag{6.37}$$

Substituindo a eq. (6.37) na eq. (6.36) tem-se

$$h_{si} = h_M - h_f - (h_M - h_E) \frac{f_{li}}{f_E} \quad (6.38)$$

Substituindo a eq. (6.38) na eq. (6.34) obtém-se

$$h_s = FG h_{ss} + C_{j1} - C_{j2} f_{li} \quad (6.39)$$

onde  $C_{j1}$  e  $C_{j2}$  são grupos que dependem da localização do volume interfacial na malha, dados por

$$C_{j1} = (1 - FG)(h_M - h_f) \quad (6.40)$$

e

$$C_{j2} = (1 - FG) \frac{(h_M - h_E)}{f_E} \quad (6.41)$$

Interpolando da mesma forma para a concentração, segundo a figura 6.9 ,

$$f_s = FG f_{ss} + (1 - FG) f_{si} \quad (6.42)$$

Da eq. (5.84) tem-se que

$$f_{si} = K_P f_{li} \quad (6.43)$$

Substituindo esta equação na eq. (6.42) e rearranjando,

$$f_s = FG f_{ss} + C_{j3} f_{li} \quad (6.44)$$

onde

$$C_{j3} = K_P (1 - FG) \quad (6.45)$$

No início do processo de solidificação, quando o volume interfacial é o volume junto ao contorno inferior do domínio tem-se, para o problema térmico, a situação mostrada na figura (6.10).

Convertendo as temperaturas em entalpias com base no calor específico do sólido a pressão constante,  $c_s$ , pode-se escrever que

$$c_s \left( \frac{1}{U} + \frac{\Delta y}{2k_s} \right) = \frac{k_s (h_{si} - h_s)}{c_s \frac{\Delta y}{2}} \quad (6.46)$$

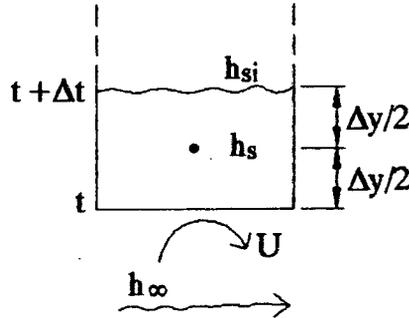


Fig. 6.10 Volume interfacial ocorrendo junto ao contorno inferior : problema térmico

Explicitando  $h_s$  na eq. (6.46) obtém-se

$$h_s = \frac{C_4 + h_{si}}{C_5} \quad (6.47)$$

onde

$$C_4 = \frac{h_\infty \frac{\Delta y}{2}}{\frac{k_s}{U} + \frac{\Delta y}{2}} \quad (6.48)$$

e

$$C_5 = \frac{\frac{\Delta y}{2}}{\frac{k_s}{U} + \frac{\Delta y}{2}} + 1 \quad (6.49)$$

Substituindo  $h_{si}$  dado pela eq. (6.38) na eq. (6.47) e reordenando resulta em

$$h_s = C_6 - C_7 f_{li} \quad (6.50)$$

onde

$$C_6 = \frac{C_4 + h_M - h_f}{C_5} \quad (6.51)$$

e

$$C_7 = \frac{h_M - h_E}{C_5 f_E} \quad (6.52)$$

Para a obtenção de  $f_s$  no início do processo de solidificação interpola-se, conforme a figura 6.11, obtendo

$$f_s = \frac{f_{sp} + f_{si}}{2} \quad (6.53)$$

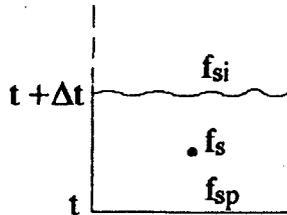


Fig. 6.11 Volume interfacial ocorrendo junto ao contorno inferior : problema mássico

Assumindo que a condição inicial (6.22) seja válida ao longo de  $\Delta t$ , tem-se

$$f_{sp} = K_P f_I \quad (6.54)$$

Esta é uma excelente aproximação, pois além da malha ser feita pequena especialmente junto ao contorno, a difusividade mássica no sólido possui normalmente valores bastante baixos.

Substituindo as equações (6.54) e (6.43) na eq. (6.53) e rearranjando obtém-se

$$f_s = C_B + C_P f_{li} \quad (6.55)$$

onde

$$C_B = \frac{K_P f_I}{2} \quad (6.56)$$

e

$$C_P = \frac{K_P}{2} \quad (6.57)$$

Tendo determinado  $h_s$  e  $f_s$  tanto para um volume genérico no interior da malha, como para um volume bifásico localizado junto ao contorno inferior do domínio, passa-se agora à obtenção das equações para  $f_{li}$  e  $\Delta t$ .

Quando o volume interfacial é um dos volumes localizados no interior da malha, substituindo  $h_e$  dado pela eq. (6.39) no balanço de calor para este volume interfacial, eq. (6.29), e explicitando  $\Delta t$  obtém-se

$$\Delta t = \frac{\rho \text{Vol} \left[ V_1 + C_{j2} f_{li} \right]}{H_{tl} \left[ h_{li} - h_{lN} \right] + H_{te} \left[ h_{ei} - h_{ee} \right]} \quad (6.58)$$

onde  $V_1$  é dado por

$$V_1 = h_l^t - FG h_{ee} - C_{j1} \quad (6.59)$$

Substituindo  $h_{ei}$  dado pela eq. (6.36) na eq. (6.58) ,

$$\Delta t = \frac{\rho \text{Vol} \left[ V_1 + C_{j2} f_{li} \right]}{\left[ H_{tl} + H_{te} \right] h_{li} - V_2} \quad (6.60)$$

onde

$$V_2 = H_{tl} h_{lN} + H_{te} \left( h_f + h_{ee} \right) \quad (6.61)$$

Substituindo  $h_{li}$  dado pela eq. (6.37) na eq. (6.60) e reorganizando obtém-se

$$\Delta t = \frac{\rho \text{Vol} \left[ V_1 + C_{j2} f_{li} \right]}{V_3 - C_{j10} f_{li}} \quad (6.62)$$

onde

$$V_3 = \left( H_{tl} + H_{te} \right) h_M - V_2 \quad (6.63)$$

e

$$C_{j10} = \left( H_{tl} + H_{te} \right) \frac{h_M - h_E}{f_E} \quad (6.64)$$

Substituindo  $f_e$  da eq. (6.42) no balanço de massa na interface, eq. (6.33), e explicitando  $\Delta t$  obtém-se

$$\Delta t = \frac{\rho \text{ Vol } \left[ V_4 + C_{j9} f_{li} \right]}{H_{ml} \left[ f_{li} - f_{lN} \right] + H_{ms} \left[ f_{si} - f_{ss} \right]} \quad (6.65)$$

onde

$$V_4 = f_l^t - FG f_{ss} \quad (6.66)$$

Substituindo  $f_{si}$  da eq. (6.43) na eq. (6.65) e rearranjando,

$$\Delta t = \frac{\rho \text{ Vol } \left[ V_4 + C_{j9} f_{li} \right]}{C_{j11} f_{li} - V_5} \quad (6.67)$$

onde

$$C_{j11} = H_{ml} + K_P H_{ms} \quad (6.68)$$

e

$$V_5 = H_{ml} f_{lN} + H_{ms} f_{ss} \quad (6.69)$$

Igualando as equações (6.62) e (6.67) e reorganizando chega-se à seguinte equação do segundo grau para  $f_{li}$

$$a f_{li}^2 + b f_{li} - c = 0 \quad (6.70)$$

onde

$$a = C_{j2} C_{j11} - C_{j9} C_{j10} \quad (6.71)$$

$$b = C_{j11} V_1 + C_{j9} V_9 + C_{j10} V_4 - C_{j2} V_5 \quad (6.72)$$

$$c = V_9 V_4 + V_1 V_5 \quad (6.73)$$

A solução fisicamente consistente desta equação é dada por

$$f_{li} = \frac{-b + \sqrt{b^2 + 4ac}}{2a} \quad (6.74)$$

Uma vez tendo determinado  $f_{li}$  pela eq. (6.74),  $\Delta t$  pode ser obtido tanto pela eq. (6.62) como pela (6.67).

Passa-se agora a tratar os momentos iniciais da solidificação, quando o volume interfacial ocorre junto ao contorno inferior. O balanço de calor neste caso pode ser

expresso da seguinte forma

$$\frac{\rho \text{ Vol}}{\Delta t} \left[ h_l^t - h_s \right] + H_{ll} \left[ h_{lN} - h_{li} \right] = \frac{C \left( h_{si} - h_{\infty} \right) A}{c_s \left[ \frac{1}{U} + \frac{\Delta y}{k_s} \right]} \quad (6.75)$$

Explicitando  $\Delta t$  na equação anterior tem-se

$$\Delta t = \frac{\rho \text{ Vol} \left[ h_l^t - h_s \right]}{H_{ll} \left[ h_{li} - h_{lN} \right] + C_{12} \left[ h_{si} - h_{\infty} \right]} \quad (6.76)$$

onde

$$C_{12} = \frac{A}{c_s \left[ \frac{1}{U} + \frac{\Delta y}{k_s} \right]} \quad (6.77)$$

Substituindo  $h_s$  dado pela eq. (6.50) na eq. (6.76) resulta em

$$\Delta t = \frac{\rho \text{ Vol} \left[ C_{j1s} + C_7 f_{li} \right]}{V_{\sigma}} \quad (6.78)$$

onde

$$C_{j1s} = h_l^t - C_{\sigma} \quad (6.79)$$

e

$$V_{\sigma} = H_{ll} \left[ h_{li} - h_{lN} \right] + C_{12} \left[ h_{si} - h_{\infty} \right] \quad (6.80)$$

Aplicando a condição de impermeabilidade na base do domínio tem-se, para o balanço de massa, que

$$\frac{\rho \text{ Vol}}{\Delta t} \left[ f_l^t - f_s \right] + H_{ml} \left[ f_{lN} - f_{li} \right] = 0 \quad (6.81)$$

Substituindo na equação anterior  $f_s$  dado pela eq. (6.55) e explicitando  $\Delta t$  obtém-se

$$\Delta t = \frac{\rho \text{Vol} \left[ C_{j14} - C_p f_{li} \right]}{V_7 + H_{ml} f_{li}} \quad (6.82)$$

onde

$$C_{j14} = f_l^t - C_B \quad (6.83)$$

e

$$V_7 = - H_{ml} f_{LN} \quad (6.84)$$

Igualando as equações (6.78) e (6.82) e reorganizando chega-se à seguinte equação do segundo grau para  $f_{li}$

$$a f_{li}^2 + b f_{li} - c = 0 \quad (6.85)$$

onde

$$a = H_{ml} C_7 \quad (6.86)$$

$$b = H_{ml} C_{j13} + C_p V_6 + C_7 V_7 \quad (6.87)$$

$$c = C_{j14} V_6 - C_{j13} V_7 \quad (6.88)$$

A solução fisicamente consistente desta equação é dada por

$$f_{li} = \frac{-b + \sqrt{b^2 + 4ac}}{2a} \quad (6.89)$$

Uma vez obtido  $f_{li}$ ,  $\Delta t$  para a solidificação do primeiro volume de líquido pode ser obtido tanto pela eq. (6.78) como pela (6.82).

Quando o volume interfacial for o último volume da malha, ou seja, o volume junto ao contorno superior, todo o soluto contido no líquido deste volume precisa necessariamente ser incorporado ao sólido. Como consequência não mais se pode empregar a eq. (6.43). Para o problema mássico prescreve-se então, conforme a figura 6.12 ,

$$f_{ep} = f_{lp}^t \quad (6.90)$$

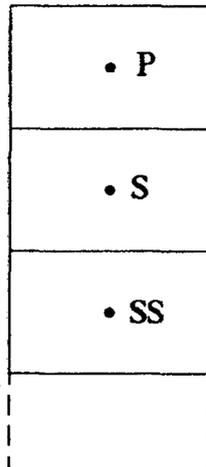


Fig. 6.12 Últimos volumes a solidificarem

Para o problema térmico, no lugar de calcular  $f_{li}$  e  $\Delta t$  através dos balanços de calor e massa no volume interfacial, como é feito em todos os outros volumes da malha, são realizadas as seguintes extrapolações

$$f_{lip} = f_{lis} + \Delta f_{li} \quad (6.91)$$

onde

$$\Delta f_{li} = f_{lis} - f_{liss} \quad (6.92)$$

e

$$\Delta t_p = \Delta t_s + \Delta \Delta t \quad (6.93)$$

onde

$$\Delta \Delta t = \Delta t_s - \Delta t_{ss} \quad (6.94)$$

Entenda-se que os termos  $f_{lis}$  e  $f_{liss}$  nas equações acima referem-se às concentrações do líquido junto à interface quando esta encontrava-se nos volumes anteriores ao volume em questão, conforme a nomenclatura especificada na figura 6.12. De forma semelhante, os termos  $\Delta t_s$  e  $\Delta t_{ss}$  referem-se aos respectivos intervalos de tempo que foram necessários para a solidificação destes volumes.

6.4.1 CONCENTRAÇÃO EUTÉTICA ALCANÇADA AO LONGO DA SOLIDIFICAÇÃO

Quando a concentração na interface do lado do líquido,  $f_{li}$ , é diferente da concentração eutética,  $f_E$ , o sólido formado é composto por somente uma fase sólida. Comumente nos diagramas como o mostrado na figura 6.4 esta fase é chamada fase  $\alpha$ , no caso da concentração inicial,  $f_I$ , ser hipoeutética, ou fase  $\beta$  no caso desta ser hipereutética.

Em certos casos entretanto  $f_{li}$  pode alcançar  $f_E$ , conforme mostra a figura 6.13; [Kurz e Fisher, 1986]. Quando isto ocorre o sólido passa a ser composto por duas fases distintas,  $\alpha$  e  $\beta$ . Devido à complexidade do problema, Battle, 1992, em sua extensa revisão sobre modelamento matemático da segregação de soluto na solidificação, afirma que a transferência de massa resultante desta composição de fases nunca foi considerada. Da mesma forma, a possibilidade de mais de uma transformação de fases líquido-sólido carece de modelamento, e sua cinética está longe de ser entendida.

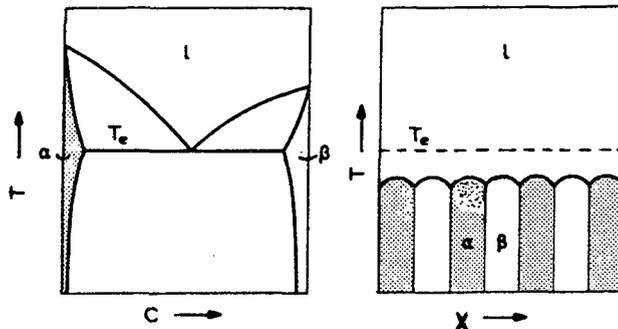


Fig. 6.13 Fases  $\alpha$  e  $\beta$  na solidificação eutética

Usualmente o eutético é considerado como sendo uma única pseudofase, segundo originalmente concebida por Brody e Flemings em 1966.

Um tipo de abordagem semelhante é desenvolvida aqui. Quando  $f_{li}$  atinge o valor eutético  $f_E$ , faz-se  $f_{li} = f_E$ , empregando os balanços de calor e massa na interface para a determinação da concentração média do pseudoeutético na

interface,  $\bar{f}_{si}$ , e também  $\Delta t$ .

Assim, fazendo  $f_{li} = f_E$  na equação da conservação do calor num volume interfacial interior, eq. (6.62), obtém-se

$$\Delta t = \frac{\rho \text{Vol} \left( V_1 + C_{j2} f_E \right)}{V_3 - C_{j10} f_E} \quad (6.95)$$

A partir do balanço de massa no volume interfacial, eq. (6.33), aplicando a interpolação para  $f_s$  dada pela eq. (6.42), fazendo também  $f_{li} = f_E$ , e explicitando  $\Delta t$ , obtém-se

$$\Delta t = \frac{\rho \text{Vol} \left( V_3 - C_{j15} \bar{f}_{si} \right)}{V_p - H_{ms} \bar{f}_{si}} \quad (6.96)$$

onde

$$C_{j15} = 1 - FG \quad (6.97)$$

$$V_3 = f_l^t - FG f_{ss} \quad (6.98)$$

e

$$V_p = H_{ml} (f_E - f_{lN}) - H_{ms} f_{ss} \quad (6.99)$$

Igualando as equações (6.95) e (6.96) obtém-se a seguinte expressão para  $\bar{f}_{si}$

$$\bar{f}_{si} = \frac{V_3 - V_p V_{10}}{H_{ms} V_{10} + C_{j15}} \quad (6.100)$$

onde

$$V_{10} = \frac{V_1 + C_{j2} f_E}{V_3 - C_{j10} f_E} \quad (6.101)$$

Note-se que o diagrama de fases mostrado na figura 6.13 informa as concentrações do sólido nas interfaces líquido-sólido  $\alpha$ , aqui denominada  $f_{sia}$ , e líquido-sólido  $\beta$ ,  $f_{si\beta}$ , quando  $f_{li} = f_E$ . Assim, pode-se afirmar que

$$\bar{f}_{si} = X_\alpha f_{sia} + X_\beta f_{si\beta} \quad (6.102)$$

onde  $X_\alpha$  e  $X_\beta$  são respectivamente as frações de concentração de sólido  $\alpha$  e  $\beta$  na interface.

Adicionalmente tem-se que

$$X_\alpha + X_\beta = 1 \quad (6.103)$$

Combinando as equações (6.102) e (6.103) tira-se finalmente as frações de sólido  $\alpha$  e  $\beta$ , dadas por

$$X_\alpha = \frac{f_{si\beta} - \bar{f}_{si}}{f_{si\beta} - f_{si\alpha}} \quad (6.104)$$

e

$$X_\beta = 1 - X_\alpha \quad (6.105)$$

Neste ponto a formulação está concluída e a seguir são apresentados os diversos passos que constituem o algoritmo de solução do problema.

6.4.2 ALGORITMO DE SOLUÇÃO

O modelo matemático descrito até aqui constitui-se de quatro equações diferenciais, uma de transferência de calor e uma de transferência de massa para cada fase, além das equações de balanço de calor e massa na interface. Tem-se portanto um sistema de seis equações acopladas a ser resolvido.

Para a solução das equações diferenciais de transporte é empregado o código computacional desenvolvido por Patankar [Prata, 1991], sendo a ele agregadas algumas rotinas desenvolvidas para o caso específico deste problema.

Para as equações de balanço na interface a solução é aquela apresentada anteriormente.

A solução do sistema de equações é então realizada iterativamente, segundo o seguinte algoritmo :

1. Especificação das propriedades físicas da liga, do tamanho do domínio de cálculo e das condições inicial e de contorno.
2. Cálculo dos grupos do tipo  $C_{xx}$  ( $C_4, C_5, C_6, C_7, C_8, C_9, C_{12}$ ) segundo as especificações do passo 1, ou seja, os grupos que não dependem da posição e do tempo.
3. Arbitragem de  $f_{li}$  e  $\Delta t$  para o primeiro volume da malha a solidificar (volume da base).
4. Cálculo dos coeficientes  $H_{tl}, H_{to}, H_{ml}, H_{mo}$  e dos grupos do tipo  $C_{jxx}$  ( $C_{j1}, C_{j2}, C_{j3}, C_{j10}, C_{j11}, C_{j12}, C_{j14}, C_{j15}$ ) ou seja, aqueles que dependem da posição do volume interfacial na malha.
5. Cálculo dos grupos do tipo  $V_{xx}$  ( $V_1, V_2, \dots, V_9, V_{10}$ ), ou seja, aqueles que variam com cada iteração, por dependerem dos campos de entalpia e de concentração ainda não convergidos.

6. Cálculo de  $f_{li}$  e  $\Delta t$ , observando as peculiaridades inerentes à posição do volume interfacial em questão (volume localizado no interior da malha ou junto à fronteira inferior). Se a solidificação alcançar o eutético ao longo do processo, calcula-se  $\bar{f}_{si}$  e  $\Delta t$ .
7. Cálculo de  $h_{li}$  e  $h_{si}$  para a prescrição no volume interfacial na solução do problema térmico. Cálculo de  $f_{si}$  que, juntamente com  $f_{li}$  é prescrito no volume interfacial na solução do problema mássico. Se a solidificação ocorrer no eutético, o problema térmico é resolvido da mesma forma, mas no mássico são prescritos  $f_E$  e  $\bar{f}_{si}$  no volume interfacial.
8. Cálculo dos valores de  $h_s$  e  $f_s$  no volume interfacial, segundo as interpolações realizadas e já empregadas implicitamente nos cálculos do passo 6 deste algoritmo.
9. Resolução das equações de transporte para  $h_s$ ,  $h_l$ ,  $f_s$  e  $f_l$ . Atenção especial deve ser dispensada quando o volume interfacial for o último da malha, conforme descrito no texto.
10. Teste da convergência, retornando ao passo 5 iterativamente enquanto esta não for alcançada.
11. Alcançada a convergência, avanço do volume interfacial para o próximo volume da malha, avanço no tempo e retorno ao passo 4, até que ocorra a solidificação total do domínio.

## 7 SOLIDIFICAÇÃO UNIDIRECIONAL DE LIGAS METÁLICAS

### 7.1 INTRODUÇÃO

Um dos principais interesses nos processos de solidificação de ligas binárias reside no conhecimento da distribuição final de soluto, ou elemento de liga, ao longo da peça. A solidificação direcional de ligas binárias na ausência de convecção na fase líquida gera comumente um perfil de concentração bastante característico [Flemings ; 1974 , Battle ; 1992]. Este perfil é mostrado na figura 7.1. Ao explorar tal figura o leitor deve ter em mente o diagrama de equilíbrio de fases apresentado na figura 6.4, cuja região de interesse é reapresentada na figura 7.2. São claramente identificáveis três

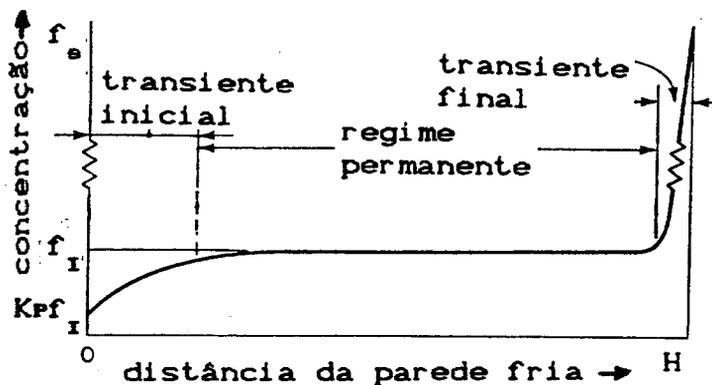


Fig. 7.1 Desenho esquemático da distribuição final de soluto no sólido

regiões. Na primeira delas, denominada transiente inicial, a concentração de soluto assume, junto à parede do molde, o valor aproximado de  $Kpf_I$  e aumenta até alcançar um patamar com o valor de  $f_I$ , ou seja, a concentração inicial da liga. A segunda região é constituída por este patamar, sendo denominada região de regime permanente. Nos instantes finais da solidificação é

forçosamente agregado ao sólido todo o soluto excedente do transiente inicial, a fim de que seja conservada a massa total de soluto da peça. Esta terceira região é denominada transiente final.

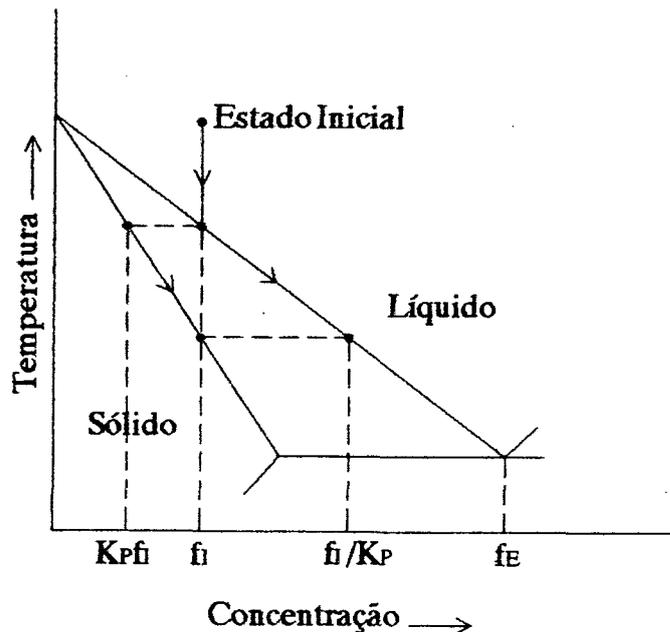


Fig. 7.2 Concentrações na interface sólido-líquido ao longo das regiões de transiente inicial e regime permanente

Conforme pode ser verificado no diagrama de equilíbrio de fases mostrado na figura 7.2, a concentração do primeiro sólido que surge junto ao molde é necessariamente igual a  $Kpf_I$ . Com o passar do tempo a difusão de soluto, decorrente dos grandes gradientes de concentração existentes nessa região, deveria causar um aumento desta concentração. Entretanto a difusividade mássica no sólido é comumente, nas ligas metálicas, da ordem de  $10^4$  vezes menor do que no líquido. Também a escala de tempo em que ocorre a solidificação é relativamente pequena. Estes dois motivos são suficientes para afirmar-se que a concentração no início da peça permanece com o valor de  $Kpf_I$  após concluída a solidificação. Observe-se que o modelo matemático desenvolvido nesta tese, em função de seu equacionamento formal da interface

visando maior generalidade, considera a difusão de soluto através do sólido, de forma que a distribuição esquemática da figura 7.1 é obtida sem aproximações.

A figura 7.3 mostra uma curva deste tipo obtida pelo presente modelo, e que confirma o padrão discutido anteriormente. Nesta figura a concentração do sólido,  $f_s$ , é adimensionalizada com base na concentração inicial da liga,  $f_I$ , enquanto que a dimensão  $y$  é adimensionalizada com base em  $H$ , a altura total do domínio.

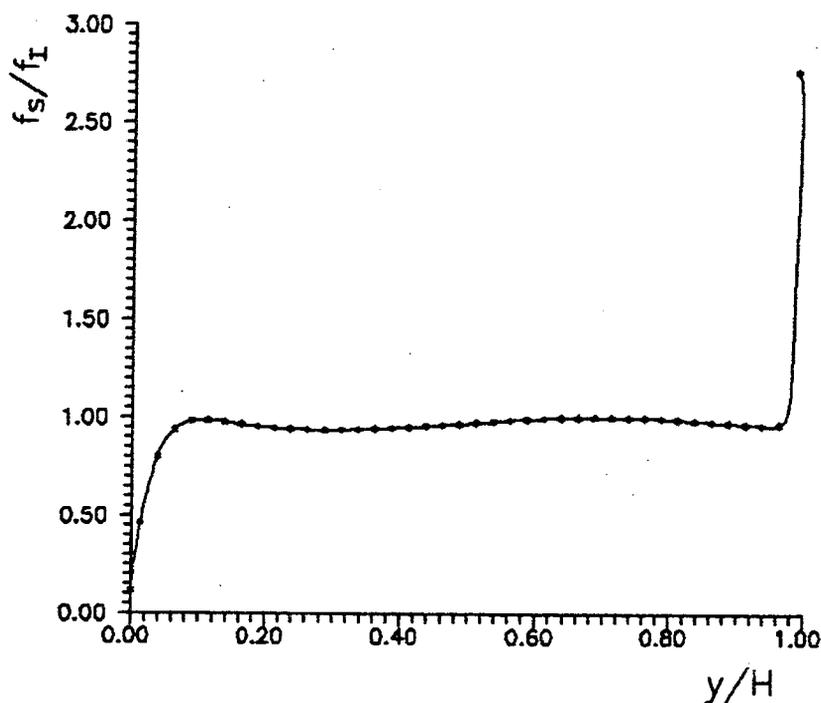


Fig. 7.3 Curva típica de distribuição final do soluto no sólido, gerada pelo presente modelo

Quando o processo de solidificação ainda está em curso tem-se curvas típicas de entalpia e concentração que são mostradas na figura 7.4. Note-se as descontinuidades na entalpia e concentração do soluto na frente de solidificação  $\delta(t)$ .

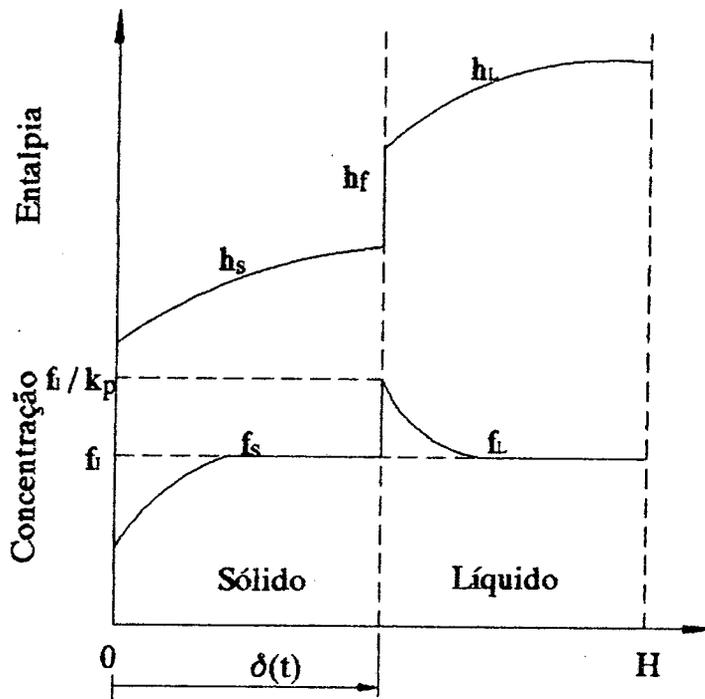


Fig. 7.4 Curvas típicas de entalpia e concentração em um certo instante de tempo  $t$  ao longo do processo de solidificação

## 7.2 VALIDAÇÃO DA METODOLOGIA DESENVOLVIDA NESTE TRABALHO

Com o objetivo de validar a metodologia descrita no capítulo 6, os problemas térmico e mássico são agora temporariamente desacoplados. É então simulada a solidificação de chumbo puro nas condições descritas por Garcia e Prates, 1978. Os resultados são comparados com os dados de experimentos realizados por estes autores. Note-se que embora neste caso somente o problema térmico esteja presente, por tratar-se de uma substância pura, esta comparação com dados experimentais tem força de validação no que toca à metodologia de solução das equações de difusão, tanto no sólido como no líquido.

As condições do experimento, bem como as propriedades físicas adotadas, estão descritas no trabalho de Garcia e Prates.

Cabe apenas informar aqui os dados adotados para a presente simulação e que não constam no artigo em questão. A temperatura da água de refrigeração do solidificador direcional é assumida como sendo de 20 °C, enquanto que a altura H do domínio é tomada como sendo de 11,25 cm, ou seja, adota-se a escala da figura mostrada no artigo. Os resultados são mostrados na figura 7.5.

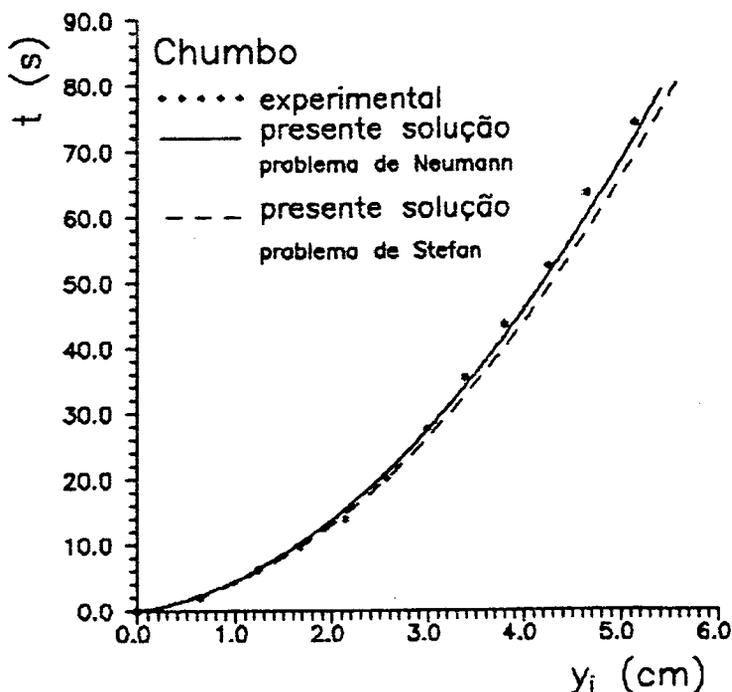


Fig. 7.5 Comparação das presentes soluções com os resultados experimentais de Garcia e Prates, 1978.

Os autores informam neste artigo que a temperatura inicial do chumbo no experimento era de 5 °C acima da sua temperatura de mudança de fase, tratando-se portanto de um problema de Neumann. A figura 7.5 mostra as simulações tanto do problema real, como de uma simplificação ao considerar-se que o superaquecimento inicial é nulo, recaindo assim em um problema de Stefan. Conforme o esperado, a velocidade da interface no problema de Neumann é um pouco menor do que a do problema de Stefan, já que neste caso é necessário desuperaquecer o líquido.

## 7.3 COMPARAÇÃO COM A SOLUÇÃO DE SMITH, TILLER E RUTTER

Uma solução analítica clássica para o problema em questão é a de Smith et al., 1955. Naquele trabalho, a fim de tornar viável uma solução analítica para o problema mássico, o problema térmico deixou de ser resolvido. É então assumido que a interface move-se com velocidade constante e prescrita. O problema mássico é resolvido com duas simplificações, comentadas a seguir. Na primeira delas a difusividade mássica no sólido é considerada nula. Esta simplificação, pelos motivos já comentados na seção 7.1, é bastante boa. Na segunda é assumido que o domínio de solução é semi-infinito, ou seja,  $f_l = f_I$  para  $y \rightarrow \infty$ . Usualmente esta simplificação também não causa imprecisão nos resultados para as regiões do transiente inicial e regime permanente. Naturalmente a região do transiente final exige um tratamento específico.

Conclui-se dos comentários anteriores que a solução de Smith et al., a menos da velocidade constante prescrita para a interface, pode ser usada para a verificação do modelo desenvolvido nesta tese.

A solução de Smith et al. para o transiente inicial é dada por

$$\frac{f_a}{f_I} = \frac{1}{2} \left[ 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{\sqrt{Vy_i/D_l}}{2} \right) + (2K_p - 1) e^{-(K_p(1 - K_p) Vy_i/D_l)} \operatorname{erfc} \left( \frac{(2K_p - 1)}{2} \sqrt{Vy_i/D_l} \right) \right] \quad (7.1)$$

onde  $V$  é a velocidade de avanço da interface,  $y_i$  a sua posição e  $D_l$  é a difusividade de soluto no líquido. Note-se que nesta expressão figuram apenas três grupos adimensionais,  $f_a/f_I$ ,  $K_p$  e  $Vy_i/D_l$ .

Na figura 7.6 são comparadas para o transiente inicial as soluções obtidas a partir do modelo desenvolvido nesta tese com as de Smith et al., para três valores de  $K_p$ . No presente modelo além do problema mássico para ambas as fases, resolve-se

também o problema térmico, dando lugar ao surgimento de novos grupos adimensionais. Para as comparações mostradas na figura 7.6 as variáveis do presente modelo, não utilizadas na eq. (7.1), ou seja,  $c_s$ ,  $c_l$ ,  $k_s$ ,  $k_l$ ,  $h_f$ ,  $T_M$ ,  $T_E$  e  $D_s$  são as da liga Pb-Sn (tabela 7.1), com  $T_I = 330^\circ\text{C}$ ,  $T_\infty = 20^\circ\text{C}$ ,  $U = 5000 \text{ W/m}^2\text{K}$ ,  $H = 1 \text{ cm}$ ,  $f_E = 1,0$  e  $k_p = f_I$ . O ajuste entre os dois modelos mostrado na figura 7.6 foi obtido ao adotar-se  $D_L = 3 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ . A fim de explorar os erros associados à solução de Smith et al. devido à hipótese de velocidade constante prescrita para a interface, a figura 7.7 foi preparada. O eixo horizontal desta figura é o mesmo da figura 7.6. No eixo vertical tem-se a velocidade adimensionalizada utilizando a altura  $H$  e a difusividade térmica do sólido  $\alpha_s$ . Das figuras 7.6 e 7.7 conclui-se que para  $K_p = 0,1$  e as demais variáveis adotadas no presente modelo a velocidade varia realmente pouco ao longo do transiente inicial e início do regime permanente. Para  $K_p = 0,01$  a velocidade já apresenta uma variação bem maior, entretanto a concordância entre as soluções continua boa até aproximadamente a metade do transiente inicial.

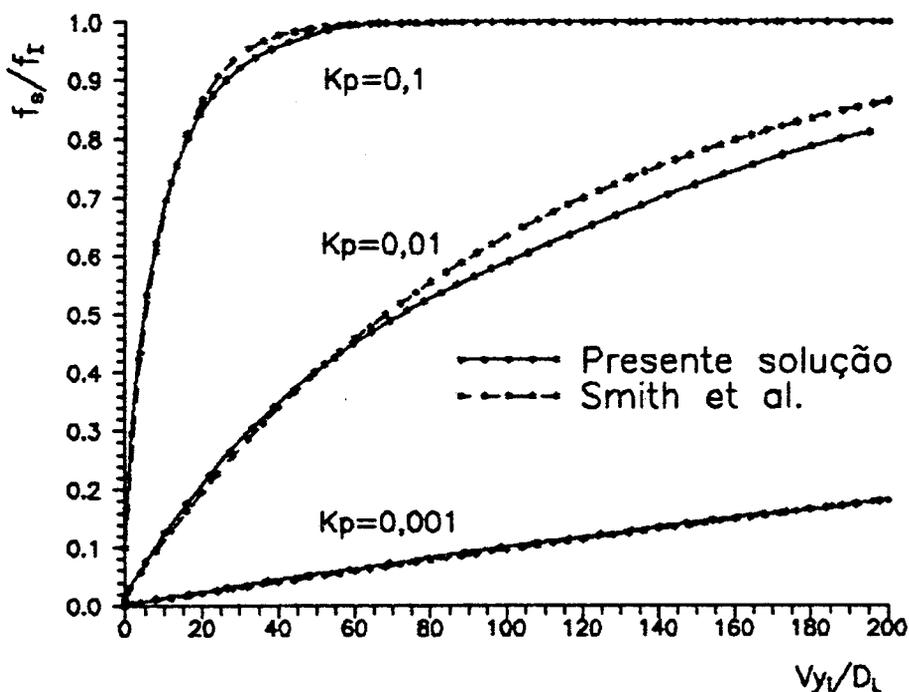


Fig. 7.6 Comparação do modelo desenvolvido nesta tese com o de Smith et al.

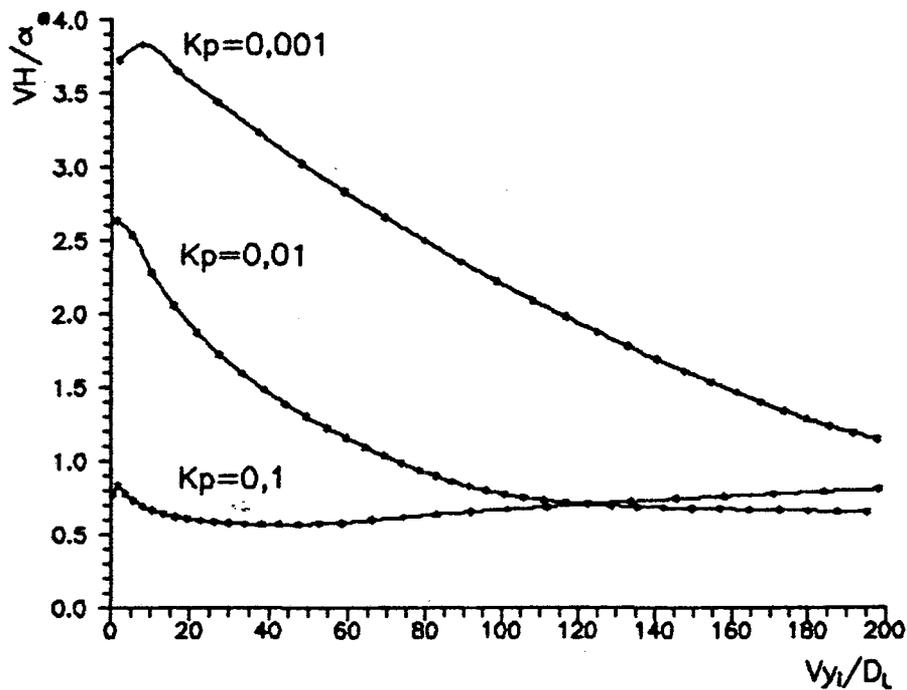


Fig. 7.7 Velocidade de avanço da interface no presente modelo

Para  $K_p = 0,001$  a variação da velocidade é ainda maior, entretanto a concordância é excelente ao longo do intervalo apresentado na figura. Quanto menor o  $K_p$ , mais extensa é a região de transiente inicial. Para  $K_p = 0,001$  o regime permanente nem mesmo é alcançado ao longo deste domínio.

Novos ajustes nas variáveis do problema térmico, como por exemplo o decréscimo do coeficiente de troca  $U$ , poderiam deslocar levemente estas curvas para a esquerda. Este procedimento entretanto não traria contribuição para esta discussão, que tem por objetivo mostrar que o presente modelo gera resultados compatíveis com o que é conhecido até o presente momento sobre o fenômeno que está sendo investigado.

## 7.4 SOLIDIFICAÇÃO DE ALGUMAS LIGAS USUAIS

Nesta seção simula-se a solidificação das ligas chumbo-estanho e alumínio-cobre em diversas situações de superaquecimento inicial, coeficiente de troca de calor,  $U$ , e altura do domínio,  $H$ . A partir destes resultados são comentadas questões tais como tempo necessário para a solidificação total do domínio, a sua composição final e também a velocidade de avanço da interface ao longo da solidificação.

As propriedades físicas destas ligas utilizadas para as simulações são listadas nas tabelas 7.1 e 7.2. Em todas as simulações realizadas, assume-se que o fluido refrigerante que circula pela base do molde está na temperatura ambiente de  $20^{\circ}\text{C}$ .

Primeiramente, a fim de enfocar com clareza as consequências do acoplamento dos problemas térmico e mássico, realiza-se algumas simulações variando o coeficiente de troca de calor  $U$  desde o valor bastante baixo de  $20 \text{ W/m}^2\text{K}$ , até o alto valor de  $50000 \text{ W/m}^2\text{K}$ . Observe-se que para  $U$  baixo a influência do problema térmico é minimizada, ficando a solidificação controlada quase totalmente pelo problema mássico. Contrariamente, para grandes valores de  $U$  o problema térmico passa a ser dominante. A velocidade da frente de solidificação depende tanto do problema térmico como do mássico, conforme pode ser verificado nos balanços de calor e massa na interface sólido-líquido, eqs. (6.10) e (6.19), respectivamente, reproduzidos a seguir,

$$\rho_s h_f \frac{d\delta}{dt} + \frac{k_l}{c_l} \left. \frac{\partial h_l}{\partial y} \right|_{y=\delta} = \frac{k_s}{c_s} \left. \frac{\partial h_s}{\partial y} \right|_{y=\delta} \quad (6.10)$$

$$\rho_s \left[ f_{li} - f_{si} \right] \frac{d\delta}{dt} = - \rho_l D_l \left. \frac{\partial f_l}{\partial y} \right|_{y=\delta} + \rho_s D_s \left. \frac{\partial f_s}{\partial y} \right|_{y=\delta} \quad (6.19)$$

A derivada  $d\delta/dt$  que aparece nas equações anteriores representa a velocidade da frente de solidificação. Desta forma a velocidade de solidificação pode ser escrita como

Tabela 7.1 Propriedades físicas da liga Pb-Sn  
[Felicelli et al., 1991]

Densidade,	$\rho = 10.100 \text{ Kg/m}^3$
Calor específico a pressão constante,	$c_s = 173 \text{ J/KgK}$ $c_l = 161 \text{ J/KgK}$
Condutividade térmica,	$k_s = 19,8 \text{ W/mK}$ $k_l = 16,7 \text{ W/mK}$
Difusividade térmica,	$\alpha_s = 1,13 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ $\alpha_l = 1,03 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
Difusividade mássica,	$D_s = 3 \times 10^{-19} \text{ m}^2/\text{s}$ $D_l = 3 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
Calor latente de fusão,	$h_f = 30.000 \text{ J/Kg}$
Razão de partição entre fases,	$K_p = 0,31$
Concentração eutética,	$f_E = 0,619$
Temperatura eutética,	$T_E = 183^\circ\text{C}$
Temperatura de fusão do chumbo puro,	$T_M = 327,5^\circ\text{C}$

Tabela 7.2 Propriedades físicas da liga Al-Cu  
[Sundarraaj e Voller, 1993]

Densidade,	$\rho = 2.600 \text{ Kg/m}^3$
Calor específico a pressão constante,	$c_s = 766 \text{ J/KgK}$ $c_l = 1179 \text{ J/KgK}$
Condutividade térmica,	$k_s = 77 \text{ W/mK}$ $k_l = 153 \text{ W/mK}$
Difusividade térmica,	$\alpha_s = 3,87 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ $\alpha_l = 4,99 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
Difusividade mássica,	$D_s = 9,73 \times 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$ $D_l = 5 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
Calor latente de fusão,	$h_f = 428.000 \text{ J/Kg}$
Razão de partição entre fases,	$K_p = 0,11826$
Concentração eutética,	$f_E = 0,332$
Temperatura eutética,	$T_E = 548^\circ\text{C}$
Temperatura de fusão do alumínio puro,	$T_M = 660^\circ\text{C}$

$$\frac{d\delta}{dt} = \frac{k_s}{\rho_s h_f} \left[ \left. \frac{\partial T_s}{\partial y} \right|_{y=\delta} - \frac{k_l}{k_s} \left. \frac{\partial T_l}{\partial y} \right|_{y=\delta} \right] \quad (7.2)$$

ou

$$\frac{d\delta}{dt} = \frac{D_l}{(f_{li} - f_{si})} \left[ \frac{D_s}{D_l} \left. \frac{\partial f_s}{\partial y} \right|_{y=\delta} - \frac{\rho_l}{\rho_s} \left. \frac{\partial f_l}{\partial y} \right|_{y=\delta} \right] \quad (7.3)$$

Considerando que para ligas metálicas  $D_s \ll D_l$  e admitindo por simplicidade que a fase líquida está próxima da temperatura de solidificação ( $\partial T_l / \partial y \approx 0$ ) as eqs. (7.2) e (7.3) podem ser simplificadas por, respectivamente,

$$\frac{d\delta}{dt} = \frac{k_s}{\rho_s h_f} \left. \frac{\partial T_s}{\partial y} \right|_{y=\delta} \quad (7.4)$$

$$\frac{d\delta}{dt} = - \frac{\rho_l D_l}{\rho_s (f_{li} - f_{si})} \left. \frac{\partial f_l}{\partial y} \right|_{y=\delta} \quad (7.5)$$

Das eqs. (7.4) e (7.5) fica claro que a velocidade de avanço da interface depende, fundamentalmente, da taxa de resfriamento da peça bem como da redistribuição do soluto na fase líquida.

As figuras 7.8 a 7.10 mostram a velocidade da frente de solidificação ao longo de um domínio de altura  $H = 1$  cm, para a liga chumbo-estanho, com diversos coeficientes de troca de calor  $U$ , partindo de uma temperatura inicial  $T_I = 1,05T_M$  ( $343,9$  °C), onde  $T_M$  representa a temperatura de fusão do chumbo puro ( $327,5$  °C). A fim de acentuar os efeitos que deseja-se mostrar nesta análise, apenas por simplicidade e sem invalidar os resultados, tomou-se a porcentagem de 1 % de estanho na liga Pb-Sn simulada. Estas figuras mostram que no caso do problema térmico dominante ( $U = 50000$  W/m<sup>2</sup>K) a velocidade cai sempre ao longo de toda a solidificação. No outro extremo ( $U = 20$  W/m<sup>2</sup>), quando o problema mássico é dominante, a velocidade aumenta inicialmente para depois estacionar, formando um patamar. Este comportamento pode ser facilmente entendido observando-se a eq. (6.19). As propriedades físicas  $\rho_s$ ,  $\rho_l$ ,  $D_s$  e  $D_l$  são consideradas constantes ao longo do processo. Como  $f_{si} = K_F f_{li}$ , e  $K_F$  também possui um valor constante para cada liga, a diferença  $f_{li} - f_{si}$  que consta

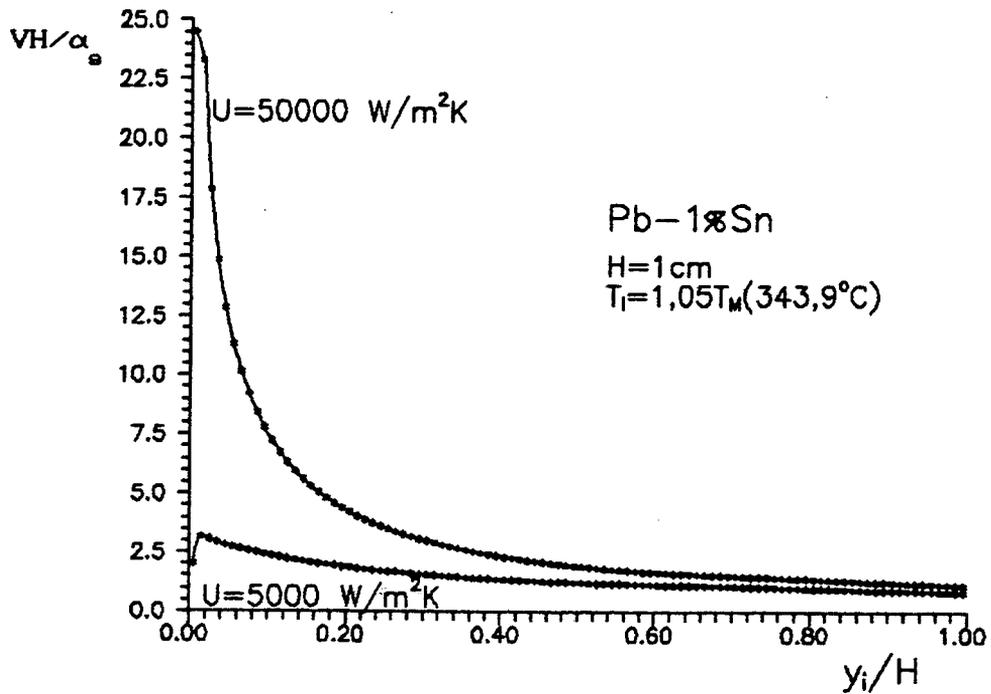


Fig. 7.8 Pb-1%Sn; variação da velocidade da interface ao longo do domínio para dois coeficientes de troca de calor

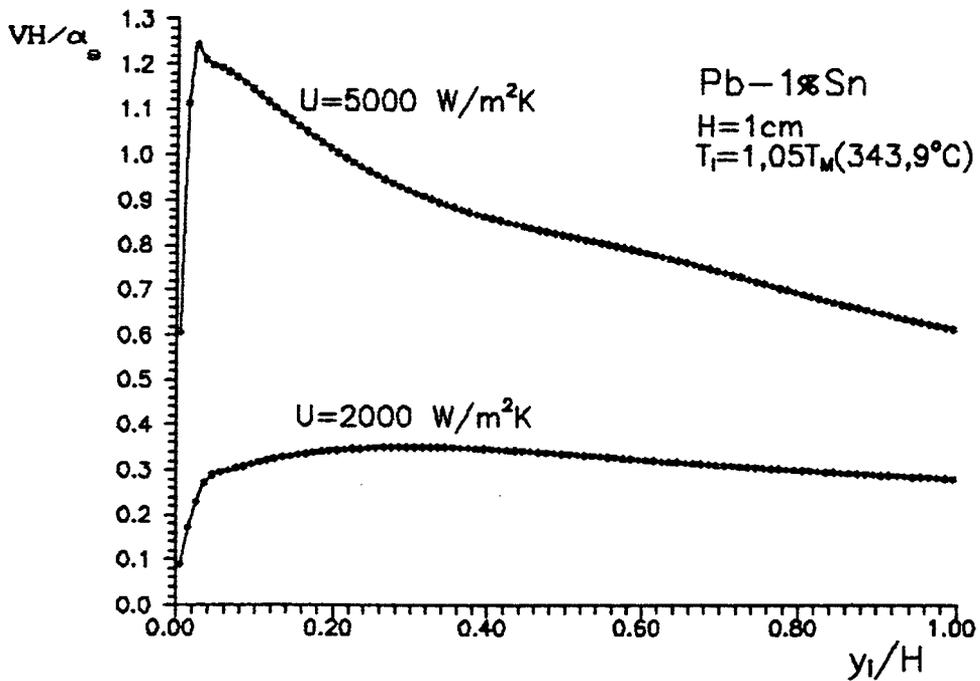


Fig. 7.9 Pb-1%Sn; variação da velocidade da interface ao longo do domínio para dois coeficientes de troca de calor

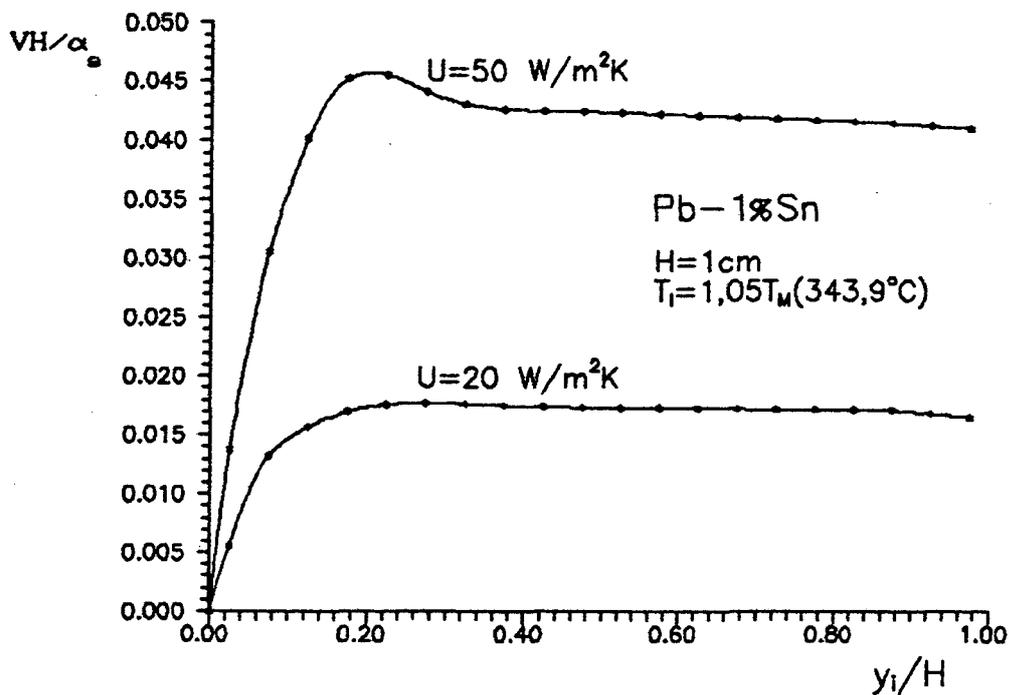


Fig. 7.10 Pb-1%Sn; variação da velocidade da interface ao longo do domínio para dois coeficientes de troca de calor

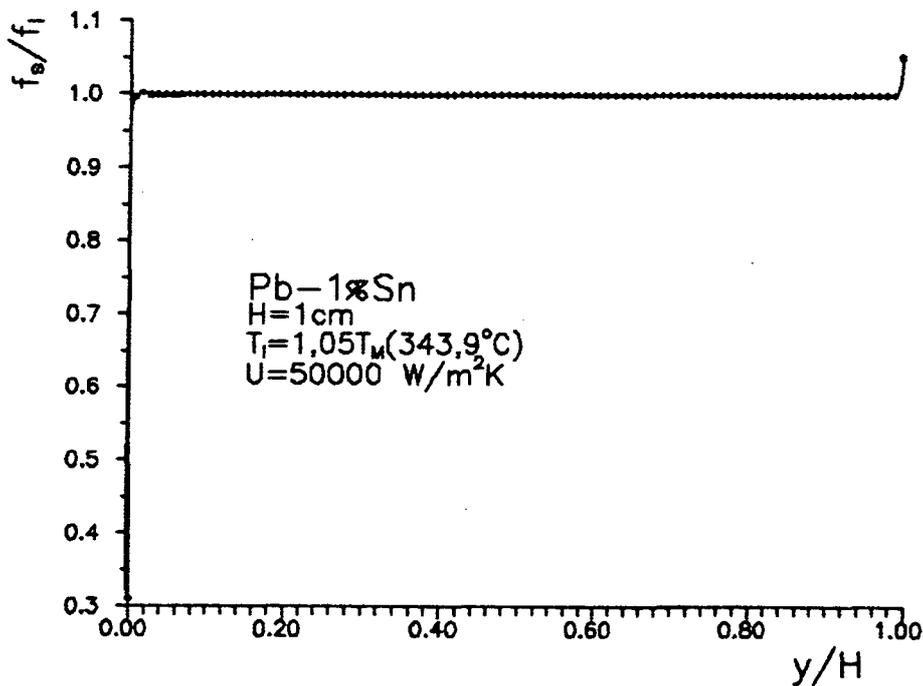


Fig. 7.11 Pb-1%Sn; distribuição final de soluto ao longo do domínio

nesta equação também assume um valor constante ao longo de todo o processo. Uma vez alcançado o regime permanente, também as derivadas  $\partial f_l / \partial y|_{y=\delta}$  e  $\partial f_s / \partial y|_{y=\delta}$  assumem valores constantes, conforme pode ser observado na figura 7.4. Desta forma a velocidade  $d\delta/dt$  tem forçosamente que assumir um valor contante ao longo de toda a região de regime permanente. Quando a parede superior do reservatório começa a interferir na distribuição de soluto ao longo do líquido, a derivada  $\partial f_l / \partial y|_{y=\delta}$  começa a diminuir, causando um progressivo decréscimo na velocidade, que também pode ser observado na figura 7.10, para  $U = 20 \text{ W/m}^2\text{K}$ .

Para as condições especificadas, o problema mássico apresenta uma forte dominância até  $U = 2000 \text{ W/m}^2\text{K}$ . Com  $U = 5000 \text{ W/m}^2\text{K}$  o problema térmico já desempenha um papel importante.

A figura 7.11 mostra a distribuição final de concentração adimensionalizada com base na concentração inicial da liga,  $f_s / f_l$ , em função da posição relativa,  $y/H$ , ao longo do domínio. O grande coeficiente de troca de calor aplicado faz com que o transiente inicial seja muito pequeno, não ocorrendo neste caso o pico de concentração de soluto no final do transiente inicial, observado em outros casos mostrados mais adiante.

A figura 7.12 mostra a evolução da interface sólido-líquido ao longo do tempo no caso da liga Pb-10%Sn, quando solidificada em um domínio de altura  $H = 1 \text{ cm}$ , partindo de uma temperatura inicial  $T_I = 1,2T_M$  ( $393 \text{ }^\circ\text{C}$ ), onde  $T_M$  representa a temperatura de fusão do chumbo puro ( $327,5 \text{ }^\circ\text{C}$ ). Para fins de comparação, esta simulação é realizada com dois coeficientes de troca de calor. Conforme se poderia esperar, o maior coeficiente de troca causa uma maior taxa de retirada de calor do domínio através de sua base, solidificando-o em menor tempo.

Na figura 7.13, com o objetivo de investigar a dependência do tempo de solidificação com o grau de superaquecimento inicial da liga, mostra-se a evolução da interface para quatro temperaturas iniciais. A fim de observar-se o fenômeno com mais clareza, o coeficiente de troca de calor é fixado no valor de  $500 \text{ W/m}^2$ . A temperatura inicial varia desde  $T_{\text{liq}}$ , a temperatura correspondente à linha de líquido no

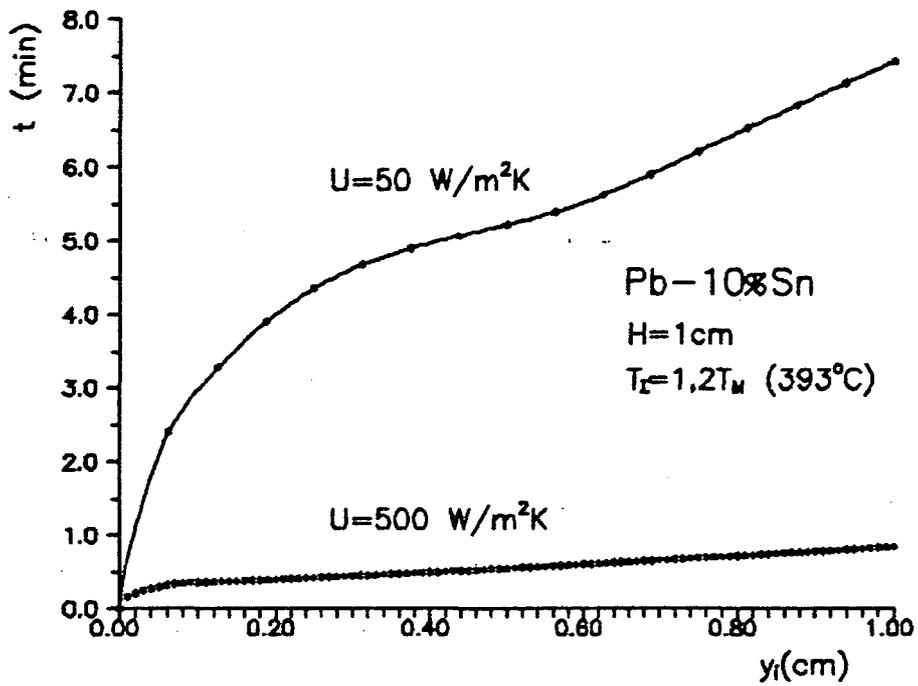


Fig. 7.12 Pb-10%Sn ; evolução da interface ao longo do tempo variando-se o coeficiente de troca de calor

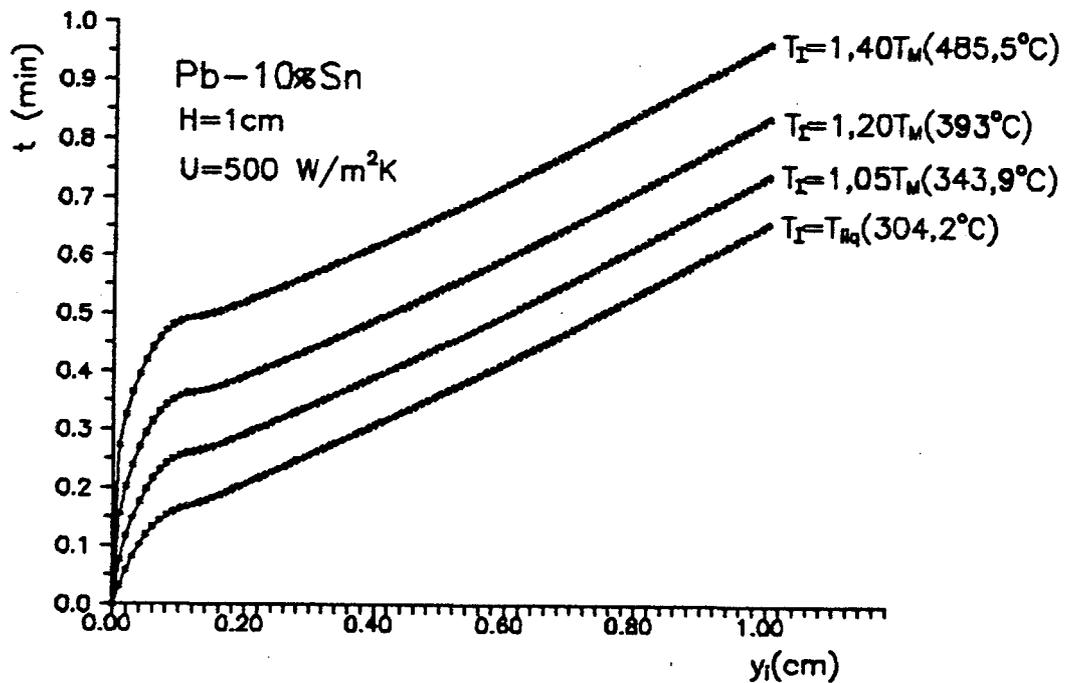


Fig. 7.13 Pb-10%Sn ; evolução da interface ao longo do tempo variando-se o grau de superaquecimento inicial

diagrama de fases, para a concentração inicial de 10% , representando hipoteticamente um superaquecimento nulo, até a temperatura de  $1,4T_M$ . Quanto maior for o grau de superaquecimento mais calor sensível precisa ser removido do líquido, aumentando assim o tempo de solidificação.

As figuras 7.14 e 7.15 mostram curvas de concentração no sólido, adimensionalizadas com base na concentração inicial da liga,  $f_s/f_I$ , em função da posição relativa,  $y/H$ , ao longo do domínio. Na figura 7.14 tem-se a liga Al-2%Cu solidificada em um domínio de 5 cm de altura, com  $T_I = 1,2T_M$ , para dois coeficientes de troca de calor. Observa-se facilmente que a maior taxa de remoção de calor, decorrente do maior coeficiente de troca, reduz de forma significativa o transiente inicial.

Na figura 7.15 tem-se a liga Pb-10%Sn solidificada em um domínio de 1 cm de altura, com  $U = 500 \text{ W/m}^2\text{K}$ , para dois graus de superaquecimento. Observa-se que o maior grau de superaquecimento aumenta o pico de concentração verificado no fim do transiente inicial, pouco influenciando entretanto no comprimento desta região.

O pico de concentração observado no final do transiente inicial faz-se presente, em maior ou menor escala, em todas as simulações realizadas com as ligas chumbo-estanho e alumínio-cobre. A princípio poderia pensar-se que este comportamento deve-se a instabilidades de origem numérica. Testes adicionais foram realizados, tais como um maior refinamento da malha computacional, a adoção de critérios de convergência ainda mais rígidos e alguns rearranjos no algoritmo de solução, não modificando entretanto os resultados. Simulações foram então realizadas com as ligas chumbo-estanho e alumínio-cobre, com todas as propriedades físicas reais, a menos das difusividades mássicas do líquido que foram aumentadas. Este aumento artificial em  $D_l$  causa um acréscimo na extensão dos transientes inicial e final, além do desaparecimento do pico de concentração que está sendo investigado. Aumentos de dez vezes em  $D_l$  são o suficiente para causar o desaparecimento deste pico, em qualquer situação.

Sob o ponto de vista físico, o que ocorre é que o soluto que deixa de ser incorporado ao sólido durante o

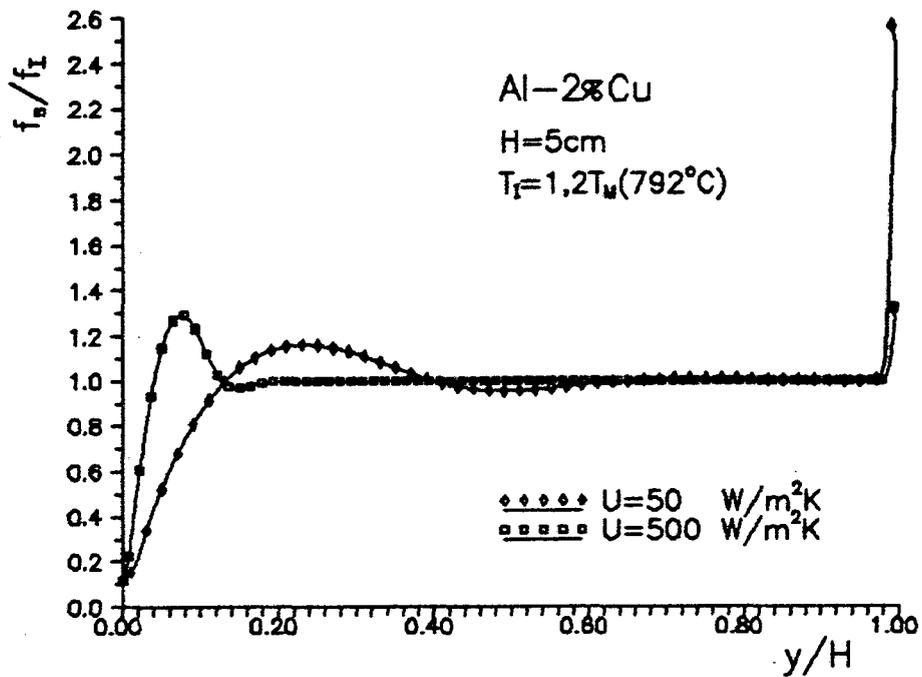


Fig. 7.14 Al-2%Cu ; distribuição final de soluto ao longo do domínio variando-se o coeficiente de troca

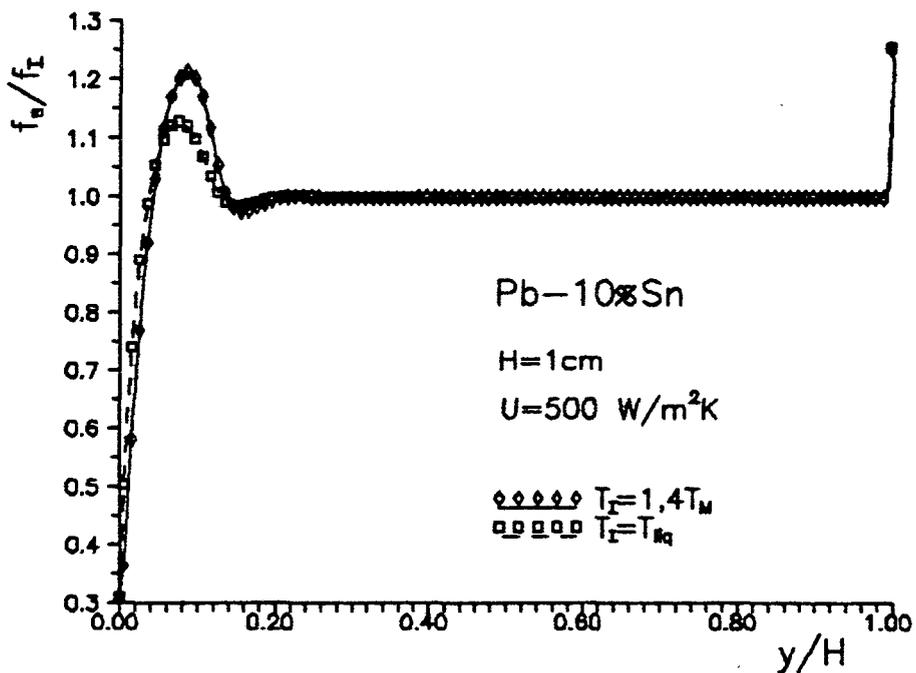


Fig. 7.15 Pb-10%Sn ; distribuição final de soluto ao longo do domínio variando-se o grau de superaquecimento

transiente inicial tem duas possibilidades : é quase totalmente agregado ao sólido no final do transiente inicial, causando o tal pico de concentração, ou é arrastado difusivamente pela interface ao longo de toda a região de regime permanente para ser finalmente agregado ao sólido no transiente final. A primeira possibilidade é a que ocorre na simulação das ligas chumbo-estanho e alumínio-cobre. A segunda ocorre ao aumentar-se  $D_l$ . Este aumento facilita a difusão do soluto através da massa de líquido, que incorpora-se então ao sólido somente no transiente final.

Em situações práticas, o aumento da velocidade de avanço da interface bem como o pico de concentração observado no final do transiente inicial dificilmente podem ser observados, uma vez que se referem a situações fisicamente instáveis. Os casos analisados estão associados à ocorrência de subresfriamento constitucional, ou seja, devido aos altos gradientes de concentração no líquido adjacente à interface de mudança de fase, a temperatura de fusão se torna superior à temperatura da fase líquida. Nestas condições a interface plana é instável e morfologias dendríticas se desenvolvem (ver por exemplo a fig. 3.5 de Kurz e Fisher, 1986). Testar a presente metodologia nestas situações extremas assegura a eficiência da metodologia numérica introduzida.

As figuras 7.16, 7.17 e 7.18 mostram a velocidade de avanço da interface sólido-líquido ao longo do domínio de solidificação. Os casos da figura 7.16 foram simulados com malhas de 50 volumes, os da figura 7.17 com 100 volumes para  $U = 500 \text{ W/m}^2\text{K}$  e 200 volumes para  $U = 5000 \text{ W/m}^2\text{K}$ , e os da figura 7.18 com 100 volumes. Num primeiro momento poder-se-ia imaginar que a maior velocidade de avanço da frente de solidificação ocorresse nos menores valores de  $y_i/H$ , ou seja, mais próximo da fronteira do domínio por onde o calor é retirado. Entretanto isto não ocorre, conforme pode ser observado nestas figuras, porque é justamente nos primeiros instantes da solidificação que o transiente inicial do problema mássico é mais intenso, tendo lugar também a maior parte do superaquecimento do líquido, o que retarda o avanço da interface. As maiores velocidades são

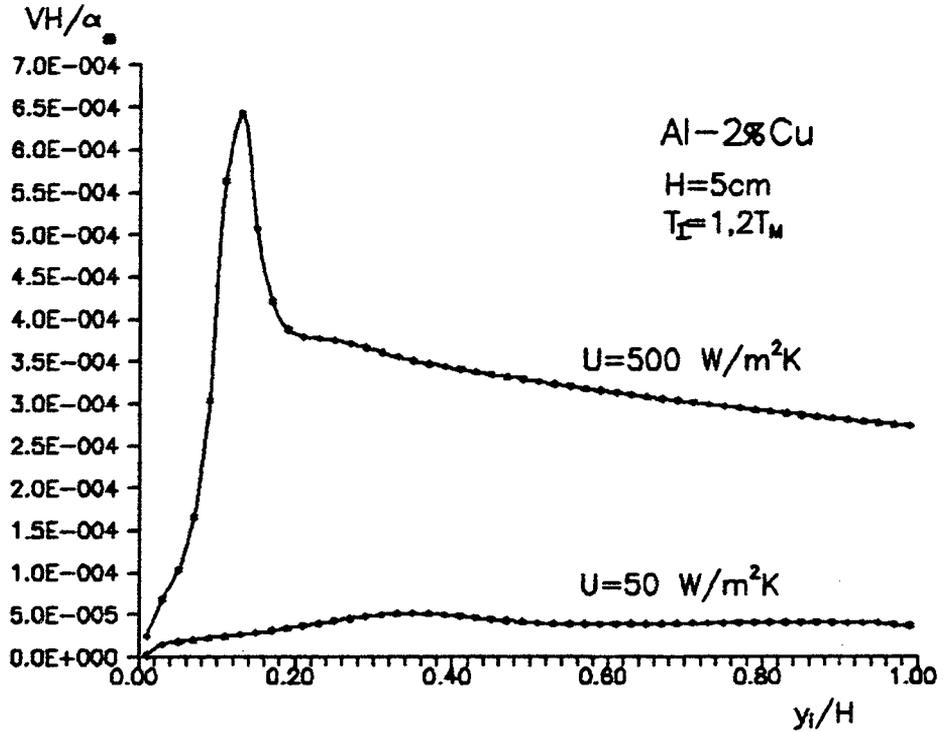


Fig. 7.16 Al-2%Cu; variação da velocidade da interface ao longo do domínio para dois coeficientes de troca de calor

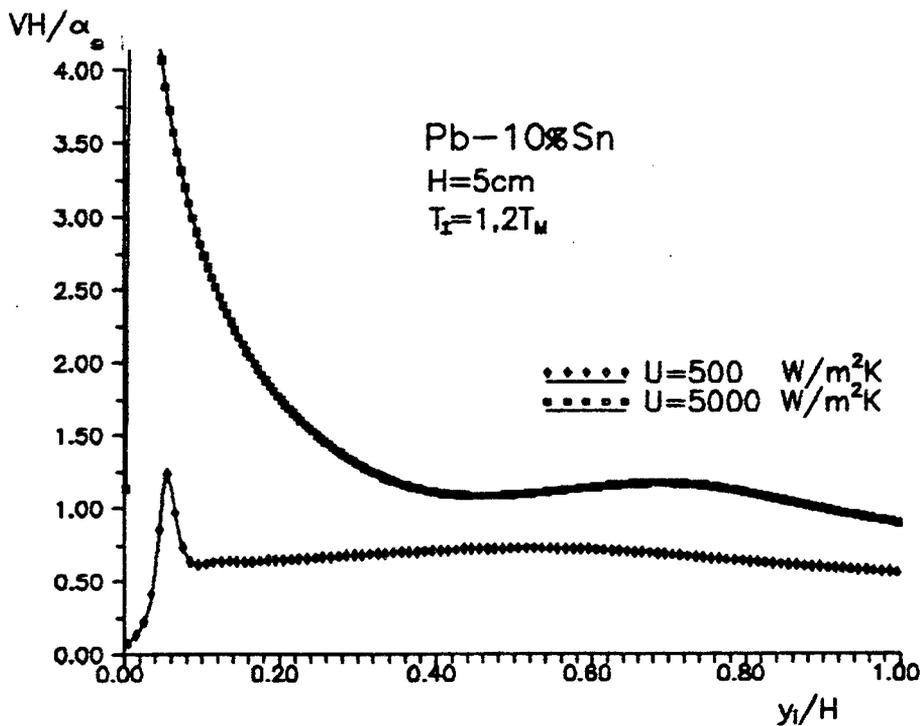


Fig. 7.17 Pb-10%Sn; variação da velocidade da interface ao longo do domínio para dois coeficientes de troca de calor

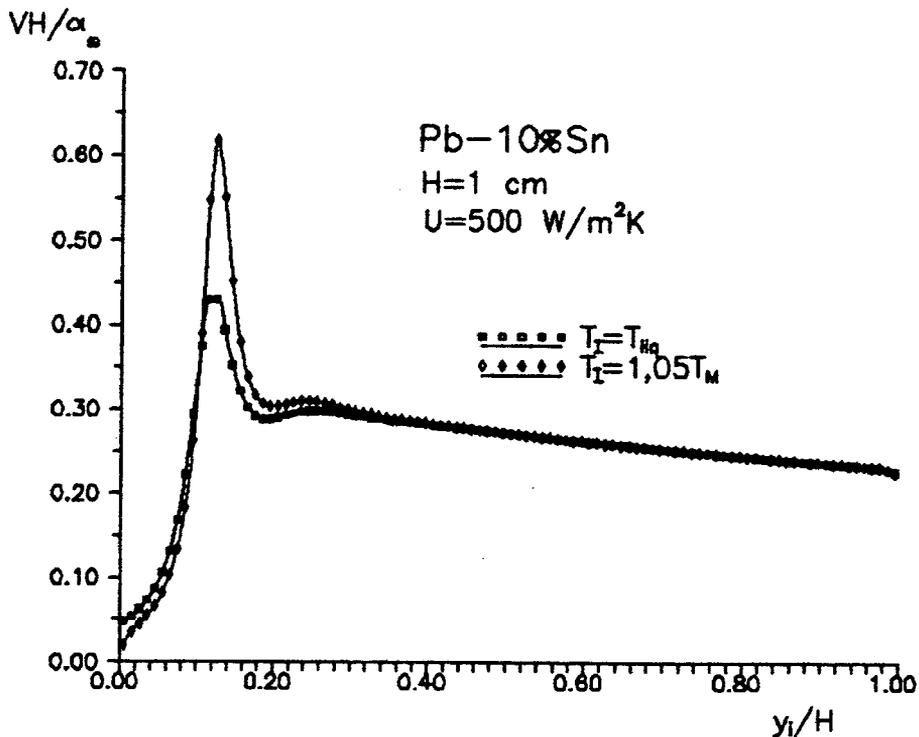


Fig. 7.18 Pb-10%Sn ; variação da velocidade da interface ao longo do domínio para dois graus de superaquecimento

alcançadas logo após estes primeiros instantes, ocorrendo ainda em alguns casos um novo e discreto aumento de velocidade em estágios mais avançados da solidificação.

Nas figuras 7.16 e 7.17 tem-se respectivamente as ligas Al-2%Cu e Pb-10%Sn solidificadas com dois coeficientes de troca diferentes. O maior coeficiente de troca causa, em ambos os casos, um deslocamento das curvas para a esquerda, ou seja, a maior capacidade de remoção do calor faz com que o desaquecimento inicial ocorra em menor tempo. A tendência de um novo e discreto aumento na velocidade após o pico inicial, verificada em ambos os casos para o menor coeficiente de troca, é entretanto de difícil compreensão física.

Na figura 7.18 é solidificada a liga Pb-10%Sn com dois graus de superaquecimento inicial. Conforme o esperado, o maior grau de superaquecimento causa o maior pico de velocidade nos instantes iniciais da solidificação. O deslocamento dos picos para a direita entretanto não são significativos com o aumento do grau de superaquecimento.

Nos casos onde a concentração inicial é maior do que a concentração do sólido na interface líquido-sólido  $\alpha$ , para  $T_s = T_E$ , ou seja,  $f_I > f_{si\alpha}$ , a concentração na interface do lado do líquido alcança a concentração eutética antes de finalizado o transiente inicial. Ocorre então a formação das fases sólida  $\alpha$  e sólida  $\beta$ .

Empregando a formulação para o pseudoeutético, conforme descrita na seção 6.4.1, simulou-se a solidificação da liga Al-8%Cu. Do diagrama de equilíbrio de fases para esta liga [Van Vlack, 1964] tem-se que  $f_{si\alpha} = 0,0565$  e  $f_{si\beta} = 0,525$ , devendo portanto ocorrer a formação das fases sólida  $\alpha$  e sólida  $\beta$ .

A figura 7.19 mostra a evolução das frações de concentração de sólido  $\alpha$ ,  $X_\alpha$ , e sólido  $\beta$ ,  $X_\beta$ , na interface, ao longo do transiente inicial e parte da região de regime permanente. Inicialmente, quando  $f_{li} < f_E$ , todo o sólido formado é da fase  $\alpha$ . Quando a concentração do líquido na interface alcança o eutético começa, de forma abrupta, a formação das duas fases sólidas. Após um pico nas frações de concentração, estas tendem a um valor constante até o final da região de regime permanente.

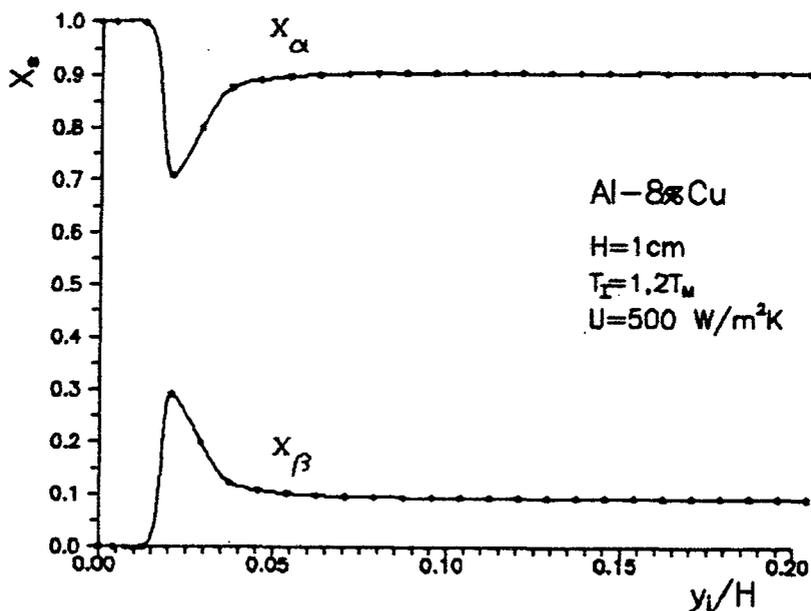


Fig. 7.19 Al-8%Cu ; evolução das frações de concentração de sólido  $\alpha$  e sólido  $\beta$  durante a solidificação

## 7.5 COMENTARIOS FINAIS

Resta finalmente tecer alguns comentários quanto ao procedimento adotado na solução numérica das equações oriundas deste modelo. A colocação do passo de tempo necessário para a solidificação total da massa contida em um volume de controle como uma variável tem implicações diretas na taxa de convergência do algoritmo. Na região de regime permanente, no caso da adoção de uma malha igualmente espaçada, a convergência é obtida de forma relativamente rápida. Isto deve-se ao fato das concentrações e da velocidade de avanço da interface variarem bem menos nesta região, além do calor latente de fusão do material ser uma constante. Conseqüentemente o intervalo de tempo necessário para a solidificação completa de um volume também varia pouco. Por outro lado, a adoção de malhas de tamanho variável resulta numa maior variação do passo de tempo, já que a massa a ser solidificada em cada volume também resulta variável, dificultando desta forma a convergência.

Com excessão das comparações dos resultados gerados por este modelo com os resultados de Smith et al., onde a atenção voltou-se especialmente para o transiente inicial, todos os outros casos foram resolvidos com malhas igualmente espaçadas. Testes foram realizados no sentido de tornar os resultados independentes da malha escolhida. Naturalmente os maiores coeficientes de troca de calor, maiores graus de superaquecimento inicial e maior altura do domínio exigiram um maior número de volumes. Nestes exemplos, os tempos computacionais foram de aproximadamente 5 minutos para malhas de 100 volumes, e 12 minutos para malhas de 200 volumes, no IBM 3090. Mesmo levando-se em conta o fato de ser um modelo unidirecional, estes tempos podem ser considerados baixos, especialmente por tratar-se de um problema transiente onde são resolvidas 4 equações diferenciais, todas acopladas.

## 8 CONCLUSÕES

O presente trabalho procura explorar de uma forma abrangente o problema da transferência de calor e massa na solidificação de ligas binárias, com ênfase nas ligas metálicas. Diversos modelos foram explorados, focalizando diferentes aspectos da modelagem do problema da solidificação. As conclusões referentes aos modelos apresentados encontram-se nas respectivas seções, onde tais modelos foram discutidos.

Neste capítulo a atenção é focalizada nas necessidades futuras associadas à modelagem da transferência de calor e massa em ligas.

No seguimento deste trabalho percebe-se a necessidade da continuidade do ataque ao problema tanto no modelamento e simulação computacional, quanto na parte experimental. Por tratar-se de um fenômeno que exige do investigador da natureza sólidos conhecimentos que vão desde a transferência de calor, massa e quantidade de movimento, passando pela termodinâmica, chegando na solidificação sob o ponto de vista metalúrgico e, ainda, exigindo grande conhecimento e habilidades experimentais e computacionais, é evidente a necessidade de uma abordagem multidisciplinar.

Quanto ao modelamento e simulação computacional, os próximos desafios são o tratamento de interfaces que se apresentam com morfologias complexas, e a adoção de um modelo de instabilidade que possa prever a evolução desta morfologia ao longo do tempo. Posteriormente, e mantendo ainda a idéia dos modelos em duas fases que, contrariamente aos modelos de mistura, permitem uma abordagem mais realista da interface, como o já citado não equilíbrio termodinâmico, seria então o momento de passar para duas dimensões e considerar situações onde a convecção natural na fase líquida desempenha um papel importante.

A visão metalúrgica do problema e a experimentação precisam estar presentes todo o tempo, impulsionando a pesquisa rumo às necessidades mais urgentes e verificando os resultados

obtidos com os modelos.

A experimentação é a hora de perguntar à natureza se ela concorda com o que se está dizendo sobre ela. As verificações experimentais devem inicialmente se concentrar nos modelos unidirecionais, podendo ser feitas, por exemplo, solidificando a liga chumbo-estanho. A posterior metalografia poderá fornecer as curvas de concentração ao longo da peça.

A solidificação direcional de ligas metálicas apresenta o desafio experimental de extrair-se calor através de uma única direção de um corpo a temperaturas bem maiores do que as do ambiente. Neste contexto a liga chumbo-estanho é adequada por suas temperaturas de mudança de fase serem relativamente baixas ( $327,5^{\circ}\text{C}$  para o chumbo puro e  $183^{\circ}\text{C}$  no ponto eutético da liga). A liga alumínio-cobre apresenta maiores dificuldades, já que os seus níveis de temperatura são bem maiores ( $660^{\circ}\text{C}$  para o alumínio puro e  $548^{\circ}\text{C}$  no ponto eutético da liga).

O modelo proposto no capítulo 6 pode também simular a solidificação de soluções aquosas do tipo cloreto de amônia-água e cloreto de sódio-água, com interface plana, bastando para isto adotar uma razão de partição de fases,  $K_p$ , próxima de zero, a fim de representar a não incorporação de soluto no sólido, típica destas soluções. Estas ligas são muitas vezes usadas em experimentações pelo fato de suas temperaturas de mudança de fase serem próximas da temperatura ambiente, facilitando a instrumentação e permitindo uma fácil visualização da evolução da interface ao longo do tempo.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Anderson, B., 1976. "Solar Energy: Fundamentals in Building Design", McGraw-Hill, Harrisville, New Hampshire.

Arpaci, V.S., Larsen, P.S., 1984. "Convection Heat Transfer", Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey.

Battle, T.P., 1992. "Mathematical modelling of solute segregation in solidifying materials", International Materials Reviews, vol. 37, no. 6, pp. 249-270.

Beckermann, C., Viskanta, R., 1988. "Double-diffusive convection during dendritic solidification of a binary mixture", PhysicoChemical Hydrodynamic, vol. 10, pp. 195-213.

Bellecci, C., Conti, M., 1993. "Phase change thermal storage : transient behaviour analysis of a solar receiver/storage module using the enthalpy method", Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 36, no. 8, pp. 2157-2163.

Bénard C., Gobin D., Zanolli A., 1986. "Moving boundary problem : heat conduction in the solid phase of a phase change material during melting driven by natural convection in the liquid", Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 29, no. 11, pp. 1669-1681.

Bennon, W. D., Incropera, F.P., 1987. "A Continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems - I. Model formulation", Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 30, no. 10, pp. 2161-2170.

Bennon, W. D., Incropera, F.P., 1987. "A Continuum model for momentum, heat and species transport in binary solid-liquid phase change systems - II. Application to solidification in a rectangular cavity", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 30, no. 10, pp. 2171-2187.

Bennon, W. D., Incropera, F.P., 1988. "Numerical Analysis of Binary Solid-Liquid Phase Change Using a Continuum Model", *Numerical Heat Transfer*, vol. 13, pp. 277-296.

Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N., 1960. "Transport Phenomena", Wiley, New York.

Braga, S.L., Viskanta, R., 1990. "Solidification of a binary solution on a cold isothermal surface", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 33, no. 4, pp. 745-754.

Cao, Y., Faghri, A., Chang, W.S., 1989. "A numerical analysis of Stefan problems for generalized multi-dimensional phase-change structures using the enthalpy transforming model", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 32, no. 7, pp. 1289-1298.

Cao, Y., Faghri, A., 1990. "A Numerical Analysis of Phase-Change Problems Including Natural Convection", *Journal of Heat Transfer*, vol. 112, pp. 812-816.

Carslaw, H.S., Jaeger, J.C., 1959. "Conduction of Heat in Solids", Oxford University Press.

Clyne, T.W., Garcia, A., 1980. "Assessment of a New Model for Heat Flow During Unidirectional Solidification of Metals", *Int. J. Heat Mass Transfer* vol. 23, pp. 773-782.

Clyne, T.W., 1982. "The Use of Heat Flow Modeling to Explore Solidification Phenomena", *Metallurgical Transactions B*, vol. 13B, pp. 471-478.

Clyne, T.W., 1984. "Modelling of Heat Flow in Solidification", *Materials Science and Engineering*, vol. 65, pp. 111-124.

Crank, J., 1984. "Free and Moving Boundary Problems", Clarendon Press, Oxford.

Christenson, M.S., Incropera, F.P., 1989. "Solidification of an aqueous ammonium chloride solution in a rectangular cavity - I. Experimental study", *Int. J. Heat Mass Transfer* vol. 32, pp. 47-68.

Christenson, M.S., Bennon, W.D., and Incropera, F.P., 1989. "Solidification of an aqueous ammonium chloride solution in a rectangular cavity - II. Comparison of predicted and measured results", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 32, pp. 69-79.

Duffie, J.A., Beckman, W.A., 1980. "Solar Engineering of Thermal Processes", John Wiley & Sons, Wisconsin-Madison.

Faghri, M., Sparrow, E.M., Prata, A.T., 1984. "Finite-Difference Solutions of Convection-Diffusion Problems in Irregular Domains, Using a Non-Orthogonal Coordinate Transformation", *Numerical Heat Transfer*, vol. 7, pp. 183-209.

Flemings, M.C., 1974. "Solidification Processing", McGraw-Hill, New York.

Garcia, A., Prates, M., 1978. "Mathematical Model for the Unidirectional Solidification of Metals: I. Cooled Molds", *Metallurgical Transactions B*, vol. 9B, pp. 449-457.

Garcia, A., Clyne, T.W., Prates, M., 1979. "Mathematical Model for the Unidirectional Solidification of Metals: II. Massive Molds", *Metallurgical Transactions B*, vol. 10B, pp. 85-92.

Gau, C., Viskanta, R., 1986. "Melting and Solidification of Pure Metal on a Vertical Wall", *Journal of Heat Transfer*, vol. 108, pp. 174-181.

Gobin, D., Bernard, C., 1989. "Melting of Metals in Rectangular Enclosures : Numerical Results", *Anais do X COBEM*, pp. 229-232.

Ho, K., Pehlke, R.D., 1984. "Mechanisms of Heat Transfer at a Metal-Mold Interface", *AFS Transactions*, pp. 587-598.

Ho, K., Pehlke, R.D., 1985. "Metal-Mold Interfacial Heat Transfer", *Metallurgical Transactions B*, vol. 16, pp. 585-594.

Huang, C.H., Ozisik, M.N., Sawaf, B., 1992. "Conjugate gradient method for determining unknown contact conductance during metal casting", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 35, no. 7, pp. 1779-1786.

Jany, P., Bejan, A., 1988. "Scaling Theory of Melting with Natural Convection in an Enclosure", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 31, pp. 1221-1235.

Jeyarajan, A., Pehlke R.D., 1976. "Computer Simulation of Solidification of a Casting with a Chill", *AFS Transactions*, pp. 647-652.

Kaviany, M., 1992. "Heat Transfer in Porous Media", Springer Verlag, New York.

Kurz, W., Fisher, D.J., 1986. "Fundamentals of Solidification" Trans Tech Publication, Switzerland.

Lacroix, M., Voller, V.R., 1990. "Finite Difference Solutions of Solidification Phase Change Problems: Transformed Versus Fixed Grids", *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 17, pp. 25-41.

Langford, D., 1973. "The Heat Balance Integral Method", Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 16, pp. 2424-2428.

McDonald R.J., Hunt J.D., 1969. "Fluid motion through the partially solid regions of a casting and its importance in understanding A type segregation", Trans. Metallurgical Society of AIME., 245, pp. 1993-1997.

Minkoff, I., 1986. "Solidification and Cast Structure", John Wiley & Sons.

Morgan, K., 1981. "A Numerical Analysis of Freezing and Melting With Convection", Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 28, no. 3, pp. 275-284.

Müller, A. "Curso de Metalurgia Física - Solidificação", apostila, DEMET/UFRGS.

Neilson, D. G., Incropera, F.P., 1991. "Unidirectional solidification of a binary alloy and the effects of induced fluid motion", Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 34, no. 7, pp. 1717-1732.

Neumann, F., 1860. "Die Partiellen Differentialgleichungen der Mathematischen Physik", Cf. Riemann-Weber, ed. 5, 1912, vol. 2, p.121.

Ozisik, M. N., 1980. "Heat Conduction", John Wiley & Sons, New York.

Patankar, S.V., 1980. "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", McGraw-Hill, New York.

Pokorny, A.J., 1966. "De Ferri Metallographia", vol. III, p. 27, Luxembourg.

Prakash, C., Voller V., 1989. "On the numerical solution of continuum mixture model equations describing binary solid-liquid phase change", Numerical Heat Transfer, Part B, vol. 15, pp. 171-189.

Prakash, C., 1990. "Two-phase model for binary solid-liquid phase change, part I : governing equations", Numerical Heat Transfer, Part B, vol. 18, pp. 131-145.

Prakash, C., 1990. "Two-phase model for binary solid-liquid phase change, part II : some illustrative examples", Numerical Heat Transfer, Part B, vol. 18, pp. 147-167.

Prata, A. T., 1990. "Transferência de Calor com Mudança de Fase", notas de aula, CPGEM/UFSC.

Prata, A. T., 1991. "Convecção Avançada", notas de aula, CPGEM/UFSC.

Prescott, P.J., Incropera, F.P., Bennon, W.D., 1991. "Modeling of dendritic solidification systems: reassessment of the continuum momentum equations", Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 34, no. 9, pp. 2351-2359.

Prescott, P.J., Incropera, F.P., 1991. "Numerical Simulation of a Solidifying Pb-Sn Alloy : The Effects of Cooling Rate on Thermosolutal Convection and Macrosegregation", Metallurgical Transactions B, vol. 22B, pp. 529-540.

Schwarz, C., 1933. Z. Angew. Math. Mech., vol. 13, p. 202.

Shamsundar, N., Sparrow, E.M., 1975. "Analysis of Multidimensional Conduction Phase Change Via Enthalpy Model", Journal of Heat Transfer, vol. 97, no. 3, pp. 333-340.

Smith, V.G., Tiller, W.A., Rutter, J.W., 1955. "A Mathematical Analysis of Solute Redistribution During Solidification", *Canadian Journal of Physics*, vol. 33, pp. 723-745.

Solomon, A.D., Morris, M.D., Martin, J., Olszewski, M., 1986. "The development of a simulation code for a latent heat thermal energy storage system in a space station", Technical Report ORNL-6213.

Souza Mendes, P.R., Pinho Brasil Jr., A.C., 1987. "Heat Transfer During Melting Around an Isothermal Vertical Cylinder", *Journal of Heat Transfer*, vol. 109, pp. 961-964.

Sparrow, E.M., Patankar, S.V., Ramadhyani, S., 1977. "Analysis of Natural Convection in the Melt Region", *Journal of Heat Transfer*, vol. 99, pp. 520-526.

Stefan, J., 1891. "Ueber die Theorie der Eisbildung, insbesondere über die Eisbildung im Polarmeere", *Ann. Phys. u. Chem. (Wiederann) N.F.* 42, pp. 269-286.

Sully, L.J.D., 1976. "The Thermal Interface Between Castings and Chill Molds", *AFS Transactions*, pp. 735-744.

Sundarraaj, S., Voller, V.R., 1993. "The binary alloy problem in an expanding domain : the microsegregation problem", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 36, no. 3, pp. 713-723.

Szekely, J., Jassal A.S., 1978. "An experimental and analytical study of the solidification of a binary dendritic system", *Metallurgical Transactions B*, vol. 9B, pp. 389-398.

Tiller, W.A., Jackson, K.A., Rutter, J.W., Chalmers, B., 1953. *Acta Metallurgica et Materialia*, vol. 1, pp. 428-437.

Van Vlack, L., 1964. *Elements of Materials Science*, Addison Wesley Co. Inc..

Viskanta, R., 1983. "Phase-Change Heat Transfer in Solar Heat Storage: Latent Heat Materials", G.A. Lane, ed. CRC Press Inc., Boca Raton, Fl., pp. 153-222.

Viskanta, R., 1988. "Heat Transfer During Melting and Solidification of Metals", Journal of Heat Transfer, vol. 110, pp. 1205-1219.

Voller, V. R., Cross, M., 1980. "Accurate Solutions of Moving Boundary Problems Using the Enthalpy Method", Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 24, pp. 545-556.

Voller, V. R., Prakash, C., 1987. "A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems", Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 30, no. 8, pp. 1709-1719.

Voller, V.R., Brent A.D., Prakash, C., 1989. "The modelling of heat, mass and solute transport in solidification systems", Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 32, no. 9, pp. 1719-1731.

Wolff, F., Viskanta, R., 1987. "Melting of a Pure Metal from a Vertical Wall", Experimental Heat Transfer, vol. 1, pp. 17-30.

Zeng, X.C., Pehlke R.D., 1985. "Analysis of Heat Transfer at Metal-Sand Mold Boundaries and Computer Simulation of Solidification of a Gray Iron Casting", AFS Transactions pp. 275-282.

## BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

Askar, H.G., Abdul-Latif, W., 1989. "On the Front-Tracking Scheme for Phase-Change Problems", *Communications in Applied Numerical Methods*, vol. 5, pp. 507-513.

Backerud, L., Chalmers, B., 1969. "Some Aspects of Dendritic Growth in Binary Alloys: Study of the Aluminum-Copper System", *Trans. of the Metallurgical Society of AIME*, vol. 245, pp. 309-318.

Beckermann, C., Viskanta, R., 1989. "Effect of Solid Subcooling on Natural Convection Melting of a Pure Metal", *Journal of Heat Transfer*, vol. 111, pp. 417-424.

Beffel, M.J., Wilkes, J.O., Pehlke, R.D., 1986. "Finite Element Simulation of Casting Processes", *AFS Transactions*, pp. 757-764.

Bénard, C., Gobin, D., Martinez, F., 1985. "Melting in Rectangular Enclosures: Experiments and Numerical Simulations", *Journal of Heat Transfer*, vol. 107, pp. 794-803.

Bennon, W.D., Incropera, F.P., 1987. "The Evolution of Macrosegregation in Statically Cast Binary Ingots", *Metallurgical Transactions B*, vol. 18B, pp. 611-616.

Basu, B., Date, A.W., 1992. "Rapid solidification following laser melting of pure metals - I. Study of flow field and role of convection", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 35, no. 5, pp. 1049-1058.

Basu, B., Date, A.W., 1992. "Rapid solidification following laser melting of pure metals - II. Study of pool and solidification characteristics", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 35, no. 5, pp. 1059-1067.

Braga, S.L., Viskanta, R., 1990. "Solidification of Solutions on a Horizontal Surface", 3<sup>rd</sup> Brazilian Thermal Science Meeting, Itapema, SC, pp. 683-687.

Cahn, R.W., Haasen, P., (editors) 1983. "Physical Metallurgy", third ed., North-Holland Physics Publishing.

Caram, R.J., 1988. "Modelagem Matemática, Simulação e Otimização do Processo de Solidificação", Tese de Doutorado, Depto. de Engenharia Mecânica, UNICAMP, Campinas, SP.

Choi, C.-Y., Hsieh, C.K., 1992. "Solution of Stefan problems imposed with cyclic temperature and flux boundary conditions", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 35, no. 5, pp. 1181-1195.

Cipriano, L.C., Souza Mendes, P.R., 1989. "Two-Dimensional Simulation of the Continuous Casting Process", 10<sup>th</sup> Brazilian Congress of Mechanical Engineering, Rio de Janeiro, RJ, pp. 225-228.

Copley, S.M., Giamei, A.F., Johnson, S.M., Hornbecker, M.F., 1970. "The Origin of Freckles in Unidirectionally Solidified Castings", *Metallurgical Transactions*, vol. 1, pp. 2193-2204.

Date, A.W., 1992. "Novel Strongly Implicit Enthalpy Formulation for Multidimensional Stefan Problems", *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 21, pp. 231-251.

Davis, S.H., 1990. "Hydrodynamic interactions in directional solidification", *J. Fluid Mechanics*, vol. 212, pp. 241-262.

Dupouy, M.D., Camel, D., Favier, J.J., 1992. "Natural Convective Effects in Directional Dendritic Solidification of Binary Metallic Alloys: Dendritic Array Primary Spacing", *Acta Metallurgica et Materialia*, vol. 40, no. 7, pp. 1791-1801.

Every, A.G., Tzou, Y., Hasselman, D.P.H., Raj, R., 1992. "The Effect of Particle Size on the Thermal Conductivity of ZnS/Diamond Composites", *Acta Metallurgica et Materialia*, vol. 40, no. 1, pp. 123-129.

Fang, L.J., Cheung, F.B., Linehan, J.H., 1984. "Selective Freezing of a Dilute Salt Solution on a Cold Ice Surface", *Journal of Heat Transfer*, vol. 106, pp. 385-393.

Felicelli, S.D., Heinrich, J.C., Poirier, D.R., 1991. "Simulation of Freckles during Vertical Solidification of Binary Alloys", *Metallurgical Transactions B*, vol. 22B, pp. 847-859.

Felicelli, S.D., Heinrich, J.C., Poirier, D.R., 1993. "Numerical Model for Dendritic Solidification of Binary Alloys", *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 23, pp. 461-481.

Flemings, M.C., Nereo, G.E., 1967. "Macrosegregation : Part I", *Trans. of the Metallurgical Society of AIME*, vol. 239, pp. 1449-1461.

Flemings, M.C., Mehrabian, R., Nereo, G.E., 1968. "Macrosegregation : Part II", *Trans. of the Metallurgical Society of AIME*, vol. 242, pp. 41-49.

Flemings, M.C., Nereo, G.E., 1968. "Macrosegregation : Part III". *Trans. of the Metallurgical Society of AIME*, vol. 242, pp. 50-55.

Forth, S.A., Wheeler, A.A., 1992. "Coupled convective and morphological instability in a simple model of the solidification of a binary alloy, including a shear flow", *J. Fluid Mech.*, vol. 236, pp. 61-94.

Gadgil, A., Gobin, D., 1984. "Analysis of Two-Dimensional Melting in Rectangular Enclosures in Presence of Convection", *Journal of Heat Transfer*, vol. 106, pp. 20-26.

Ganesan, S., Poirier, D.R., 1990. "Conservation of Mass and Momentum for the Flow of Interdendritic Liquid during Solidification", *Metallurgical Transactions B*, vol. 21B, pp. 173-181.

Garcia, A., Prates, M., 1983. "The Application of a Mathematical Model to Analyse Ingot Thermal Behaviour During Continuous Casting", *Steelmaking and Continuous Casting*, pp. 273-279.

Gorbunov, A.V., 1992. "Parameters of Melting Dendrites in NaCl", *Acta Metallurgica et Materialia*, vol. 40, no. 3, pp. 513-517.

Griffith, R., Nassersharif, B., 1990. "Comparison of One-Dimensional Interface-Following and Enthalpy Methods for the Numerical Solution of Phase Change", *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 18, pp. 169-187.

Heinrich, J.C., Felicelli, S., Poirier, D.R., 1991. "Vertical solidification of dendritic binary alloys", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 89, pp. 435-461.

Ho, C.-J., Viskanta, R., 1984. "Heat Transfer During Melting From an Isothermal Vertical Wall", *Journal of Heat Transfer*, vol. 106, pp. 13-19.

Hou, T.X., Pehlke, R.D., 1985. "Determination of Thermal Diffusivity of Al-13% Si Alloy by Monitoring Casting Solidification and Cooling", AFS Transactions, pp. 493-500.

Hou, T.X., Pehlke, R.D., 1986. "Computation of Solidification of a Steel Casting in a Sand Mold", AFS Transactions, pp. 477-484.

Hsu, C.F., Sparrow, E.M., Patankar, S.V., 1981. "Numerical Solution of Moving Boundary Problems by Boundary Immobilization and a Control-Volume-Based Finite-Difference", Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 24, no. 8, pp. 1335-1343.

Hunt, J.D., McCartney, D.G., 1987. "Numerical Finite Difference Model for Steady State Cellular Array Growth", Acta Metallurgica et Materialia, vol. 35, no. 1, pp. 89-99.

Huppert, H.E., Worster, M.G., 1985. "Dynamic solidification of a binary melt", Nature, vol. 314, pp. 703-707.

Huppert, H.E., 1990. "The fluid mechanics of solidification", J. Fluid Mechanics, vol. 212, pp. 209-240.

Ierardi, M.C.F., 1989. "Modelagem Matemática e Simulação do Processo de Lingotamento Contínuo de Aços", Tese de Doutorado, Depto. de Engenharia de Materiais, UNICAMP, Campinas, SP.

Jackson, K.A., 1974. "The Present State of the Theory of Crystal Growth from the Melt", Journal of Crystal Growth, 24/25, pp. 130-136.

Kanetkar, C.S., Chen, I.G., Stefanescu, D.M., El-Kaddah, N., 1988. "A Latent Heat Method for Macro-Micro Modeling of Eutectic Solidification", Transactions ISIJ, vol. 28, pp. 860-868.

Kim, C.-J., Kaviany, M., 1992. "A numerical method for phase-change problems with convection and diffusion", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 35, no.2, pp. 457-467.

Lacroix, M., 1989. "Computation of Heat Transfer During Melting of a Pure Substance from an Isothermal Wall", *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 15, pp. 191-210.

Lacroix, M., 1991. "Effects of Buoyancy and Surface Tension Forces on the Melting of a Metal", *Numerical Heat Transfer, Part A*, vol. 19, pp. 101-115.

Lacroix, M., 1992. "Predictions of Natural Convection Dominated Phase-Change Problems by the Vorticity-Velocity Formulation of the Navier-Stokes Equations", *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 22, pp. 79-93.

Laxmanan, V., 1985. "Dendritic Solidification - I. Analysis of Current Theories and Models", *Acta Metallurgica et Materialia*, vol. 33, no. 6, pp. 1023-1035.

Laxmanan, V., 1985. "Dendritic Solidification - II. A Model for Dendritic Growth under an Imposed Thermal Gradient" , *Acta Metallurgica et Materialia*, vol. 33, no. 6, pp. 1037-1049.

Laxmanan, V., 1985. "Dendritic Solidification - III. Some Further Refinements to the Model for Dendritic Growth under an Imposed Thermal Gradient" , *Acta Metallurgica et Materialia*, vol. 33, no. 8, pp. 1475-1480.

Lee, S.L., Tzong, Y., 1991. "An enthalpy formulation for phase change problems with a large thermal diffusivity jump across the interface", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 34, no. 6, pp. 1491-1502.

Liu, A., Voth, T.E., Bergman, T.L., 1993. "Pure material melting and solidification with liquid phase buoyancy and surface tension forces", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 36, no. 2, pp. 411-422.

Maxwell, I., Hellawell, A., 1975. "A Simple Model for Grain Refinement During Solidification", *Acta Metallurgica et Materialia*, vol. 23, pp. 229-237.

Nandapurkar, P.J., Poirier, D.R., Heinrich, J.C., 1991. "Momentum Equation for Dendritic Solidification", *Numerical Heat Transfer, Part A*, vol. 19, pp. 297-311.

Neilson, D.G., Incropera, F.P., 1993. "Effect of rotation on fluid motion and channel formation during unidirectional solidification of a binary alloy", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 36, no. 2, pp. 489-505.

Neilson, D.G., Incropera, F.P., 1993. "Three-Dimensional Considerations of Unidirectional Solidification in a Binary Liquid", *Numerical Heat Transfer, Part A*, vol. 23, pp. 1-20.

Ni, J., Beckermann, C., 1991. "A Volume-Averaged Two-Phase Model for Transport Phenomena during Solidification", *Metallurgical Transactions B*, vol. 22B, pp. 349-361.

Poirier, D.R., Nandapurkar, P.J., Ganesan, S., 1991. "The Energy and Solute Conservation Equations for Dendritic Solidification", *Metallurgical Transactions B*, vol. 22B, pp. 889-900.

Pražák, J., Pátek, J., 1992. "Simulation of convective temperature oscillations in phase-change processes", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 35, no. 2, pp. 393-401.

Prud'Homme, M., Nguyen, T.H., Mao, P.G., 1993. "Étude numérique du changement de phase autour d'un cylindre isotherme en rotation", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 36, no. 11, pp. 2837-2846.

Raw, W.Y., Lee, S.L., 1991. "Application of Weighting Function Scheme on Convection-Conduction Phase Change Problems", *Int. J. Heat Transfer*, vol. 34, no. 6, pp. 1503-1513.

Roósz, A., Gácsi, Z., Fuchs, G., 1984. "Solute Redistribution During Solidification and Homogenization of Binary Solid Solution", *Acta metall.*, vol. 32, no. 10, pp. 1745-1754.

Saitou, M., Hirata, A., 1992. "Numerical Solution of the Unsteady Solidification Problem with a Solute Element by Using the Boundary-Fitted Coordinate System", *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 22, pp. 63-77.

Sample, A., Hellawell, A., 1982. "The Effect of Mold Precession on Channel and Macro-Segregation in Ammonium Chloride-Water Analog Castings", *Metallurgical Transactions B*, vol. 13B, 495-501.

Sarreal, J.A., Abbaschian, G.J., 1986. "Effect of Solidification Rate on Microsegregation", *Metallurgical Transactions A*, vol. 17A, pp. 2063-2072.

Solari, M., Biloni, H., 1975. "Programa Multinacional de Metalurgia, Soluciones Numericas", *Comision Nacional de Energia Atomica, Buenos Aires, Argentina.*

Swaminathan, C.R., Voller, V.R., 1992. "Streamline Upwind Scheme for Control-Volume Finite Elements, Part I. Formulations", *Numerical Heat Transfer, Part B*, vol. 22, pp. 95-107.

Swaminathan, C.R., Voller, V.R., 1992. "Streamline Upwind Scheme for Control-Volume Finite Elements, Part II. Implementation and Comparison with the SUPG Finite-Element Scheme", Numerical Heat Transfer, Part B, vol. 22, pp. 109-124.

Szekely, J., Thompson, M.E., 1988. "Mathematical and physical modelling of double-diffusive convection of aqueous solutions crystallizing at a vertical wall", J. Fluid Mech..

Tzong, R.Y., Lee, S.L., 1992. "Solidification of arbitrarily shaped casting in mold-casting system", Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 35, no. 11, 2795-2803.

Vabishchevich, P., Iliev, O., 1989. "Numerical Investigation of Heat and Mass Transfer During the Crystallization of Metal in a Mould", Communications in Applied Numerical Methods, vol. 5, pp. 515-526.

Verhoven, J.D., 1975. "Fundamentals of Physical Metallurgy", John Wiley & Sons.

Vodák, F., Cerny, R., Prikryl, P., 1992. "A model of binary alloy solidification with convection in the melt", Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 35, no. 7, pp. 1787-1793.

Voller, V.R., Swaminathan, C.R., 1991. "General Source-Based Method for Solidification Phase Change", Numerical Heat Transfer, Part B, vol. 19, pp. 175-189.

Voller, V.R., 1992. "Enthalpy Method for Inverse Stefan Problems", Numerical Heat Transfer, Part B, vol. 21, pp. 41-55.

Webb, B.W., Viskanta, R., 1986. "Analysis of Heat Transfer During Melting of a Pure Metal from an Isothermal Vertical Wall", Numerical Heat Transfer, vol. 9, pp. 539-558.

Winter, B.P., Ostrom, T.R., Hartman, D.J., Trojan P.K., Pehlke, R.D., 1984. "Mold Dilatation and Volumetric Shrinkage of White, Gray, and Ductile Cast Irons", AFS Transactions, pp. 551-560.

Zeng, X.C., Pehlke, R.D., 1984. "Numerical Simulation of Solidification for a Copper-Base Alloy Casting", AFS Transactions, pp. 479-488.

## APÊNDICE

## SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE FOURIER EM UMA DIMENSÃO

A equação da condução de calor, em uma dimensão e em regime transiente, é a seguinte

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{I.1})$$

Esta equação pode ser resolvida através da seguinte transformação de variáveis

$$\eta = \frac{x}{2\sqrt{\alpha t}} \quad (\text{I.2})$$

Transformando as derivadas para a nova variável

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial T}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} \quad \text{mas} \quad \frac{\partial \eta}{\partial t} = -\frac{\eta}{2t}$$

então

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\eta}{2t} \frac{\partial T}{\partial \eta} \quad (\text{I.3})$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial T}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \frac{\partial T}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{\partial^2 T}{\partial \eta^2} \left( \frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial T}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial^2 \eta}{\partial \eta \partial x}$$

mas

$$\left( \frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 = \frac{1}{4\alpha t} \quad \text{e} \quad \frac{\partial^2 \eta}{\partial \eta \partial x} = 0$$

então

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{1}{4\alpha t} \frac{\partial^2 T}{\partial \eta^2} \quad (\text{I.4})$$

Substituindo (I.3) e (I.4) na eq. (I.1), obtém-se a seguinte equação diferencial ordinária

$$\frac{d^2 T}{d\eta^2} + 2\eta \frac{dT}{d\eta} = 0 \quad (\text{I.5})$$

ou

$$T'' + 2\eta T' = 0 \quad (\text{I.6})$$

Transformando as variáveis,  $T'' = T'$  e  $T' = T$ ,

$$T' + 2\eta T = 0 \quad (\text{I.7})$$

ou

$$\frac{dT}{d\eta} + 2\eta T = 0 \quad (\text{I.8})$$

Multiplicando por  $d\eta/T$  e separando as variáveis

$$\frac{dT}{T} = -2\eta d\eta \quad (\text{I.9})$$

integrando

$$T = C e^{-\eta^2} \quad (\text{I.10})$$

mas, da transformação de variáveis executada

$$\frac{dT}{d\eta} = C e^{-\eta^2} \quad \text{ou} \quad dT = C e^{-\eta^2} d\eta \quad (\text{I.11})$$

integrando novamente

$$T(x, t) = C_1 \int e^{-\eta^2} d\eta + C_2 \quad (\text{I.12})$$

limitando a integral

$$T(x, t) = C_1 \int_0^{\eta} e^{-\eta^2} d\eta + C_2 \quad (\text{I.13})$$

Estabelecendo as seguintes condições de contorno

$$\eta = 0 \rightarrow T = A \rightarrow C_2 = A \quad (\text{I.14})$$

$$\eta \rightarrow \infty \rightarrow T = D \rightarrow D = C_1 \int_0^{\infty} e^{-\eta^2} d\eta + A \quad (I.15)$$

Da definição de função erro, fazendo  $\beta = \eta$

$$\text{erf}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\eta} e^{-\eta^2} d\eta \quad (I.16)$$

e como  $\text{erf}(\infty) = 1$ , tem-se que

$$\int_0^{\infty} e^{-\eta^2} d\eta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (I.17)$$

substituindo em (I.15)

$$D = C_1 \frac{\sqrt{\pi}}{2} + A \quad \rightarrow \quad C_1 = (D - A) \frac{2}{\sqrt{\pi}} = B \frac{2}{\sqrt{\pi}} \quad (I.18)$$

Substituindo  $C_1$  e  $C_2$  em (I.13)

$$T(x,t) = B \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\eta} e^{-\eta^2} d\eta + A \quad (I.19)$$

ou

$$T(x,t) = A + B \text{erf}(\eta) \quad \left( \eta = \frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \quad (I.20)$$

Aplicando as condições de contorno

$$x = 0 \rightarrow T = T_p \rightarrow A = T_p, \text{ já que } \text{erf}(0) = 0 \quad (I.21)$$

$$x = \delta \rightarrow T = T^* \quad (I.22)$$

$$T^* = T_p + B \text{erf} \left( \frac{\delta}{2\sqrt{at}} \right) \quad \rightarrow \quad \text{erf} \left( \frac{\delta}{2\sqrt{at}} \right) = \frac{T^* - T_p}{B} = \text{constante}$$

portanto

$$\frac{\delta}{2\sqrt{at}} = \text{constante} = \Omega \quad (I.23)$$

Desta forma, como

$$B = \frac{T^* - T_p}{\operatorname{erf}(\Omega)} \quad (\text{I.24})$$

a solução fica

$$T(x,t) = T_p + \frac{T^* - T_p}{\operatorname{erf}(\Omega)} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{x/2\sqrt{at}} e^{-\beta^2} d\beta \quad (\text{I.25})$$

ou

$$T(x,t) = T_p + \frac{T^* - T_p}{\operatorname{erf}(\Omega)} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{at}}\right) \quad (\text{I.26})$$